



Miljøministeriet
Miljøstyrelsen

Bilagsrapport:

Konceptuel model for transport og skæbne af PFAS ved forurenede grunde

Indhold

Bilag 1: Review af danske og internationale erfaringer med konkrete undersøgelser af PFAS forurenede grunde	5
1. Indledning	6
1.1 Baggrund og formål	6
2. Danske undersøgelser af PFAS i jord og grundvand	8
2.1 Analyse af PFAS	8
2.2 Oversigt over brancher, der anvender PFAS	9
2.3 Erfaringer fra Regionernes undersøgelser på forurenede lokaliteter frem til 2023	15
2.3.1 Koncentrationer og detektionsfrekvens af PFAS i grundvand på forurenede lokaliteter	18
2.3.2 Koncentrationer og detektionsfrekvens af PFAS i jord på forurenede lokaliteter	21
2.3.3 Fordeling af påviste koncentrationer i jord- og grundvandsprøver over dybden	24
2.3.4 Erfaringer med udvidede analysepakker (udover PFAS 22)	27
2.4 Vigtigste erfaringer fra danske undersøgelser	28
3. Gennemgang af udvalgte danske lokaliteter	29
3.1 Valg af lokaliteter	29
3.2 Oversigt over udvalgte lokaliteter	29
3.3 Lokalitet 1	30
3.3.1 Koncentrationsniveauer	30
3.3.2 Vigtigste resultater	31
3.3.3 Udarbejdet lokal specifik konceptuel model	33
3.4 Lokalitet 2	34
3.4.1 Koncentrationsniveauer	34
3.4.2 Vigtigste resultater	35
3.4.3 Udarbejdet lokal specifik konceptuel model	37
3.5 Lokalitet 3	37
3.5.1 Koncentrationsniveauer	37
3.5.2 Vigtigste resultater	38
3.5.3 Udarbejdet lokal specifik konceptuel model	39
3.6 Lokalitet 4	40
3.6.1 Koncentrationsniveauer	40
3.6.2 Vigtigste resultater	41
3.6.3 Udarbejdet lokal specifik konceptuel model	41
3.7 Lokalitet 5	42
3.7.1 Koncentrationsniveauer	42
3.7.2 Vigtigste resultater	43
3.7.3 Udarbejdet lokal specifik konceptuel model	43
3.8 Lokalitet 6	44
3.8.1 Koncentrationsniveauer	44
3.8.2 Vigtigste resultater	45

3.8.3	Udarbejdet lokal specifik konceptuel model	46
3.9	Lokalitet 7	46
3.9.1	Koncentrationsniveauer	47
3.9.2	Vigtigste resultater	47
3.9.3	Udarbejdet lokal specifik konceptuel model	48
3.10	Lokalitet 8	48
3.10.1	Koncentrationsniveauer	48
3.10.2	Vigtigste resultater	49
3.10.3	Udarbejdet lokal specifik konceptuelle modeller	49
3.11	Lokalitet 9	51
3.11.1	Koncentrationsniveauer	52
3.11.2	Vigtigste resultater	53
3.11.3	Udarbejdet lokal specifik konceptuel model	55
3.12	Lokalitet 10	55
3.12.1	Koncentrationsniveauer	56
3.12.2	Vigtigste resultater	57
3.12.3	Udarbejdet lokal specifik konceptuel model	58
3.13	Vigtigste erfaringer fra gennemgangen af de udvalgte lokaliteter	59
4.	Vigtige internationale erfaringer	61
4.1	Indhold i AFFF brandslukningsskum	61
4.2	Forekomst af PFAS, hvor der har været anvendt AFFF brandslukningsskum	64
4.2.1	Jordprøver	64
4.2.2	Grundvandsprøver	67
4.2.3	Overfladevandprøver	68
4.2.4	Sammenstilling af data på tværs af medier	69
4.3	Forslag til analyseprogram - fra Canada	70
4.4	Eksempel på vertikal fordeling af PFAS under en brandøvelsesplads.	71
4.5	Katalog over konceptuelle modeller	72
4.5.1	Konceptuel model over PFAS kilder, sprednings- og eksponeringsveje	72
4.5.2	Konceptuel model for brandøvelsespladser/luftthavne	73
4.5.3	Konceptuelle modeller over forureningsfaner	75
5.	Nuværende konceptuel forståelse og identifikation af videnshuller	77
5.1	Forekomst af PFAS i forskellige brancher påviste stoffer	77
5.1.1	Der mangler viden om precursorer	77
5.2	Analysepakker – behov for udvidelser?	78
5.2.1	Der mangler viden om ultra korte PFAS	79
5.3	Betydning af forureningens alder for PFAS sammensætning	79
5.4	Transport i umættet og mættet zone og ændring af forureningens sammensætning	79
6.	Opsummering	81
7.	Referencer	84
8.	Appendix 1	89
Bilag 2:	PFAS transport i jord, grundvand og umættet zone - Oversigt over relevante processer og litteratur om modellering	91

1.	Introduktion	92
2.	Grundlæggende processer og ligninger/modeller for at beskrive dem	93
2.1	Vandstrømning i den mættede og umættede zone	95
2.2	Transport af PFAS i den umættede zone og i grundvandet	97
2.2.1	Sorption til jordmateriale	97
2.2.2	Sorption til luft-vand grænseflade	98
2.2.3	Den samlede retardation	98
2.2.4	Hvordan kan luft-vandgrænsefladearealet A_{ia} bestemmes?	99
2.2.5	Hvordan kan fordelingskoefficienten K_{ia} bestemmes?	102
2.2.6	Indflydelse af heterogeniteter og præferentielle strømning på PFAS transport	104
2.2.7	Nedbrydning og biotransformation	105
3.	Hvilke modeller og software bliver brugt?	106
3.1.1	Nogle åbne spørgsmål vedr. modellering af PFAS i jord og grundvand:	108
4.	Referencer	109
Bilag 3: Overblik over tilgængelige estimeringsmodeller, som kan bestemme relevante fysisk-kemiske parametre for PFAS som input i transport-modeller		114
1.	Introduktion	115
2.	OECD (Q)SAR principper	116
3.	Estimeringsmodeller og sammenligning med eksperimentelle data	117
3.1	Organisk kulstof-vand fordelingskoefficient	121
3.2	Luft-vand fordelingskoefficient og luft-vand grænseflade	123
4.	Konklusion	125
5.	Referencer	126
Bilag 4: Parameterliste		128
Bilag 5: Modelparametre		129

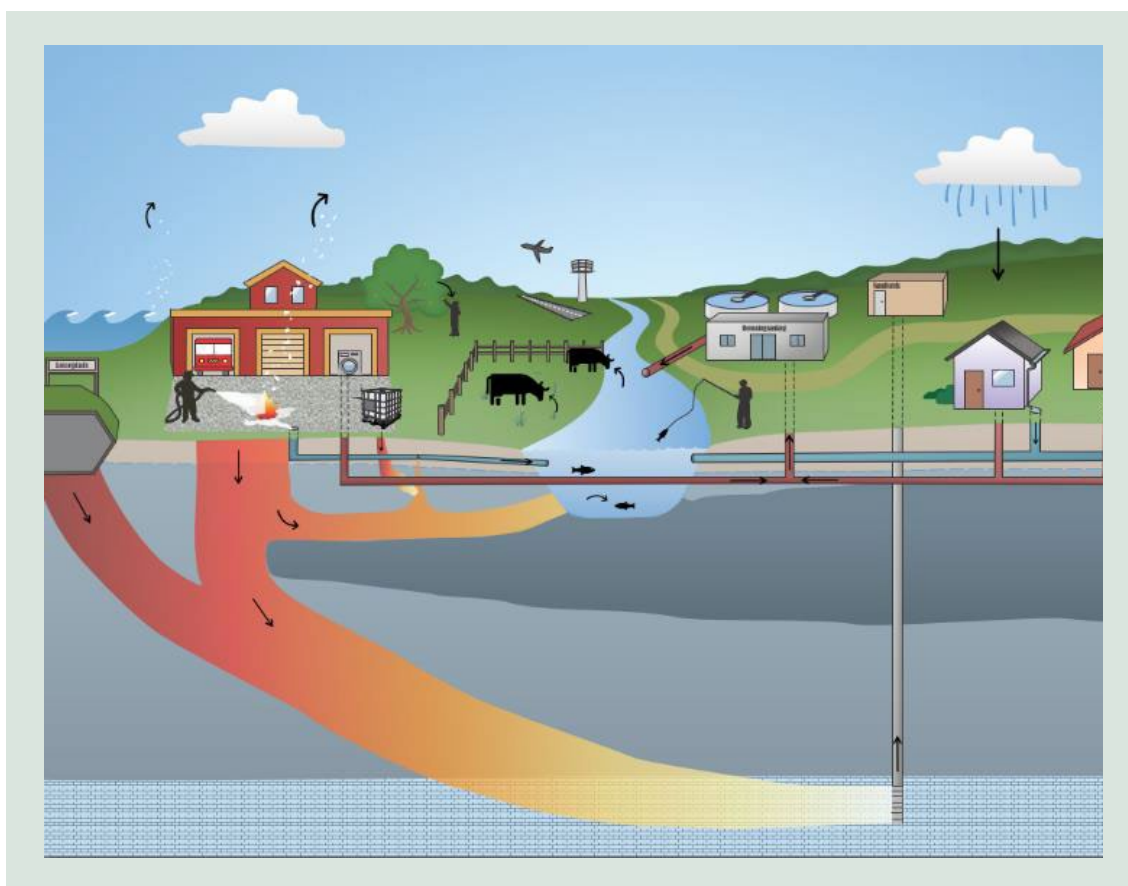
Bilag 1:
Review af danske og internationale
erfaringer med konkrete undersøgelser
af PFAS forurenede grunde

1. Indledning

Dette notat er afrapportering for en del af fase 1 af Projekt 9 "Konceptuel model for transport og skæbne af PFAS ved forurenede grunde", igangsat som følge af Videnstaskforcen for PFAS anbefalinger, nedsat af Miljøstyrelsen i 2023 (Baun et al., 2023). Projektet udføres af DTU Sustain i samarbejde med WSP og NIRAS. Nærværende notat er udarbejdet af WSP og NIRAS.

1.1 Baggrund og formål

Der findes flere tusind forskellige PFAS, og det er velkendt, at de efterhånden kan findes overalt i miljøet, da mange af dem er persistente, og derved ikke bliver nedbrudt. Forskellige kilder til PFAS samt spredningsveje er blevet identificeret (se FIGUR 1). I dette projekt fokuseres udelukkende på, hvad der sker i jord og grundvand fra forskellige typer af forurenede grunde forurenede med PFAS.



FIGUR 1. Simple konceptuel model for spredningsveje for PFAS i miljøet (udarbejdet af NIRAS).

Forurenede grunde er en væsentlig forureningskilde for PFAS. Videnscenter for Miljø og Resourcer (VMR) har opgjort, at mere end 15.000 lokaliteter udgør en potentiel risiko for jord og grundvand og overfladevand (Baun et al., 2023).

Formålet med Videnstaskforce Projekt 9 er udvikle en generel konceptuel model for PFAS' transport og skæbne for forurenede grunde under danske forhold, herunder en fælles forstå-

else for styrende processer for den vertikale transport. Projektet vil også udvikle sted-specifikke konceptuelle modeller for danske geologier¹, som har fokus på vertikal transport og forureningsfluxen mod grundvandet. Herudover vil projektet foreslå et analytisk/numerisk modelkoncept for transport og skæbne af PFAS, som er anvendeligt under danske forhold. Endelig vil projektet identificere de relevante stofkonstanter og parametre for en matematisk stoftransportmodel, samt behovet for specifikke parametre og metoder til konkrete bestemmelser af disse for danske forhold.

Projektet består af 4 faser, hvor NIRAS og WSP er primært ansvarlige for dele af projektets Fase 1 og mere specifikt:

"Et review af nuværende danske og internationale erfaringer med konkrete undersøgelser af PFAS forurenede grunde. Der er særlig fokus på brandøvelsespladser og aktiviteter/brancher med mulige kraftige forureninger og hot spots knyttet til brug af PFAS i forskellige geologier. Reviewet vil identificere relevante langkædede og kortkædede PFAS, som skal indgå i fase 3 og 4".

¹ Der er taget udgangspunkt i fem typiske og overordnede geologiske typologier, der er tænkt som afsæt for konceptuelle modeller i forbindelse med forureningsundersøgelse og afværge i Region Hovedstaden jf. [Bilag B1 Konceptuel forståelse af umættet zone i Region Hovedstaden.pdf](#)

2. Danske undersøgelser af PFAS i jord og grundvand

2.1 Analyse af PFAS

Før juli 2021 var standardanalysen for PFAS 12 forskellige PFAS. Efter de nye kvalitetskriterier for jord og grundvand for sum af 4 PFAS og sum af 22 PFAS kom i juli 2021 blev analysepakken udvidet med yderligere 10 PFAS.

I de efterfølgende afsnit 2.3.1 - 2.3.4 er der foretaget en gennemgang af resultaterne fra de eksisterende PFAS analyser, som er registreret i regionernes GEOGIS database. Resultaterne i afsnit 2.3.1 - 2.3.4 indeholder typisk kun 12 eller 22 forskellige PFAS, hvilket skyldes ændringerne i standardanalysepakkerne.

I december 2023 implementerede Miljøstyrelsen et miljøkvalitetskrav for udledning af PFAS til ferskvand og saltvand, hvor kravet er sat som summen af 24 forskellige PFAS målt som PFOA-ækvivalente. I forhold til analysepakken for "sum af 22 PFAS" er der taget 6 PFAS ud, mens 8 nye PFAS er kommet med. Kravet er i første omgang kun gældende for udledning til ferskvand og saltvand (Miljøstyrelsen, 2024). Der er pt. ikke de store erfaringer med detektionsfrekvensen af de forskellige PFAS, som indgår i PFOA-ækvivalente, og pt. er der ikke lavet en ny standard analysepakke for PFAS.

I nedenstående TABEL 1 er vist en oversigt over, hvilken PFAS der indgår i de forskellige analysepakker hos analysefirmaer, der anvendes af de danske regioner. Tabellen er hovedsageligt sorteret efter, hvilke PFAS der indgår i sum af 22 PFAS.

TABEL 1. PFAS i forskellige analysepakker.

PFAS	Sum af 4 PFAS	Sum af 12 PFAS	Sum af 22 PFAS	PFOA-ækvivalente
PFBA		x	x	x
PFPeA		x	x	x
PFHxA		x	x	x
PFHpA		x	x	x
PFOA	x	x	x	x
PFNA	x	x	x	x
PFDA		x	x	x
PFUnDA			x	x
PFDoDA			x	x
PFTTrDA			x	x
PFBS		x	x	x
PFPeS			x	x
PFHxS	x	x	x	x
PFHpS			x	x
PFOS	x	x	x	x
PFNS			x	
PFDS			x	x

PFAS	Sum af 4 PFAS	Sum af 12 PFAS	Sum af 22 PFAS	PFOA-ækvivalente
PFUnDS			x	
PFDoDS			x	
PFTrDS			x	
6:2 FTS			x	
PFOSA			x	
PFTeDA				x
PFHxDA				x
PFODA				x
GenX				x
ADONA				x
6:2 FTOH				x
8:2 FTOH				x
C604				x

Ud over standardanalysepakkerne tilbyder de danske analyselaboratorier også forskellige andre større PFAS analysepakker samt mere avancerede analysemetoder (såsom Total Oxidable Precursors også benævnt TOP, adsorberbar organisk fluor også benævnt AOF, ultra korte PFAS, ekstraherbare organisk fluorid (EOF), total organisk fluorid (TOF) samt total fluorid). For en nærmere beskrivelse henvises til Miljøprojekt nr. 2266 (Olsen et al., 2024).

2.2 Oversigt over brancher, der anvender PFAS

WSP har i 2023 udarbejdet et notat for Miljøstyrelsen (Tsitonaki et al., 2023), der beskriver PFAS-kilder og spredningsveje til miljøet med henblik på at muliggøre vurdering af, om indhold af PFAS-forbindelser i grundvand i betydende omfang kan forklare forekomst af PFAS-forbindelser i overfladevand (Tsitonaki et al., 2023). Med baggrund i dette arbejde samt tidligere offentliggjorte informationer (Nicolajsen & Tsitonaki, 2016; VMR, 2022) beskrives i det efterfølgende de vigtigste brancher, hvor PFAS kan føre til forurening af jord og grundvand/overfladevand.

Der er identificeret mere end 200 anvendelser af PFAS-forbindelserne i forskellige industrier og produkter, hvilket har medført, at PFAS-forbindelserne har spredt sig i det globale miljø. Et udpluk af de mest almene applikationer kan ses i TABEL 2 **Error! Reference source not found.**, hvor de er sammenkoblet med mulige spredningsveje til miljøet.

Med udgangspunkt i ovenstående, samt konkrete aktiviteter i Danmark, er de nævnte brancher i TABEL 2 identificeret som de mest kritiske kilder for udsivning/spredning til grundvand eller overfladevand (Nicolajsen & Tsitonaki, 2016; VMR, 2022).

TABEL 2. Oversigt over de vigtigste PFAS anvendelser og forventede koncentrationer i produkter. Modificeret fra (Nicolajsen & Tsitsionaki, 2016) med input fra (NIRAS, 2022) og (Jensen et al., 2024). For en forklaring af forkortelser henvises der til Bilag 1-1 i VMRs Håndbog (VMR, 2022).

Branche	Beskrivelse/formål med anvendelsen og mulighed for udslip	PFAS-forbindelser	Indhold i det anvendte produkt
Brandøvelsespladser for træning i slukning af oliebrande eller lignende	Som komponent i brandslukningsskum for at sikre effektivitet mod oliebrande. Udslip sker ved anvendelse af skummet eller forkert opbevaring.	4:2 FTS, 6:2 FTS, 8:2 FTS, ADONA, GenX, PFBA, PFPeA, PFHxA, PFHpA, PFOA, PFNA, PFDA, PFUnDA, PFDoDA, PFPeS, PFHxS, PFOS, PFNS, PFDS, PFEtS, PFPrS,	Skumvæske indeholder op til 6% PFAS og blandes i forholdet 0,5-6% med vand. Der kan være op til 5.000 liter skumvæske i en bil, som blandes til slukningsvandet. Derudover kan der være brugt op til 1.000 l skumvæske årligt på brandøvelsespladser.
Forkromningsindustri	Befugtningsmiddel, dughindrende middel og overfladeaktive stoffer (kan inkludere kalium, lithium, diethanolamin og ammonium PFOS-salte eller 6:2 FTS). Udslip kan ske ved forkert/spild ved opbevaring eller igennem kloak (utætheder og udledning).	PFOS, 6:2 FTS	I enkeltprodukter har indholdet været 2-9%, og det årlige forbrug af produktet i Danmark har været 10-50 kg (NIRAS, 2021).
Tæppeindustri	Produkter til imprægnering af tæppers luvside. Udslip kan ske ved forkert/spild ved opbevaring eller igennem kloak (utætheder og udledning).	PFBA, PFOS	Indhold af PFOS på 5% og årligt forbrug på ca. 5 tons. Andre produkter kunne indeholde op til 8,5% C6-PFAS med et årligt forbrug af ca. 2-4 tons. Produkterne blandes i imprægneringsvæske til ca. 6-8,5%. I Danmark er der ca. 4-5 virksomheder, som har foretaget imprægnering. I affald fra tæpper er der konstateret gennemsnitlige indhold af FTOH, FTS, PFCA'er og PFSA'er på hhv. 284, 44, 21 og 3 ng/g. jf. (Coffin et al., 2023)

Branche	Beskrivelse/formål med anvendelsen og mulighed for udslip	PFAS-forbindelser	Indhold i det anvendte produkt
Tekstil- og læderindustri	Bekæmpelsesmidler, imprægneringsmidler og anden overfladebehandling. Kendte PFAS-forbindelser er kun anvendt i små mængder. Udslip kan ske ved forkert/spild ved opbevaring eller igennem kloak (utætheder og udledning).	EtFOSE, PFOS, PFOA, PFDS, PFBA, PFPeA, PFHxA, PFHpA, PFOA, PFNA, PFUnDA, PFTrDA, PFBS, PFHxS, PFHpS, PFOS	0,8-1,4 tons PFAS pr. år i Danmark. Indholdet i imprægneringsvæske var på 2-3%. I tekstilaffald er der fundet gennemsnitlige indhold af FTOH på 257 ng/g, PFCA'er på 33ng/g og PFSA på 0,3 ng/g jf. (Coffin et al., 2023)
Renserier	Imprægnering af tekstiler. Vask af imprægnerede tekstiler. Udslip kan ske ved forkert/spild ved opbevaring eller igennem kloak (utætheder og udledning).	6:2 FTS, PFBS, PFDA, PFHpA, PFHxS, PFNA, PFOSA, PFOS, PFPeA, PFBA, 6:2 FTOH, 8:2 FTOH, 10:2 FTOH, 8:2 FTCA, 8:2 FTS, N-MeFOSA, N-EtFOSA, N-Me FOSE, N-EtFOSE	Se tekstiler, formentlig i mindre mængder end ved selve fabrikationen.
Malings-, lak- og limindustri	Overfladeaktive stoffer, rengøringsmidler, maling, lak, imprægneringsmidler m.m. En stor andel af de anvendte PFAS-forbindelser er kendte precursorer eller blandt PFAS22. Udslip kan ske ved forkert/spild ved opbevaring eller igennem kloak (utætheder og udledning).	PFOS, N-MeFOSE, 6:2 FTS, N-MeFOSE, PFBA, PFPeA, PFHxA, PFOA, PFHxS, PFDS, PFHpS	Maling kan indeholde på til 1% PFAS. I Danmark er der oplyst indhold på 0,01-0,3%. Maksimale forbrug i malingsindustrier er på ca. 3,5 tons. Hos en enkelt producent vurderede man, at der blev anvendt 2,7 kg PFAS om året (NIRAS, 2022).
Fyldpladser for byggeaffald og ældre lossepladser for dagrenovation	Deponering af PFAS-holdigt affald. Særlig kan maling i byggeindustrien før 2002 have indeholdt PFAS-forbindelser. Udslip kan ske ved forkert ved opbevaring eller igennem kloak (utætheder og udledning).		På fyldpladser med byggeaffald kan der teoretisk være deponeret 0,6 kg PFAS på en fyldplads med en affaldsvolumen på 50.000 m ³ .

Branche	Beskrivelse/formål med anvendelsen og mulighed for udslip	PFAS-forbindelser	Indhold i det anvendte produkt
Træindustri og møbelindustri	Maling og lak, trykfarver, bindemidler, farvestoffer, rengøringsmidler, rustbeskyttelsesmidler. En stor andel af de anvendte PFAS-forbindelser er kendte precursors eller blandt PFAS22. Op til 56% af den indberettede mængde er kendte PFAS-forbindelser. De kendte stoffer er indberettet af op til 7 brancher per år. Risikoen for forurening fra denne branche er primært forbundet med håndtering, påsmøring og afskaffelse.	N-MeFOSE, PFOA, PFOS, Fluoracrylat (27905-45-9)	Op til 4 tons PFAS om året i alt fordelt over ca. 14 virksomheder. Indhold er lignende indhold i maling og lak.
Kemisk industri	Diverse applikationer, til overfladebehandling mm, se også maling. Udslip kan ske ved forkert opbevaring eller igennem kloak (utætheder og udledning), samt afskaffelse af produkterne.	MeFOSE, 6:2 FTS, PFOS	Op til 5 tons om året og primært til fremstilling af lak, maling og trykfarver
Pap og papir	Produkter til overfladebehandling af pap, papiremballage og fødevarekontaktpapir. Udslip kan ske ved forkert opbevaring eller igennem kloak (utætheder og udledning), samt afskaffelse af produkterne.	N-EtFOSA, N-MeFOSE, DiPAP, PFOA	Næsten ingen information om mængder/indhold i produkter. (VMR Faktaark 2022). I papiraffald er der fundet diPAP, FTOH, PFCAer og PFSAer i gennemsnitlige koncentrationer ad hhv. 629, 2572, 28 og 0,2 ng/g jf. (Coffin et al., 2023)

Branche	Beskrivelse/formål med anvendelsen og mulighed for udslip	PFAS-forbindelser	Indhold i det anvendte produkt
Bilindustri, herunder autoværksteder og vaskehaller	Produkter til bilpleje (bilvoks, poleringsmidler). Primært gennem kloaksystemet.	PFHxA, PFOA	I bilvoksmidler og polermidler er der fundet indhold af PFAS på 0,5-3,8 µg/l i 2016.
Elektronikindustri	Overtræk til kabler og ledninger. Loddemidler. Overfladebehandling. Kendte PFAS-forbindelser kun anvendt i små mængder. Udslip kan ske ved forkert opbevaring eller igennem kloak (utætheder og udledning), samt afskaffelse af produkterne.	PFOA, (APFO) PFOS, PFBS, 6:2 FTS, PFOSA, EtFOSA, MeFOSE	Maks samlede mængde i 2003 var 19 tons. Der kendes ikke til indhold af anvendte produkter. Elektronikaffald indeholder 0,0-0,43 µg/kg PFOS (NIRAS, 2022)
Jern- og metalindustri	Maling, lak og anden overfladebehandling. Relativt store mængder af både kendte og ukendte stoffer er anvendt i denne branche. Udslip kan ske ved forkert/spild ved opbevaring eller igennem kloak (utætheder og udledning), samt afskaffelse af produkterne.	N-MeFOSE, PFOS 6:2 FTS, PFHxS, PFOA, 14:2 FTOH, 8:2 FTOH	I alt ca. 20 tons i perioden 1983-2016, primært til polering/ lak/ farve mm

Branche	Beskrivelse/formål med anvendelsen og mulighed for udslip	PFAS-forbindelser	Indhold i det anvendte produkt
Gummi- og plastindustri	Overtræk til kabler og ledninger, bindemidler, maling og farvestoffer. Fremstilling af gummiprodukter er den branche, der har indberettet størst mængder af PFAS-forbindelser under denne branche. Udslip kan ske ved forkert/spild ved opbevaring eller igennem kloak (utætheder og udledning), samt afskaffelse af produkterne.	PFOA, PFOS, PFBS, 6:2 FTS, PFHpA	Samlet set op til 2,4 tons i perioden 1983-2016. Der er ikke oplysninger om indhold i produkter.
Grafisk industri/trykkerier	PFAS har i trykkeribranchen haft en række forskellige anvendelser, såsom i printerblæk, i printerhoveder til ink-jet printere, til trykpapiret og til litografiske printplader. Da PFAS også kan findes i lim, kan det også være blevet benyttet f.eks. i forbindelse med trykning af bøger. Udslip kan ske ved forkert/spild ved opbevaring eller igennem kloak (utætheder og udledning), samt afskaffelse af produkterne.	PFOS, N-MeFOSA, N-EtFOSA, PFOSA, N-MeFOSE, DiPAP	I alt 11,5 tons PFAS indberettet i 1993-2016. Omkring 15 kg årligt anvendes i printerblæk.
Lokaliteter, hvor en større kemikalie/oliebrande er slukket	Som komponent i brandslukningsskum for at sikre effektivitet mod oliebrande. Udslip sker ved anvendelse af skummet eller forkert opbevaring.	Samme som brandøvelsespladser	Se brandøvelsespladser.

Branche	Beskrivelse/formål med anvendelsen og mulighed for udslip	PFAS-forbindelser	Indhold i det anvendte produkt
Pesticider/Insekticider.	PFAS kan være en del af bl.a. insekticider. Der er fundet op til 3-20 mg/kg PFOS i amerikanske produkter indeholdende malathion, imidacloprid abamectin og novaluron (Lasee et al., 2022). Imidacloprid, abamectin, er forsat godkendt i Danmark, og malathion har været godkendt og produceret i Danmark (Miljøstyrelsen, 2023). Udslip kan ske ved forkert/spild ved opbevaring eller igennem anvendelse af stoffer til landbruget eller ved produktion af stofferne, samt ved pesticidpunktkilder (vask af sprøjtemaskiner) eller afskaffelse af produkter/beholdere.	På dyrkede arealer	PFOS på 3,9-19,2 mg/kg i 6 insekticider.

I 2024 har Miljøministeriet udført en analyse af PFAS anvendelse og massestrøm i Danmark, dvs. både forbrug af PFAS og de mulige udslip til miljøet knyttet til produktion og brug af PFAS holdige produkter (Lassen et al., 2024). Den samlede mængde af PFAS input i DK er estimeret til 370 tons pr. år. Analysen pegede ikke på nogle brancher, som man ikke i forvejen var opmærksom på i forbindelse med de tidligere kortlægninger af PFAS forbrug. Næsten 2/3 del af det nuværende PFAS forbrug i Danmark er knyttet til tekstiler og tøj.

2.3 Erfaringer fra Regionernes undersøgelser på forurenede lokaliteter frem til 2023

De 5 danske regioner har undersøgt for PFAS i forbindelse med regionernes forureningsundersøgelser siden 2014/2015 dog med en væsentlig øget fokus i de sidste år. For de fleste undersøgelser har lokalisering af PFAS-forurening ikke været det primære formål med undersøgelsen, men der er undersøgt for PFAS-forbindelser, hvis der har været en branche, som kan have anvendt PFAS på den konkrete lokalitet.

Alle regionernes data bliver indrapporteret i GeoGIS. Disse data samt datasættet, der tidligere er anvendt ifm. udarbejdelsen af Region Hovedstadens retningslinjer for risikovurdering af PFAS-fund i videregående grundvandsundersøgelser (Jensen et al., 2024), er anvendt i dette

projekt. Datasættet indeholder data, der stammer fra GeoGIS-udtræk, leveret af alle fem regioner frem til januar 2023. Det skal bemærkes at databasen ikke indeholder data fra undersøgelser foretaget af andre aktører, såsom andre offentlige og private aktører.

Ved indlæsning af data til Power BI er brancherne som tommelfingerregel grupperet efter branchehovedgruppen med udgangspunkt i DB03 Branchekoder, som anvendes i Regionernes JAR (Jordforureningslovens Areal Register) database. Det har dog været ønsket at have en indsigt i nogle undergrupper, og de er derfor indlæst separat og indgår således ikke i hovedgruppen. Det kunne fx være "28.51 Overfladebehandling af metal" og "17.51 Tæppefabrikker". Der henvises til (Jensen et al., 2024) samt Appendix 1 for yderligere information om datahåndteringen.

Datasættet indeholder data fra ca. 1.500 undersøgte lokaliteter. Antallet af undersøgte lokaliteter fordelt på branchegrupper samt regioner fremgår af TABEL 3 for grundvandsprøver. Det fremgår, at der er stor forskel på antallet af prøver for de enkelte branchegrupper og for de enkelte regioner, eksempelvis har Region Hovedstaden mere end dobbelt så mange lokaliteter, hvor der er udtaget vandprøver til PFAS-analyse end den næste region på listen (Region Syddanmark). Branchemæssigt er det især "90.0X Losseplads", "29 Maskinindustri" og "93.01.30 Renserier", hvor der er flest lokaliteter med vandprøver med PFAS.

TABEL 3. Antal lokaliteter med grundvandsprøver for de branchegrupper, hvor der er analyse-resultater for PFAS. Tallene er opgjort for de enkelte regioner. *: Bemærk at hver lokalitet kun er talt med én gang i totalen for hver region, uanset om der har været flere brancher tilknyttet lokaliteten, og at lokaliteten derfor kan fremgå under flere branchegrupper. RH: region Hovedstaden, RM: Region Midtjylland, RN: Region Nordjylland, RSJ: Region Sjælland og RSYD: Region Syddanmark.

Branchegrupper	RH	RM	RN	RSJ	RSYD	I alt (branche)
17 Tekstilindustri	13	14	6	2	5	40
17.51 Tæppefabrikker	2	6				8
18 Beklædningsindustri		2				2
19 Læder- og skoindustri	8	1		3	3	15
20 Træindustri	13	9	5	6	11	44
21 Papir- og papindustri	4	1			1	6
22 Trykkerier	43	20	9	3	3	78
24 Kemisk industri	42	5		2	4	53
24.3 Fremstilling af maling, lak mv.	18	2		1		21
25 Gummi- og plastindustri	34	13	7	7	1	62
26 Cement og beton	7	3	5	1	1	17
27 Metalfremstilling	20	3	3	2	3	31
28 Jern- og metalvareindustri	113	12	11	4	4	144
28.51 Overfladebehandling af metal	59	37	9	9	11	125
29 Maskinindustri	123	67	21	7	36	254
31 Elektronik, fremstilling	31	4	8	1	4	48
35 Fremstilling af fly, skibe og både	10	1	2	5	2	20
36 Møbelindustri	26	40	19	3	14	102
40 El-, gas- og varmemforsyning	5	3	2		4	14
45 Elinstallation	1	2				3
50 Autolakering og undervognsbehandling	47	17	17	7	18	106
62 Lufttransport	1			1		2
63.22.10 Erhvervshavne	1		1			2

Branchegrupper	RH	RM	RN	RSJ	RSYD	I alt (branche)
63.23 Lufthavne ² mv.	3			1	1	5
74.81.20 Fotolaboratorier	1					1
75.22 Forsvar	16	2	1	5	1	25
75.25 Brandvæsen og redningskorps	12	12	8	8	5	45
90.01 Spildevand				1	1	2
90.0X Losseplads	102	71	60	43	109	385
92.62.20 Lystbådehavne	1		2			3
93.01 Vaskerier og renserier	11	2	3	1	6	23
93.01.30 Renserier	55	9	8	7	74	153
Total (region)*	608	278	174	103	288	1.451
% af samlet antal	41,9	19,2	12,0	7,1	19,8	

Det fremgår, at der er stor forskel på antallet af prøver for de enkelte branchegrupper og for de enkelte regioner. Branchemæssigt er det især "90.0X Losseplads", "29 Maskinindustri" og "93.01.30 Renserier", hvor der er flest lokaliteter med grundvandsprøver med PFAS.

TABEL 4. Antal lokaliteter med jordprøver for de branchegrupper, hvor der er analyseresultater for PFAS. Tallene er opgjort for de enkelte regioner. *: Bemærk at hver lokalitet kun er talt med én gang i totalen for hver region, uanset om der har været flere brancher tilknyttet lokaliteten, og at lokaliteten derfor kan fremgå under flere branchegrupper. RH: region Hovedstaden, RM: Region Midtjylland, RN: Region Nordjylland, RSJ: Region Sjælland og RSYD: Region Syddanmark.

Branchegrupper	RH	RM	RN	RSJ	RSYD	Total (branche)
17 Tekstilindustri	1	2		1		4
17.51 Tæppefabrikker		1				1
18 Beklædningsindustri						
19 Læder- og skoindustri						
20 Træindustri						
21 Papir- og papindustri					1	1
22 Trykkerier	1	1		1	1	4
24 Kemisk industri						
24.3 Fremstilling af maling, lak mv.	1					1
25 Gummi- og plastindustri		4				4
26 Cement og beton				1		1
27 Metalfremstilling						
28 Jern- og metalvareindustri	4	4				8
28.51 Overfladebehandling af metal	1	7	1		1	10
29 Maskinindustri	3	10			1	14
31 Elektronik, fremstilling		1	1		1	3
35 Fremstilling af fly, skibe og både	1					1
36 Møbelindustri	1	6	1			8
40 El-, gas- og varmforsyning	1				1	2

² PFAS forurening fra Lufthavne vil i de fleste tilfælde stamme fra brandøvelsespladser men der kan være andre kilder såsom hydraulikolie til fly mm.

Branchegrupper	RH	RM	RN	RSJ	RSYD	Total (branche)
45 Elinstallation						
50 Autolakering og undervognsbehandling	3	5				8
62 Lufttransport	1					1
63.22.10 Erhvervshavne						
63.23 Lufthavne mv.	1				1	2
74.81.20 Fotolaboratorier						
75.22 Forsvar	5	1		3	1	10
75.25 Brandvæsen og redningskorps	12	9	3	6	3	33
90.01 Spildevand				1	1	2
90.0X Losseplads	5	5	4	3	7	24
92.62.20 Lystbådehavne						
93.01 Vaskerier og renserier	1	1		1		3
93.01.30 Renserier	5					5
Total* (region)	39	43	8	13	16	119
% af samlet antal	32,8%	36,1	6,7	10,9	13,5	

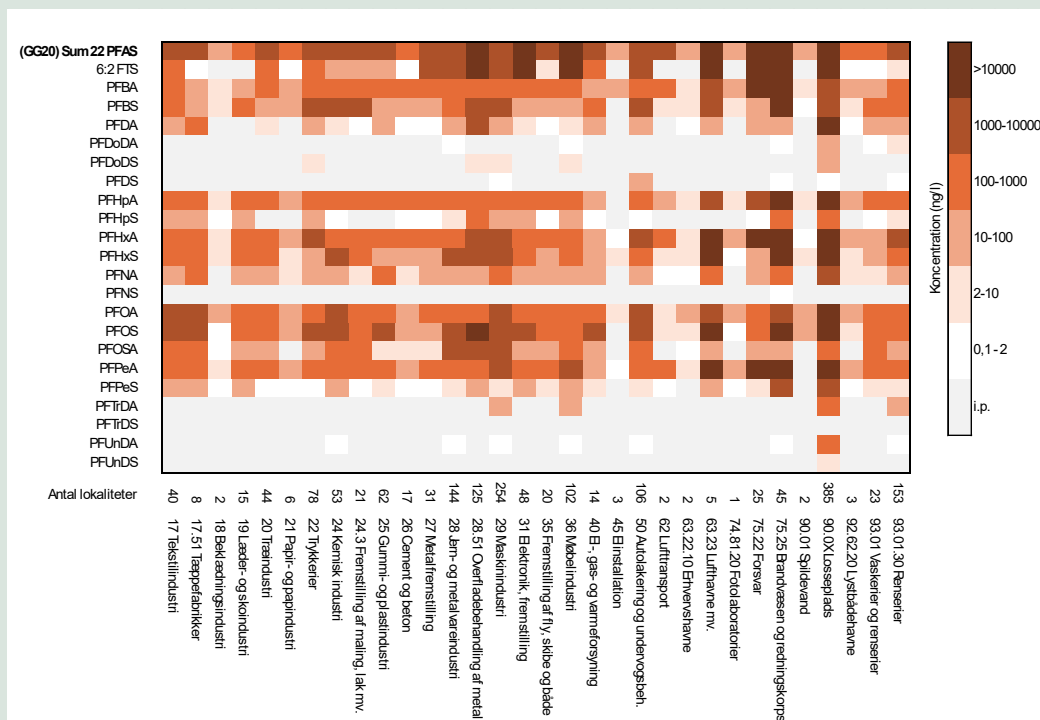
For jordprøver med PFAS-resultater er antallet af lokaliteter væsentligt mindre (TABEL 4). Det fremgår, at Region Hovedstaden og Region Midtjylland har stort set det samme antal lokaliteter. Her er det i brancherne "75.25 Brandvæsen og redningskorps" og "90.0X Losseplads", hvor der er flest lokaliteter.

Datasættet danner vidensgrundlaget for det videre arbejde med at udvælge lokaliteter til en nærmere gennemgang af datagrundlaget.

2.3.1 Koncentrationer og detektionsfrekvens af PFAS i grundvand på forurenede lokaliteter

2.3.1.1 Maksimale koncentrationer i grundvandet

De maksimale koncentrationer for enkeltforbindelserne blandt de 22 PFAS er vist i FIGUR 2 som et heatmap, hvor de højeste koncentrationer er angivet med en mørkebrun farve gående til en hvid farve for de laveste koncentrationer. Grå farve angiver, at PFAS'en ikke er påvist ved undersøgelser i den pågældende branche. Antallet af lokaliteter i hver branche kan ses af figuren (nederst). De højeste koncentrationer af sum af 22 PFAS påvises i brancherne Brandvæsen og redningskorps, Lufthavne mv., Lossepladser, Overfladebehandling af metal, Forsvar, Elektronikfremstilling samt Møbelindustri, der alle har fund på over 60.000 ng/l for sum af 22 PFAS.

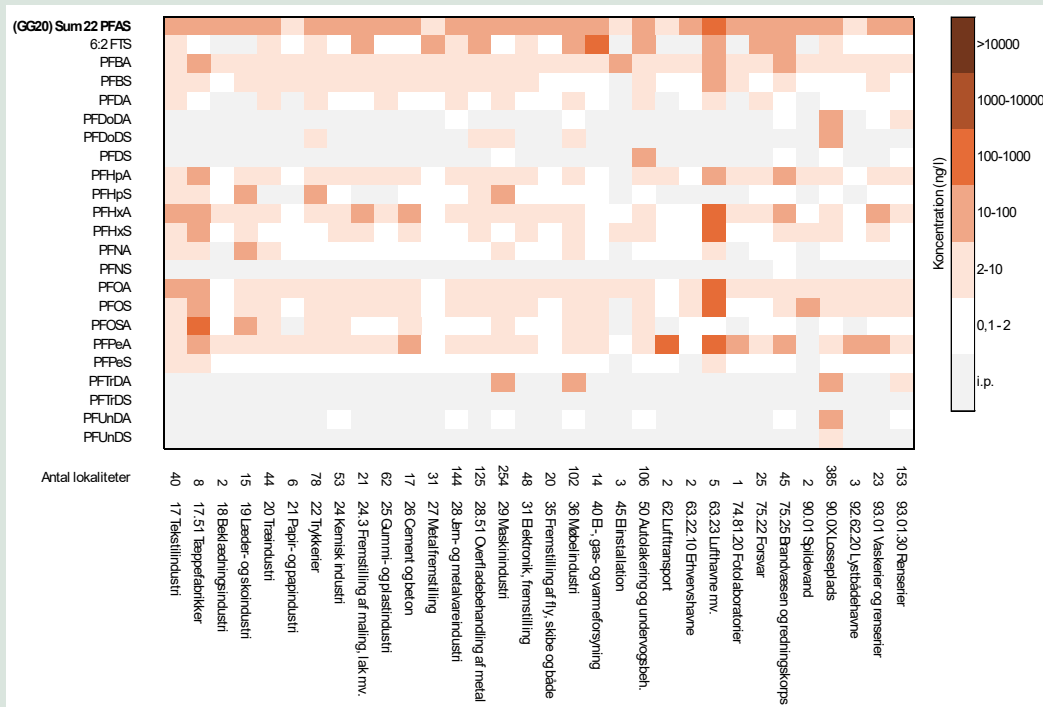


FIGUR 2. Maksimumkoncentrationen (ng/l) i grundvandsprøver for enkeltforbindelser i sum af 22 PFAS per branche. Den maksimale koncentration af sum af 22 PFAS er ligeledes vist for hver branche. Grå felter indikerer stoffet er analyseret for, men ikke påvist over detektionsgrænsen. Grundvandsprøver fra alle dybder er medtaget.

For de enkelte PFAS ses de højeste maksimumkoncentrationer generelt i de samme brancher. For de brandøvelsesrelaterede brancher ses maksimumkoncentrationer på over 10.000 ng/l for 6:2 FTS, PFHxS, PFOS, PFBS, PFHxA, PFPeA, PFHpA og PFBA. For Lossepladser ses maksimumkoncentrationer på over 10.000 ng/l for 6:2 FTS, PFOA, PFHxA, PFOS, PFPeA, PFHxS, PFHpA samt PFDA. For Overfladebehandling (forkromning) domineres maksimumkoncentrationerne af PFOS og 6:2 FTS, mens der for Elektronikfremstilling kun ses høje koncentrationer på over 10.000 ng/l for 6:2 FTS. Dette gør sig også gældende for Møbelindustri. Det bør dog bemærkes, at maksimumkoncentrationen for 6:2 FTS for Overfladebehandling, Elektronikfremstilling og Møbelindustri stammer fra den samme lokalitet.

2.3.1.2 Mediankoncentration i grundvandsprøver

Der er tilsvarende udarbejdet et heatmap til illustration af mediankoncentrationer i grundvandsprøver for de enkelte PFAS, som indgår i sum af 22 PFAS. Det er vist i FIGUR 3. Antallet af lokaliteter i hver branche kan ses nederst i figuren.



FIGUR 3. Mediankoncentration for grundvandsprøver (ng/l) for sum af 22 PFAS samt enkeltstoffer, der indgår i sum af 22 PFAS. Grundvandsprøver fra alle tilgængelige dybder er medtaget.

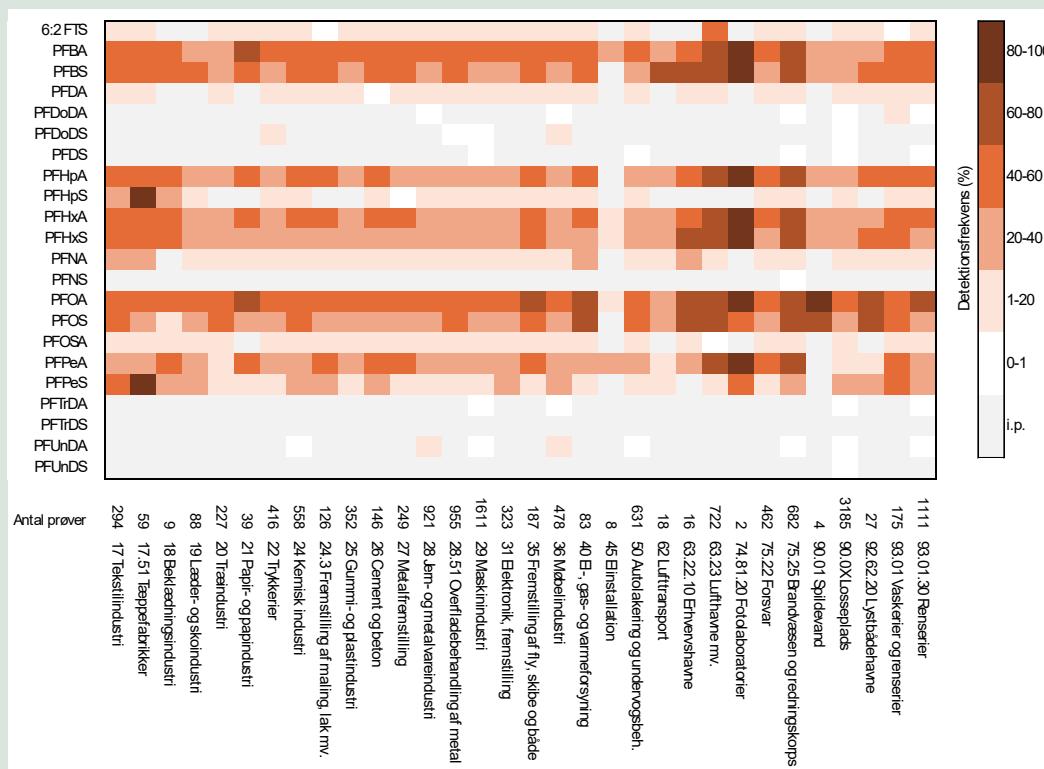
Den højeste mediankoncentration for sum af 22 PFAS ses for branchen 63.23 Lufthavne mv., hvor mediankoncentrationen er 700 ng/l. Dernæst er der mediankoncentrationer på 50 ng/l eller mere for sum af 22 PFAS for brancherne Tæppefabrikker (70 ng/l) og Brandvæsen og redningskorps (83 ng/l).

For de enkelte PFAS ses de højeste mediankoncentrationer også for lufthavne, hvor der er mediankoncentrationer på over 100 ng/l for PFPeA (120 ng/l), PFHxA (220 ng/l), PFOA (100 ng/l), PFHxS (420 ng/l) samt PFOS (280 ng/l). Det bør bemærkes, at der kun er 5 lokaliteter i denne branchegruppe, som til gengæld er velundersøgte, og mediankoncentrationerne er udregnet på baggrund af flere hundrede påviste prøver. Derudover ses der i brancherne 17.51 Tæppefabrikker og 75.25 Brandvæsen og redningskorps mediankoncentrationer over 10 ng/l for 5 eller flere enkeltstoffer.

Det skal bemærkes, at enkelte høje mediankoncentrationer ikke nødvendigvis repræsenterer et generelt billede for en branche, men skal tilskrives enkelte høje koncentrationer i nogle få prøver. Som eksempel er mediankoncentration for 6:2 FTS i El-, gas- og varmeforsyning (150 ng/l) beregnet på baggrund af kun 3 påviste prøver. Datagrundlaget for beregningen af de enkelte mediankoncentrationer kan ses i Appendix 1.

2.3.1.3 Detektionsfrekvensen i grundvandsprøver

Detektionsfrekvensen i grundvandsprøver for enkeltstoffer i sum af 22 PFAS fremgår af FIGUR 4. Datagrundlaget kan ses i Appendix 1. Det skal bemærkes, at nogle resultater kan være lettere misvisende pga. et lille antal prøver, fx er der kun analyseret to grundvandsprøver i branchen 74.81.20 Fotolaboratorier, hvilket resulterer i de meget høje detektionsfrekvenser.



FIGUR 4. Detektionsfrekvens i vandprøver for enkeltstoffer for sum af 22 PFAS, beregnet som antal påviste prøver ud af antal prøver, per branche. Antallet af analyserede prøver per branche ses nederst. Grå felter indikerer analyseret, men ikke påvist.

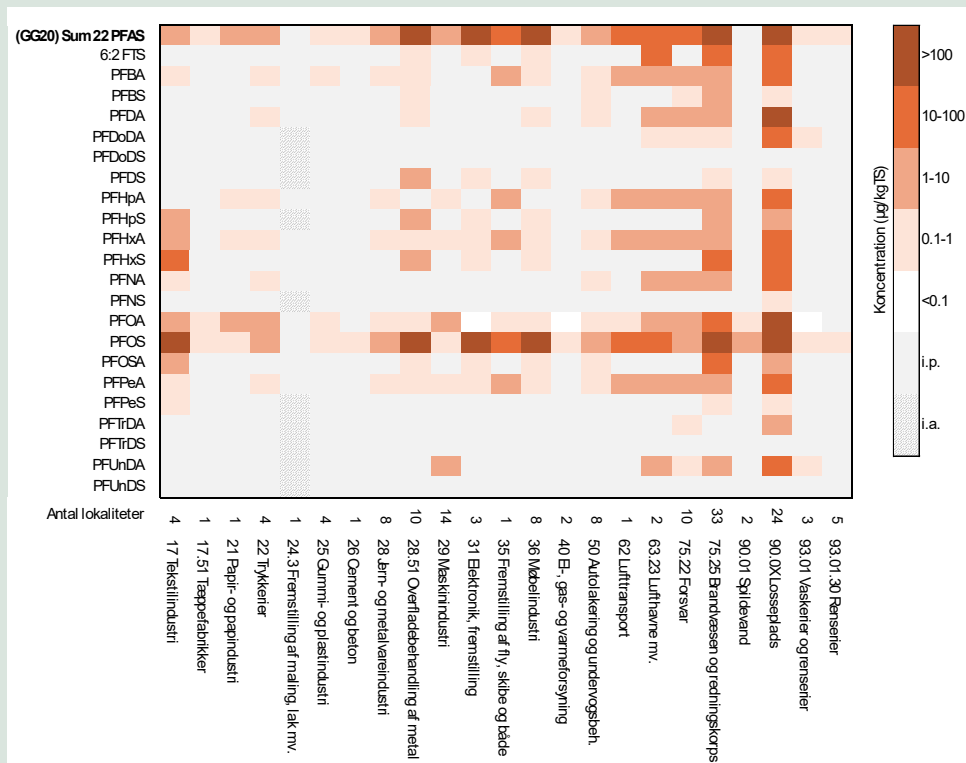
Det fremgår af FIGUR 4, at PFBA påvises i min. 20% af alle grundvandsprøver uanset branche og i min. 40% i 26 af de 32 branchegrupper. PFOA påvises i min. 40% af alle prøver i 30 af de 32 brancher og i 74% af prøverne for Brandvæsen og redningskorps.

2.3.2 Koncentrationer og detektionsfrekvens af PFAS i jord på forurenede lokaliteter

2.3.2.1 Maksimale koncentrationer i Jord

De maksimale koncentrationer for de enkelte PFAS i sum af 22 PFAS i jordprøver er vist i FIGUR 5. Antallet af lokaliteter i hver branche kan ses nederst i figuren.

De højeste koncentrationer af sum af 22 PFAS påvises i brancherne "Overfladebehandling af metal" og "Brandvæsen og redningskorps", der begge har maksimumkoncentrationer på over 1.000 µg/kg TS samt for "Lossepladser", "Elektronikfremstilling" og "Møbelindustri", hvor der er påvist koncentrationer på over 100 µg/kg TS for sum af 22 PFAS.

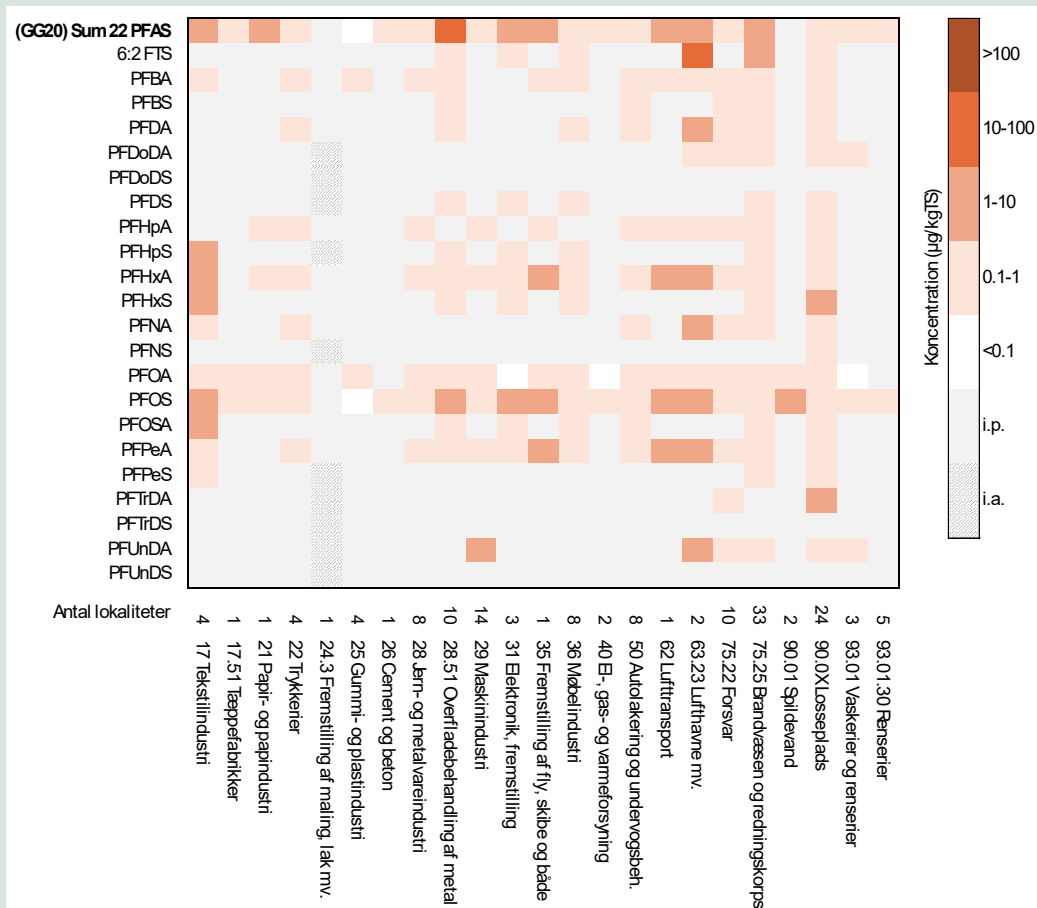


FIGUR 5. Maksimumkoncentrationen ($\mu\text{g/kg TS}$) i jordprøver for de enkelte PFAS i sum af 22 PFAS per branche. Den maksimale sum af 22 PFAS er ligeledes vist for hver branche. Grå felter indikerer stoffet er analyseret for, men ikke påvist over detektionsgrænsen (i.p.). Skraverede felter indikerer, at der ikke er analyseret for stoffet (i.a.). Jordprøver fra alle tilgængelige dybder er medtaget.

For enkeltstofferne ses det af FIGUR 5, at de højeste koncentrationer generelt ses for PFOS. Der er påvist PFOS i koncentrationer på over $250 \mu\text{g/kg TS}$ i brancherne med overfladebehandling, brandvæsen, losseplads samt også i branchen Tekstilindustri. Desuden ses der for lossepladserne høje koncentrationer for PFOA (maks. $240 \mu\text{g/kg TS}$) og PFDA (maks. $141 \mu\text{g/kg TS}$).

2.3.2.2 Mediankoncentration i jordprøver

Mediankoncentrationer for de enkelte PFAS i sum af 22 PFAS i jordprøver er vist i FIGUR 6. Antallet af lokaliteter i hver branche kan ses af figuren (nederst), mens datagrundlaget for beregningen af de enkelte mediankoncentrationer kan ses i Appendix 1.



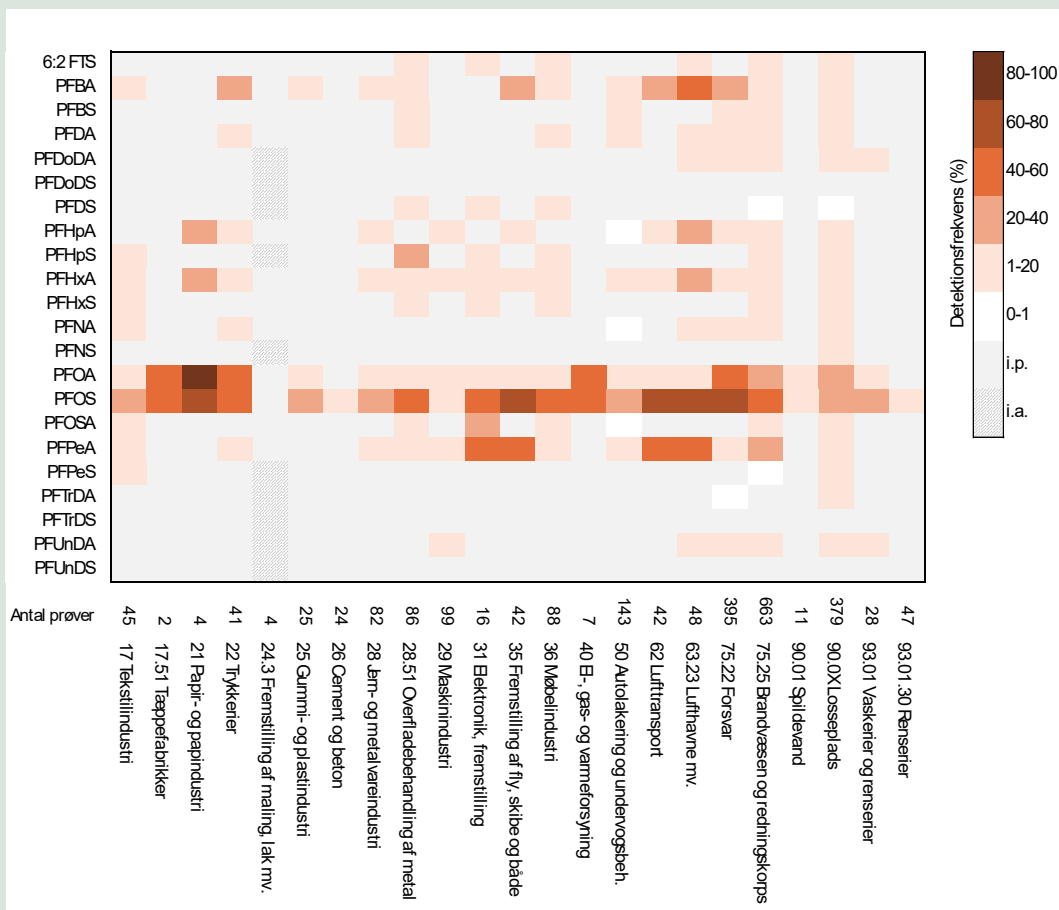
FIGUR 6. Mediankoncentration for jord (µg/kg TS) for sum af 22 PFAS samt enkeltstoffer, der indgår i sum af 22 PFAS. Jordprøver fra alle tilgængelige dybder er medtaget. Grå felter indikerer analyseret men ikke påvist (i.p.), mens skraverede felter indikerer ikke analyseret for (i.a.).

Den højeste mediankoncentration for sum af 22 PFAS ses for branchen 28.51 Overfladebehandling af metal, hvor mediankoncentrationen er 13,5 µg/kg TS. For Lufthavne mv. er mediankoncentrationen 9,1 µg/kg TS, hvorimod mediankoncentration for Brandvæsen og redningskorps er 1,5 µg/kg TS. Det skal bemærkes at flere større lufthavne og større brandøvelsespladser ikke er undersøgt i Regionernes datasæt, idet forureninger ved disse kan være sket i nyere tid (efter 2001) og dermed vil andre aktører (ofte Forsvaret eller Lufthavnens ejer) som vil have ansvar for at undersøge forurening. Derfor kan resultaterne fra disse brancher i Regionernes datasæt være mindre repræsentative.

2.3.2.3 Detektionsfrekvensen i jordprøver

Detektionsfrekvensen for de enkelte PFAS i jordprøver ses i FIGUR 7. Datagrundlaget kan ses i Appendix 1.

Det ses af figuren, at PFOS er det hyppigst påviste PFAS i jordprøver for størstedelen af brancherne. Desuden ses der også høje detektionsfrekvenser for PFOA for fx Forsvar og Trykkerier.



FIGUR 7. Detektionsfrekvens i jordprøver for enkeltstoffer for sum af 22 PFAS, beregnet som antal påviste prøver ud af antal prøver, per branche. Grå felter indikerer analyseret men ikke påvist (i.p.), mens skraverede felter indikerer ikke analyseret for (i.a.).

2.3.3 Fordeling af påviste koncentrationer i jord- og grundvandsprøver over dybden

I Regionernes database er prøvetagningsdybden af jord- og grundvandsprøverne også registreret, og det er derfor muligt at vurdere prøvetagningsdybdens betydning for indholdet af PFAS i grundvandsprøverne henholdsvis i jordprøver.

FIGUR 8 viser indholdet af PFAS i alle grundvandsprøverne i datasættet fordelt over dybden. Der ses et klart billede af, at de højeste koncentrationer for stort set alle PFAS træffes i de øverste 10 meter. Hvis man kigger på udvalgte lang- og kortkædede stoffer, eks. PFOS og PFHxS vs. PFBA, fremgår det, at PFBA træffes i større dybder.

For at se om data indikerer nogen forskel mellem de enkelte regioner pga. fx geologien, så er fordeling af tre udvalgte PFAS (PFOS, PFBA og PFHxA) i grundvandsprøverne vist for Region Hovedstaden henholdsvis Region Nordjylland nederst på FIGUR 8. Geologisk er de øvre jordlag i Region Hovedstaden mere leret end de mere sandede lag i Region Nordjylland. Der ses en større forekomst af PFOS i større dybder i Region Hovedstaden, men det er svært entydigt at konkludere, om det skyldes geologien, eller at der er taget flere prøver i Region Hovedstaden. Der er dog taget mange prøver i dybde større end 25 meter i Region Nordjylland. Der er ikke påvist PFOS over detektionsgrænsen i de fleste af disse prøver.



FIGUR 8. Indhold af forskellige PFAS i forskellige grundvandsprøver over dybde i alle regioner. Nederst er vist PFOS, PFBA og PFHxA i grundvandsprøver udtaget i Region Hovedstaden og Region Nordjylland. De to regioner er valgt for at illustrere evt. regionale forskelle. Alle non-detect prøver kan også ses på figuren.

I FIGUR 9 er vist koncentrationen af PFAS i jorden som funktion af dybden. Af figuren fremgår det, at de højeste koncentrationer generelt er i de øverste 3-4 meter.



FIGUR 9. Indhold af PFAS og udvalgte PFAS (PFDA PFOS, PFBA og PFHxA) i jordprøver over dybde i alle regioner, i Region Hovedstaden og Region Nord. De to Regioner er valgt for at illustrere evt. regionale forskelle. Alle non-detect prøver kan også ses på figuren.

Overordnet set er der ikke truffet indhold af nogle enkelte PFAS over 1 µg/kg i dybder større end 10 meter. Der ses derudover, at kun mobile PFAS som PFBA og PFHxA er påvist i dybder større end 10 meter. Der er kun udtaget jordprøver i de øverste 5 meter i Region Nord, hvorfor man ikke kan konkludere på regionale forskelle.

2.3.4 Erfaringer med udvidede analysepakker (udover PFAS 22)

2.3.4.1 Erfaringer fra Regionernes undersøgelser med udvidet analysepakker

I Regionernes undersøgelser er der overordnet set analyseret for 12 eller 22 PFAS (jævnfør afsnit 2.1).

I nedenstående FIGUR 10 er vist, hvilke andre PFAS der er analyseret for i grundvandet på nogle enkelte lokaliteter. De mest analyserede enkelt PFAS er MeFoSAA, PFTeDA (PFTDA), 8:2 FTS og EtFOSAA (øverst på FIGUR 10). Det er dog ikke alle disse PFAS, der har den højeste detektionsfrekvens (midt på FIGUR 10), da der påvises PFTeDA i 4,27% af prøverne, 4:2 FTS påvises i 3,45 % af prøverne, mens FOSAA påvises i 3,13% af prøverne. EtFOSAA og 8:2 FTS påvises i under 1% af prøverne. Men generelt påvises disse stoffer ikke særlig ofte sammenlignet med de 22 PFAS. De højeste koncentrationer er for 4:2 FTS, hvor der påvises op til 100 ng/l, mens PFTeDA påvises i koncentrationer op til 50 ng/l (FIGUR 10).



FIGUR 10. Antal grundvandsprøver, detektionsfrekvens for fund i prøver og maks. koncentration for enkeltstoffer ikke indeholdt i PFAS 22. For grundvand.

For jordprøver er der kun udført enkelte analyser af enkelt PFAS ud over PFAS 22, og der er ikke fundet nogle udover dem, som er inkluderet i sum af 22 PFAS.

2.3.4.2 Erfaringer fra andre danske projekter med udvidet analysepakker

NIRAS har i enkelte projekter udvidet standard analysepakken (PFAS 22) med en eller flere af de metoder, der er nævnt i afsnit 2.1. Disse projekter er ikke inkluderet i den dataanalyse, som er beskrevet i afsnit 2.3.4.1, og resultaterne er derfor kort beskrevet i det nedenstående.

I to projekter medførte udvidelsen af analysepakken til at indeholde flere PFAS end de 22 PFAS ikke, at der blev påvist nogle nye PFAS.

Nogle få erfaringer med analysen af AOF viser, at det kan give yderligere information om mulig forekomst af andre PFAS end de 22 PFAS, dog vil der ikke kunne opnås nogle konkrete navne på de forskellige PFAS, ligesom at detektionsgrænsen (typisk 3.000 ng/l) kan have væsentlig betydning, når der er tale om lavere koncentrationer af PFAS.

Erfaringerne med TOP analysen er, at den kan give vigtige informationer om mulige precursorer i en prøve, men som for AOF giver den kun indikationer på forekomsten, og ikke nogen direkte bestemmelse af de ukendte PFAS.

Analysen af de ultrakorte PFAS (TFA, PFPrA, TFMS, PFETs og PFPrS) har typisk en lidt højere detektionsgrænse end for standard PFAS, op til en faktor 10. I enkelte projekter, hvor der er analyseret for de ultrakorte PFAS, påvises der typisk TFA og PFPrA i koncentrationer, som ligger i samme niveau, som der påvises af PFAS i PFAS 22 analysepakken.

2.4 Vigtigste erfaringer fra danske undersøgelser

Erfaringerne fra Regionernes data bekræfter, at de mest forurenede brancher er de brancher, der har været udpeget i tidligere projekter. Det skal dog bemærkes, at der ligger et bias i datasættet, idet de brancher, som blev identificeret i 2016, også er nogle af de brancher, som er undersøgt mest. Hvis man ser på hvilke brancher, hvor der er påvist de højeste maksimum og højeste median koncentrationer for flere PFAS, samtidigt med at antal undersøgte lokaliteter er større end 30, så er det bl.a.:

- Tekstil industri og Tæppefabrikker
- Lossepladser
- Overfladebehandling af metal
- Brandvæsen og Redningskorps
- Trykkerier
- Gummi og plast industri
- Kemisk industri

Derudover ses der høje koncentrationer i brancher som Forsvaret, Elektronik, og Fremstilling af både, men disse er ikke repræsenteret solidt i Regionernes datasæt. Antal af analysedata for jordprøver i Regionernes undersøgelser er for lille til, at der kan drages nogle konklusioner om, hvorvidt fund af i PFAS i jord- og grundvandprøver hænger godt sammen.

Overordnet kan der ses en god overensstemmelse ift. hvilke brancher de højeste koncentrationer påvises i jord og grundvandsprøver. En af de vigtigste erfaringer fra de danske undersøgelser (særligt Regionernes datasæt) er, at der generelt ikke er truffet indhold af nogle enkelte PFAS over 1 µg/kg i dybder større end 10 meter.

Enkelte PFAS, som PFDoDS, PFUnDS og PFTrDS træffes næsten aldrig i jordprøver og yderst sjældent i vandprøverne. Til gengæld er der påvist PFTeDA, 4:2 FTS, og FOSAA i ca. 4 % af de få prøver, der har været undersøgt for disse PFAS. Dette indikerer, at standardanalysepakken bør udvides til også at omfatte disse PFAS. Derudover bemærkes det, at 6:2 FTS er dominerende i grundvand ved mange hotspots, hvor der træffes koncentrationer på flere tusinde ng/l. 6:2 FTS kan nedbrydes til PFCA og kan være en langvarig kilde til forurening med flere PFAS forbindelser. Det skal bemærkes, at 6:2 FTS ikke inkluderet i analysepakken for 24 PFAS (afsnit 2.1), som forventes at blive brugt mere ofte i fremtiden i forbindelse med overvågning eller undersøgelser af overfladevand. Ændringen i analyseprogrammet kan derfor følge til oversete forureninger.

3. Gennemgang af udvalgte danske lokaliteter

3.1 Valg af lokaliteter

I dette afsnit gennemgås de vigtigste resultater for 10 udvalgte lokaliteter. De fleste af lokaliteterne er valgt ud fra data beskrevet i afsnit 2.3 og/eller viden, som besiddes af NIRAS og WSP. Lokaliteterne er udvalgt på baggrund af, om der kan findes høje koncentrationer i jord og grundvand (maksimumkoncentrationer og mediankoncentrationer), og at der findes et rimeligt antal data (>10 målinger). Det har derfor været en forudsætning, at der forelå en væsentlig mængde af jord- og vandprøver og dermed karakterisering af kildeområdet for, at sagerne kunne tages i betragtning.

Lokaliteterne er udvalgt ud fra følgende kriterier:

- Antal jordprøver >10
- Maksimumkoncentration (vand) > 1000 ng/l
- Median koncentration (vand) > 50 ng/l

Der var desuden et ønske om, at lokaliteterne var forholdsvis jævnt fordelt over regionerne (med forskellige typer af geologi) henholdsvis de vigtigste (forurenende) brancher.

Der er fokus på de resultater, som vil være vigtige at bringe videre til fremtidige undersøgelser på PFAS forurenende grunde. Hvis der er udarbejdet en konceptuel model for den enkelte lokalitet, er denne kort beskrevet.

For de lokaliteter, der er identificeret via Regionernes database, er der søgt aktindsigt / tilladelse i den pågældende region med henblik på at få fremskaffet rapporter, som kan give informationer om geologi og hydrogeologi herunder angivelse af grundvandsmagasin (terrænnært, sekundært eller primært) og potentialeforskelle samt mere detaljeret viden om forureningsforholdene. For de lokaliteter, som ikke kan henføres til regionernes database, er der opnået tilladelse fra grundejer under forudsætning af, at det er anonymiseret.

Lokaliteterne præsenteres derfor i anonymiseret form, da data for nogle af lokaliteterne heller ikke endnu er offentliggjort og/eller vurderet. Samtidig er kendskabet til den nøjagtige adresse ikke vigtigt i forståelsen af forureningssituationen herunder de erfaringer, der er opnået.

3.2 Oversigt over udvalgte lokaliteter

På baggrund af gennemgangen af databasen samt igangværende sager hos NIRAS og WSP er følgende 10 lokaliteter udvalgte til nærmere gennemgang.

TABEL 5. Oversigt over udvalgte lokaliteter i Danmark. Koncentrationerne stammer fra GEO-GIS udtræk i januar 2023, og kan derfor være lidt forskellige fra koncentrationerne beskrevet i afsnit 3.3-3.12.

In- ternt nr.	Koncentration i vand (ng/l)		Antal vand- prøver	Koncentration i jord (µg/kg TS)		Antal jord- prø- ver	Region	Branche	Bemærknin- ger
	Maks	Median		Maks	Me- dian				
1	4.845	79	170	27	0,6	54	RH	75.25 Brandvæsen og redningskorps	Igangvæ- rende sag
2	256.180	5.906	55	1.449	14	34	RSJ	75.25 Brandvæsen og redningskorps	Igangvæ- rende sag
3	4.377	490	43	7,8	4	6	RM	17 Tekstilindustri	Nabolokalite- ter, sammen- hængende fa- ner, enkelt prøver er regi- streret i begge lokali- tetsnumre
4	200.460	39.180	174	1.971	33	18	RM	28.51 Overfladebe- handling af metal	
5	200.460	39.180	7	441	170	6	RM	28.51 Overfladebe- handling af metal	
6	231740	661,95	36	444,19	1,9	10		90.0X Losseplads	
7	62.703	53	14	110	3	8	RN	28.51 Overflade- behandling af me- tal, 36 Møbelindu- stri, 31 Elektronik, fremstilling	Igangvæ- rende sag
8	Der ligger mange nyere data		9	Der ligger mange nyere data			RSYD	19. Læder og sko industri	Igangvæ- rende sag
9	>10.000		>100			>50	RH	25. Gummi og plastindustri /Tekstilindustri	Igangvæ- rende sag
10	Igangværende sag, hvor der foreligger mange data						RSYD	Oliedepot	Igangvæ- rende sag

3.3 Lokalitet 1

Lokaliteten har gennem en længere årrække været anvendt til udførelse af forskellige former for brandøvelser og andre former for redningsøvelser. I forbindelse hermed er der blandt andet anvendt forskellige former for brandøvelsesskum.

3.3.1 Koncentrationsniveauer

I nedenstående tabel er de højeste koncentrationer, der er påvist i jord og grundvand (opdelt på terrænnært grundvand og primært grundvandsmagasin) opsummeret. Kun koncentrationerne fra de seneste omfattende undersøgelser i 2023 og 2024 er medtaget. Det skal bemærkes, at den maksimale koncentration af en PFAS ikke nødvendigvis er påvist i den samme prøve som den maksimale koncentration af en anden PFAS, da der er tale om flere forskellige kildeområder.

TABEL 6. Maksimale påviste koncentrationer af PFAS i jord og grundvand (terrænnært og primært) på Lokalitet 1.

PFAS	Jord (µg/kg TS)	Grundvand, terrænnært (ng/l)	Grundvand, primært (ng/l)
PFBA (Perfluorbutansyre)	1,2	100	340
PFBS (Perfluorbutansulfonsyre)	1,1	42	37
PFPeA (Perfluorpentansyre)	4,0	340	1.600
PFPeS (Perfluorpentansulfonsyre)	1,4	54	29
PFHxA (Perfluorhexansyre)	4,7	200	770
PFHxS (Perfluorhexansulfonsyre)	31	1.300	73
PFHpA (Perfluorheptansyre)	3,3	190	680
PFHpS (Perfluorheptansulfonsyre)	4,9	61	i.p. (typisk <0,3)
PFOA (Perfluoroktansyre)	11	260	20
PFOS (Perfluoroktansulfonsyre)	300	1.100	8,9
6:2 FTS (Fluortelomeresulfonat)	18	4,4	i.p. (typisk <0,3)
PFOSA (Perfluoroktansulfonamid)	3,9	0,55	i.p. (typisk <0,3)
PFNA (Perfluoronansyre)	1,4	9,8	1,4
PFNS (Perfluoronansulfonsyre)	i.p. (typisk <0,2)	i.p. (typisk <0,3)	i.p. (typisk <0,3)
PFDA (Perfluordekansyre)	1,1	i.p. (typisk <0,3)	i.p. (typisk <0,3)
PFDS (Perfluordekansulfonsyre)	0,2	i.p. (typisk <0,3)	i.p. (typisk <0,3)
PFUnDA (Perfluorundekansyre)	0,9	i.p. (typisk <0,3)	i.p. (typisk <0,3)
PFUnDS (Perfluorundekansulfonsyre)	i.p. (typisk <1,0)	i.p. (typisk <0,3)	i.p. (typisk <0,3)
PFDoDA (Perfluordodekansyre)	1,0	i.p. (typisk <0,3)	i.p. (typisk <0,3)
PFDoDS (Perfluordodekansulfonsyre)	i.p. (typisk <1,0)	i.p. (typisk <1,0)	i.p. (typisk <1,0)
PFTTrDA (Perfluortridekansyre)	0,5	i.p. (typisk <1,0)	i.p. (typisk <1,0)
PFTTrDS (Perfluortridekansulfonsyre)	i.p. (typisk <1,0)	i.p. (typisk <0,3)	i.p. (typisk <0,3)
Sum af 4 PFAS	340	2.700	93
Sum af 22 PFAS	360	3.600	3.500

i.p.: ikke påvist (den typiske detektionsgrænse er angivet i ()).

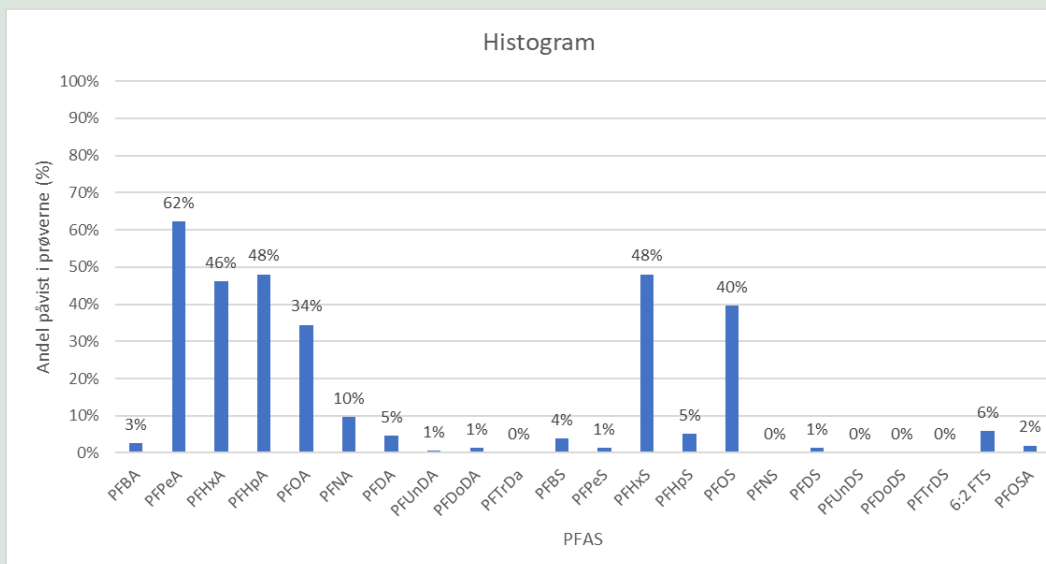
Som det fremgår, er der ikke påvist koncentrationer af PFAS i jorden, som overskrider jordkvalitetskriteriet for sum af 22 PFAS (400 µg/kg TS), mens koncentrationerne for sum af 4 PFAS i visse tilfælde overskrider jordkvalitetskriteriet 10 µg/kg TS. Det drejer sig om to prøver, hvor overskridelsen ses i toppen af jorden (0,5-1,0 m u.t.). Derimod påvises der koncentrationer af PFAS i både sekundært og primært grundvandsmagasiner, som overskrider grundvandskvalitetskriterierne markant.

Det skal bemærkes, at mange af de tungere PFAS ikke påvises i grundvandet.

3.3.2 Vigtigste resultater

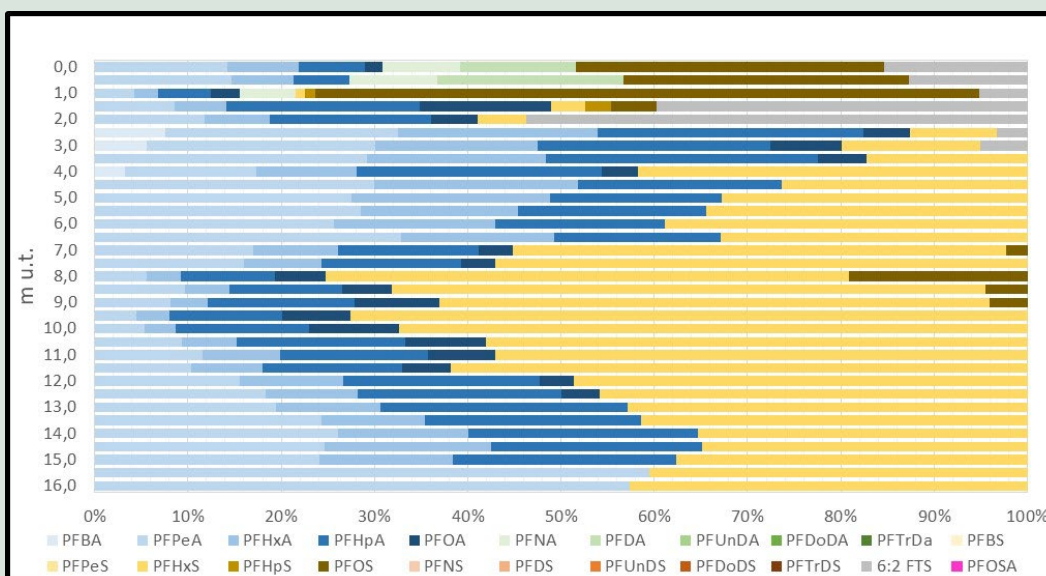
Nogle af de vigtigste resultater er fremhævet nedenfor.

Der er foretaget en analyse af, hvilket PFAS der ofte påvises i jordprøverne på lokaliteten. I nedenstående FIGUR 11 er vist histogrammet for de forskellige PFAS i 154 jordprøver. Som det fremgår, er det især carboxylsyre af PFAS (og især PFPeA, PFHxA, PFHpA og PFOA), som påvises (i ca. 30-60% af jordprøverne). Af PFAS sulfonsyrerne påvises der især PFHxS og PFOS i ca. 40-50% af jordprøverne. De påviste koncentrationsniveauer er dog forholdsvis lave (0,03-1 µg/kg TS, TABEL 6).



FIGUR 11. Detektionsfrekvens af forskellige PFAS i jordprøver udtaget i 2024 (i alt 154 jordprøver) på Lokalitet 1.

Af andre interessante resultater skal nævnes, at der er foretaget en omfattende analyse på jordprøver ned til en dybde af 16 m. I FIGUR 12 er vist fingeraftrykket for jordprøver fra en enkelt boring. Som det fremgår, er der en tydelig chromatografering i den vertikale fordeling, hvor der i de øverste 2 m påvises PFOS, 6:2 FTS, PFNA og PFDA, mens PFHxS er dominerende, når prøverne er udtaget dybere. I en dybde af 7-9 m ses et mindre indhold af PFOS. Forklaringen på dette er ikke fundet.



FIGUR 12. Vertikal fordeling af PFAS i en boring, baseret på jordprøver på Lokalitet 1.

Det skal bemærkes, at koncentrationsniveauerne i jordprøverne illustreret på FIGUR 12 viser et indhold mellem 0,5 og 5,5 µg/kg TS med et faldende indhold over dybden. Det betyder også, at fingeraftrykket vist i FIGUR 12 skal tages med et forbehold, da detektionsgrænsen for den enkelte PFAS typisk ligger på 0,03-1,0 µg/kg TS, og det derfor vil betyde noget for fingeraftrykket, om den enkelte PFAS bliver påvist eller ikke.

Der blev foretaget nogle avancerede analyser på udvalgte grundvandsprøver. Analyse af fluorid gav ikke noget brugbart resultat, da detektionsgrænsen var for høj (2 mg/l). Også AOF blev afprøvet, men kun for de prøver, hvor der var et højt indhold af PFAS, kunne der opnås en værdi for AOF (detektionsgrænse 0,003 mg/l). De to analysemetoder vurderes derfor ikke at kunne anvendes med de nuværende detektionsgrænser, især ikke ved lave koncentrationer.

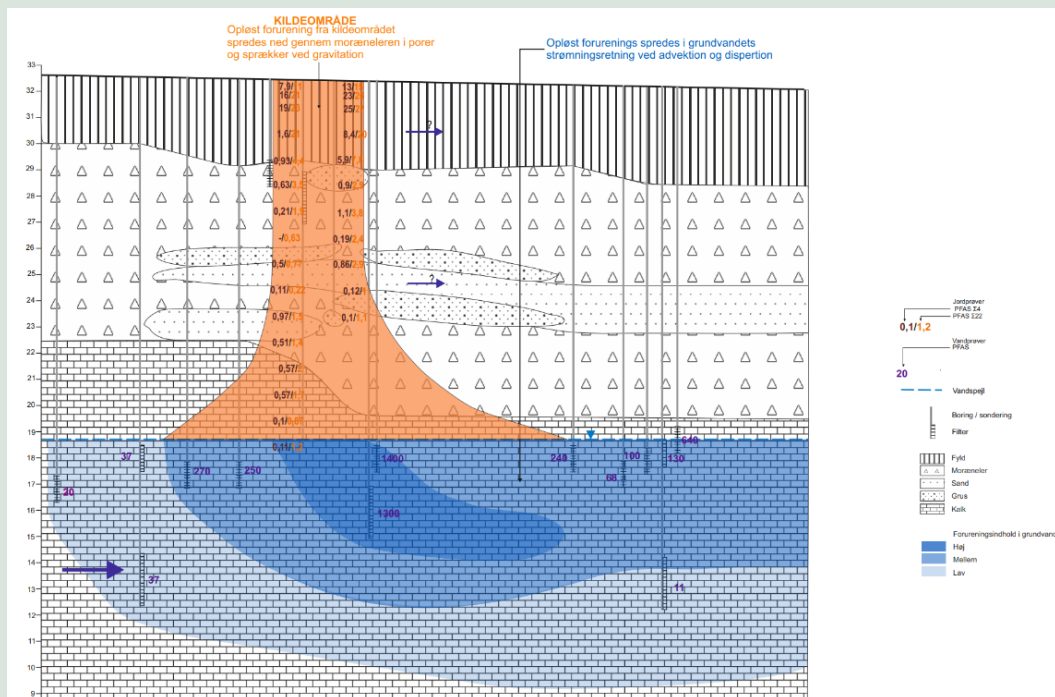
Der blev også foretaget en udvidet analyse for 33 forskellige PFAS. Udover dem, som kunne påvises med 22 PFAS, blev der kun påvist en enkelt anden PFAS (PFHxDA, og det i lave koncentrationer). Analysen gav derfor ikke noget væsentlig ny viden.

Der blev også udført analyse med TOP assay. Resultaterne viste, at der sandsynligvis ikke var noget væsentligt indhold af præcursorer i grundvandsprøverne, da analysen ikke viste et væsentligt forhøjet indhold af de forskellige PFAS (efter TOP).

Der blev også foretaget nogle analyser for ultra korte PFAS. Der blev påvist indhold af TFA, PFPrA samt TFMS i koncentrationer op 8,9-570 ng/l med de højeste koncentrationer af TFA.

3.3.3 Udarbejdet lokal specifik konceptuel model

I nedenstående figur er vist en meget overordnet konceptuel model for lokaliteten. Lokaliteten minder lidt om region Hovedstadens typologi nr. 1B kombineret med 3, da der er tale om en tydelig umættet zone med et grundvandsspejl i kalken. Over kalken findes moræneaflejringer med indslag af sand. I nogle af sandlagene påvises der grundvand, som kan være hængende grundvand.



FIGUR 13. Lokal specifikt konceptuel model for Lokalitet 1.

3.4 Lokalitet 2

Lokaliteten har gennem en længere årrække været anvendt til udførelse af forskellige former for brand- og redningsøvelser. I forbindelse hermed er der blandt andet anvendt forskellige former for brandøvelsesskum.

3.4.1 Koncentrationsniveauer

I nedenstående tabel er de højeste koncentrationer, der er påvist i jord og grundvand (sekundært) opsummeret. Der er ikke vist nogle koncentrationer for det primære grundvandsmagasin, da der ikke er udtaget prøver herfra. Det skal bemærkes, at prøverne er udtaget i perioden 2021-22, hvor der typisk blev analyseret for 12 forskellige PFAS (afsnit 2.1).

Det skal bemærkes, at en maksimale koncentration af en PFAS i et medie ikke nødvendigvis er påvist i den samme prøve som den maksimale koncentration af en anden PFAS i samme medie, da der er tale om flere forskellige kildeområder.

TABEL 7. Maksimale påviste koncentrationer af PFAS i jord og grundvand (sekundært) på Lokaltet 2.

PFAS	Jord (µg/kg TS)	Grundvand, sekundært (ng/l)
PFBA (Perfluorbutansyre)	1,1	12.000
PFBS (Perfluorbutansulfonsyre)	9,4	54.000
PFPeA (Perfluorpentansyre)	1,6	23.000
PFPeS (Perfluorpentansulfonsyre)	-	-
PFHxA (Perfluorhexansyre)	5,1	38.000
PFHxS (Perfluorhexansulfonsyre)	287	100.000
PFHpA (Perfluorheptansyre)	2,3	28.000
PFHpS (Perfluorheptansulfonsyre)	-	-
PFOA (Perfluoroktansyre)	23	4.200
PFOS (Perfluoroktansulfonsyre)	1.440	98.000
6:2 FTS (Fluortelomersulfonat)	14	8.100
PFOSA (Perfluoroktansulfonamid)	15	10
PFNA (Perfluornonansyre)	i.p. (typisk <0,5)	300
PFNS (Perfluornonansulfonsyre)	-	-
PFDA (Perfluordekansyre)	i.p. (typisk <0,5)	4
PFDS (Perfluordekansulfonsyre)	0,8	-
PFUnDA (Perfluorundekansyre)	0,8	-
PFUnDS (Perfluorundekansulfonsyre)	-	-
PFDoDA (Perfluordodekansyre)	i.p. (typisk <0,5)	-
PFDoDS (Perfluordodekansulfonsyre)	-	-
PFTTrDA (Perfluortridekansyre)	-	-
PFTTrDS (Perfluortridekansulfonsyre)	-	-
Sum af 4 PFAS	1.447	122.801
Sum af 12 PFAS	1.450	260.000

-: ikke analyseret. I.p.: ikke påvist (den typiske detektionsgrænse er angivet i ()).

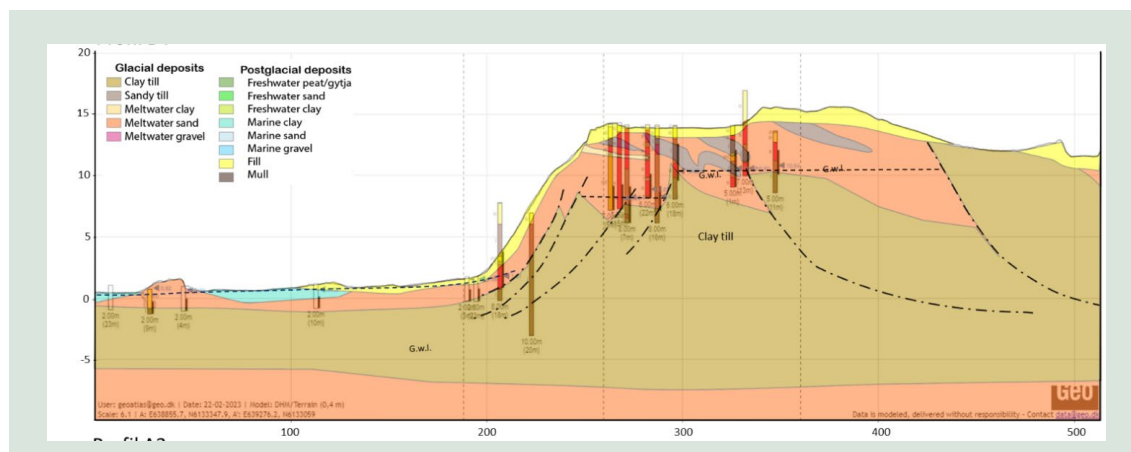
3.4.2 Vigtigste resultater

Nogle af de vigtigste resultater er fremhævet nedenfor.

Som det fremgår af TABEL 7, er der påvist koncentrationer af PFAS i jorden, som overskrider jordkvalitetskriteriet for sum af 4 PFAS (10 µg/kg TS) og sum af 22 PFAS (400 µg/kg TS). PFOS er meget dominerende i indholdet af PFAS i jorden, og udgør størstedelen af PFAS (se også FIGUR 14). Der påvises nogle høje koncentrationer af PFAS i det sekundære grundvand. Selvom der også påvises PFOS i grundvandet (især under kildeområderne, FIGUR 15), så findes der også høje koncentrationer af PFHxS samt carboxylsyrerne.

3.4.3 Udarbejdet lokal specifik konceptuel model

I nedenstående figur er vist en overordnet konceptuel fortolkning af geologien for lokaliteten.



FIGUR 16. Lokal specifik konceptuel model for lokalitet 2, udarbejdet af Geo.

På grund af den komplekse geologi med en kraftig påvirkning af gletsjere og dødislandskab kan det være svært at sætte lokaliteten ind i en af Region Hovedstadens typologier. Der er påvist sekundært grundvand i de terrænnære jord (sandlag), og sammen med forekomsten af moræneleren, som underlejres af smeltevandssand vurderes det, at lokaliteten mest ligner en kombination af typologi nr. 4 og 5.

3.5 Lokalitet 3

Lokaliteten har igennem 30 år fungeret som et tekstiltrykkeri, men bygningerne på lokaliteten anvendes i dag til anden industri. I forbindelse med aktiviteter i bygningerne skete der et spil/udslip ved en tidligere trykkehal. Utætte kloakker, der har ledt spildevand fra trykkeriet, samt områdets drænsystem har skabt en relativ stor forureningsudbredelse.

3.5.1 Koncentrationsniveauer

I nedenstående tabel er de højeste koncentrationer, der er påvist i det sekundære samt primære grundvandsmagasin opsummeret. Der er kun udtaget en enkelt prøve fra det primære grundvandsmagasin i en dyb boring på lokaliteten. Der er ikke udtaget jordprøver til analyse af PFAS. I tabellen er kun koncentrationerne fra de seneste undersøgelser i 2022 og 2023 er medtaget. Det skal bemærkes, at en maksimale koncentration af en PFAS ikke nødvendigvis er påvist i den samme prøve som den maksimale koncentration af en anden PFAS.

TABEL 8. Maksimale påviste koncentrationer af PFAS i grundvand (sekundært og primært) på Lokalitet 3.

PFAS	Grundvand, sekundært (ng/l)	Grundvand, primært (ng/l)
PFBA (Perfluorbutansyre)	120	i.p. (typisk <0,3)
PFBS (Perfluorbutansulfonsyre)	32	i.p. (typisk <0,3)
PFPeA (Perfluorpentansyre)	450	i.p. (typisk <0,3)
PFPoS (Perfluorpentansulfonsyre)	40	i.a.
PFHxA (Perfluorhexansyre)	450	i.p. (typisk <0,3)
PFHxS (Perfluorhexansulfonsyre)	86	i.p. (typisk <0,3)
PFHpA (Perfluorheptansyre)	300	i.p. (typisk <0,3)
PFHpS (Perfluorheptansulfonsyre)	21	i.a.

PFAS	Grundvand, sekundært (ng/l)	Grundvand, primært (ng/l)
PFOA (Perfluoroktansyre)	550	i.p. (typisk <0,3)
PFOS (Perfluoroktansulfonsyre)	970	i.p. (typisk <0,3)
6:2 FTS (Fluortelomersulfonat)	24	i.p. (typisk <0,3)
PFOSA (Perfluoroktansulfonamid)	5,6	i.p. (typisk <0,3)
PFNA (Perfluornonansyre)	77	i.a.
PFNS (Perfluornonansulfonsyre)	i.p. (typisk <0,3)	i.a.
PFDA (Perfluordekansyre)	18	i.p. (typisk <0,3)
PFDS (Perfluordekanesulfonsyre)	i.p. (typisk <0,3)	i.a.
PFUnDA (Perfluorundekansyre)	i.p. (typisk <0,3)	i.a.
PFUnDS (Perfluorundekansulfonsyre)	i.p. (typisk <0,3)	i.a.
PFDoDA (Perfluordodekansyre)	i.p. (typisk <0,3)	i.a.
PFDoDS (Perfluordodekansulfonsyre)	i.p. (typisk <0,3)	i.a.
PFTTrDA (Perfluortridekansyre)	i.p. (typisk <0,3)	i.a.
PFTTrDS (Perfluortridekansulfonsyre)	i.p. (typisk <0,3)	i.a.
Sum af 4 PFAS	1.700	i.p.
Sum af 22 PFAS	3.100	i.p.*
i.p.: ikke påvist (den typiske detektionsgrænse er angivet i ()). i.a.: ikke analyseret. *: Sum af 12 PFAS		

Som det fremgår af tabellen, påvises der ikke PFAS i den grundvandsprøve, som er udtaget i det primære grundvandsmagasin. Der ses dog en overskridelse af grundvandskvalitetskriteriet for både sum af 4 PFAS samt sum af 22 PFAS i det sekundære grundvandsmagasin. Ud af de 32 filtre i det sekundære grundvandsmagasin prøvetaget i 2022 og 2023, overskrider 23 grundvandsprøver kriteriet for sum af 4 PFAS, og 15 grundvandsprøver kriteriet for sum af 22 PFAS.

3.5.2 Vigtigste resultater

Nogle af de vigtigste resultater er fremhævet nedenfor.

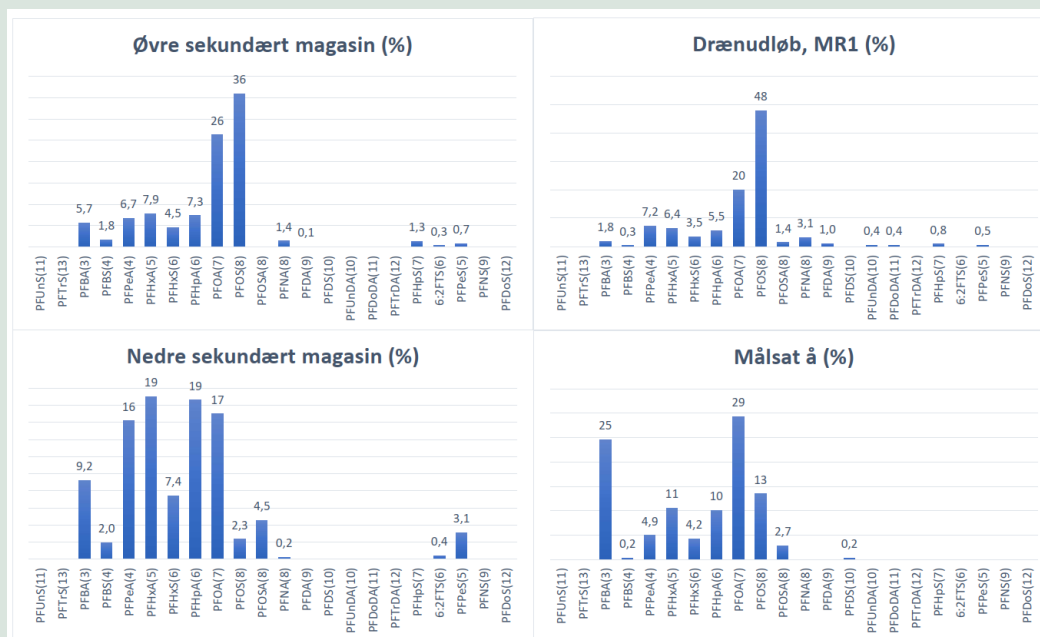
Det sekundære grundvandsmagasin er på lokaliteten opdelt i øvre terrænært grundvand (0,5-1,5 m u.t.) samt et nedre sekundært grundvandsmagasin (7,5-10 m u.t.). Ikke overraskende påvises de højeste koncentrationer i det øvre sekundære grundvandsmagasin.

Der er udført TOP samt AOF-analyse på en enkelt vandprøve i det øvre sekundære grundvandsmagasin. TOP analysen indikerer en pulje af precursorer, der på sigt kan omdannes til PFAS (22 stk.). Forureningen kan derved udgøre en risiko over for det primære grundvandsmagasin i længere tid (i forhold PFAS 22), da nedbrydningen af precursorer kan medføre fortsat spredning med de 22 PFAS.

Ud fra AOF-analysen er en potentiel PFAS-koncentration beregnet til 5.700-6.700 ng/l. I vandprøven fra boringen er sum af 22 PFAS påvist 3.100 ng/l. Analysen af AOF indikerer derfor, at der findes en pulje af PFAS og precursorer, som ikke er en del af analysen for 22 PFAS, og den understøtter derved resultatet af TOP analysen.

Udover undersøgelser på selve lokaliteten, er forureningen undersøgt i drænrør samt i en nærliggende å.

Sammensætningen af PFAS-forureningen på lokaliteten kan ses i FIGUR 17 for det øvre og nedre sekundære grundvandsmagasin, i et drænudløb og i den nærliggende målsat å.



FIGUR 17. Sammensætning af PFAS forurening fra vandprøver udtaget i 2022. Tallet i parentes efter stofnavn angiver kædelængde af PFAS.

Som det fremgår, så er PFOS og PFOA dominerende i det øvre grundvandsmagasin og i drænuvløbet. Grundet det relativt lave indhold af PFAS i den målsatte å er en sammenligning vanskelig, dog ser sammensætningen i åen umiddelbart anderledes ud i forhold til, hvad der findes i grundvandet.

Sammensætningen af PFAS i det nedre sekundære grundvandsmagasin skiller sig ud fra de andre prøver, idet PFOS udgør en meget lille andel, hvilket kan skyldes en tilbageholdelse af PFOS i jordlagene. PFOA udgør en væsentlig del af sammensætningen, hvilket sandsynligvis skyldes, at PFOAs mobilitet i jorden er højere end PFOS. I det nedre sekundære grundvandsmagasin ses herudover flere kortkædede PFAS forbindelser.

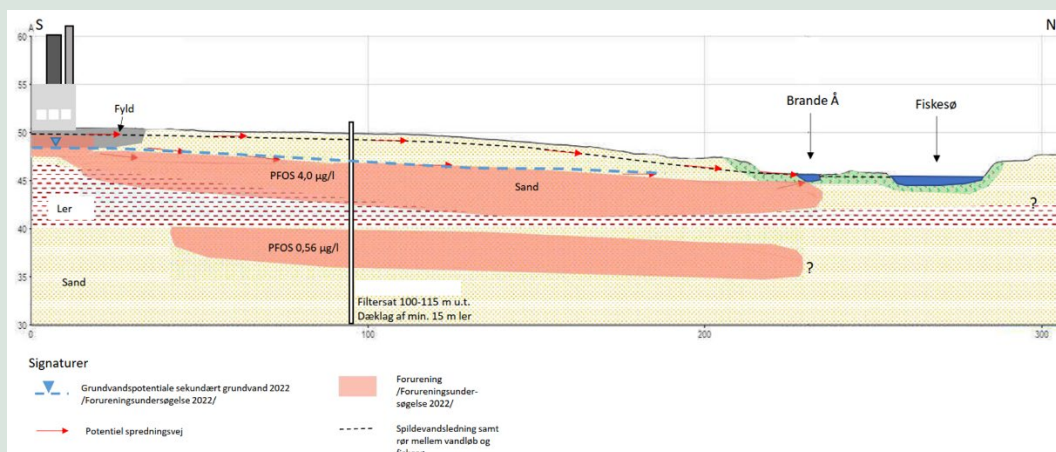
3.5.3 Udarbejdet lokal specifik konceptuel model

FIGUR 18 viser en konceptuel model af lokaliteten samt nærliggende overfladevand. Den estimerede forureningsudbredelse er vist med rødt for både det øvre samt nedre sekundære grundvandsmagasin.

Ud fra potentialeforholdene og det adskillende lerlag mellem de to grundvandsmagasiner blev det vurderet, at der ikke er direkte hydraulisk kontakt mellem det øvre og det nedre sekundære grundvandsmagasin på lokaliteten. Selvom der ikke er direkte hydraulisk kontakt, så påvises der PFAS i det nedre grundvandsmagasin, hvorfor forureningen kan spredes vertikalt gennem lerlaget.

Den målsatte å er i hydraulisk kontakt med det øvre sekundære grundvandsmagasin, mens det er uklart, hvorvidt dette er tilfældet for det nedre sekundære grundvandsmagasin.

Lokaliteten passer ikke umiddelbart til nogle af de definerede typologier, men vi vurderer, at det nærmeste er typologi 4.



FIGUR 18. Lokal specifik konceptuel model af Lokalitet 3 ud til nærliggende målsat overfladevand. Blå stiplede linje viser grundvandspotentialet for det sekundære grundvand i 2022. Den estimerede forureningsudbredelse er vist med rødt. De røde pile viser vurderet spredningsveje for forurening. Den sorte stiplede linje viser spildevandsledning, der leder vand fra drænsystemet fra lokaliteten til overfladevandet.

3.6 Lokalitet 4

På lokaliteten har der i perioden 1959 til 2010 ligget en forkromningsvirksomhed. På lokaliteten var der et vaskekar med chrom samt nogle affedtningskar. Udover PFAS er der konstateret forurening med chrom og chlorerede opløsningsmidler. Virksomheden havde også aktiviteter på nabolokaliteten (lokalitet 5).

Geologien på lokaliteten består af et fyldlag på generelt 0,5–1 m tykkelse. Under fyldet anbores de intakte aflejringer, som udgøres af en sandet leraflejrings på generelt 2–3 m tykkelse, som nogle steder er tolket som smeltevandssler eller moræneler og ellers som sand. Fra ca. 4-5 meter under terræn kommer et gruset sandlag, som udgør det sekundære grundvandsmagasin. Vandspejlet ligger ca. 3-4 meter under terræn. Det er sandsynligt, at lokaliteten ligger over en begravet dal, der gennemskærer området, hvor det prekvartære lag træffes i 15 meters dybde i det omkringliggende område, og i ca. 50 meters dybde under lokaliteten.

3.6.1 Koncentrationsniveauer

I TABEL 9 er vist de højeste koncentrationer af PFAS, som der er påvist i jord og grundvand.

TABEL 9. Maksimale påviste koncentrationer af PFAS i jord og grundvand på Lokalitet 4.

PFAS	jord (µg/kg TS)	Grundvand, sekundært (ng/l)
PFBA (Perfluorbutansyre)	i.p.	48
PFBS (Perfluorbutansulfonsyre)	i.p.	130
PFPeA (Perfluorpentansyre)	i.p.	0
PFPeS (Perfluorpentansulfonsyre)	i.p.	0
PFHxA (Perfluorhexansyre)	i.p.	5,3
PFHxS (Perfluorhexansulfonsyre)	0,08	38
PFHpA (Perfluorheptansyre)	i.p.	8
PFHpS (Perfluorheptansulfonsyre)	0,52	0
PFOA (Perfluoroktansyre)	i.p.	11
PFOS (Perfluoroktansulfonsyre)	340	47.000
6:2 FTS (Fluortelomersulfonat)	i.p.	0
PFOSA (Perfluoroktansulfonamid)	i.p.	0
PFNA (Perfluoronansyre)	i.p.	0
PFNS (Perfluoronansulfonsyre)	i.p.	0

PFAS	jord (µg/kg TS)	Grundvand, sekundært (ng/l)
PFDA (Perfluordekansyre)	i.p.	0
PFDS (Perfluordekansulfonsyre)	i.p.	0
PFUnDA (Perfluorundekansyre)	i.p.	0
PFUnDS (Perfluorundekansulfonsyre)	i.p.	0
PFDoDA (Perfluordodekansyre)	i.p.	0
PFDoDS (Perfluordodekansulfonsyre)	i.p.	0
PFTTrDA (Perfluortridekansyre)	i.p.	0
PFTTrDS (Perfluortridekansulfonsyre)	i.p.	120
Sum af 4 PFAS	340	47.017
Sum af 22 PFAS	340,5	47.044

Det højeste indhold i jord er påvist i dybden 0,5 m u.t., hvor der er påvist kraftig PFOS forurening på 340 µg/kg TS. Der er i 0,1 m u.t. påvist indhold af PFDS på 0,7 µg/kg TS og PFPeS på 0,5 µg/kg TS i 0,5 m u.t. Endvidere er der påvist indhold af PFOS på 1 µg/kg TS i 3 m u.t. Generelt træffes de højeste koncentrationer af PFAS i jord i 0,5-1 m u.t.

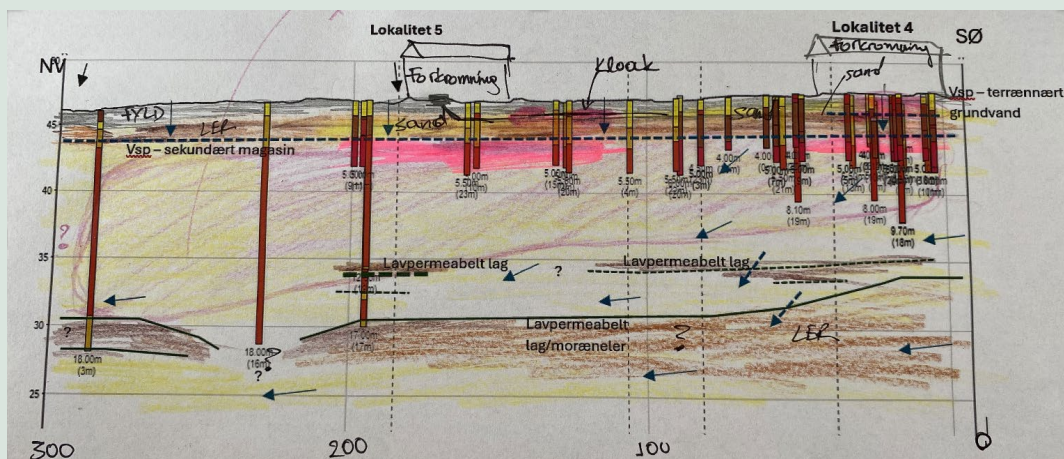
Hovedkomponenten i forureningen er PFOS. Der er påvist koncentrationer på op til 47.000 ng/l på lokaliteten. Udover PFOS er der påvist høje koncentrationer af PFBS, PFHxS og PFTTrDs (>50 ng/l) i flere borer. Generelt er forureningen knyttet til det øvre sandlag og træffes i dybder mindre end 5,5 m u.t. Der er udført niveauspecifik prøvetagning ned til 14 m u.t. hvor koncentrationerne er stærkt aftagende.

3.6.2 Vigtigste resultater

Der er tale om en blandingsforurening, og generelt følger forureningen med PFAS forureningen med chlorerede opløsningsmidler. Der er således et kildeområde på lokaliteten, hvor forureningen spredes i nedstrøms retning med det øvre grundvand. Derudover er der et markant kildeområde på nabolokaliteten (lokalitet 5). Forureningen spreder sig mest i den øvre del af magasinet og er vertikal afgrænset.

3.6.3 Udarbejdet lokal specifik konceptuel model

På lokaliteten er der et lerlag, hvori der er konstateret de højeste koncentrationer af PFOS i jord (340 µg/kg TS). Forurening derfra udvaskes til det sekundære magasin, hvorfra den spredes under lokalitet 5, hvor der træffes endnu et hotspot. Lokaliteten vurderes at ligne Typologi 6.



FIGUR 19. Lokal specifik konceptuel model ved Lokalitet 4. Pilene repræsenterer mulig strømningsretning af nedsivende vand fra terrænet og mulig strømningsretning af grundvand under vandspejlet. PFAS forureningsfanen er afbilledet med lyserød farve. Det kraftige lyserøde farve viser de højeste koncentrationer. Stiplet pil udgør en mulig, men sandsynligvis lille strømning.

3.7 Lokalitet 5

Lokaliteten er nabo til Lokalitet 4, og samme virksomhed har haft aktiviteter på begge adresser. På lokalitet 5 er aktiviteterne startet i 1970. Der er også på denne ejendom foretaget forkromning i karbade i værkstedet, hvor der er brugt PFAS skum.

3.7.1 Koncentrationsniveauer

Der er i samtlige borer på lokaliteten påvist indhold af sum af 4 PFAS i jordprøver, som overskrider jordkvalitetskriteriet på 10 µg/kg TS. Indholdet er fortrinsvis identificeret som PFOS. De højeste indhold er målt i den øverste meter. I området ved de tidligere aktiviteter med hård forkromning er der påvist indhold af sum af 4 PFAS 85 µg/kg TS. Det er interessant, at de højeste indhold er påvist i et udendørs areal og formodes at stamme fra utæt kloak. Her er der identificeret et kildeområde med indhold på 1.970 µg/kg TS. I samme område er der udtaget prøver af porevandet i den umættede zone ved hjælp af sugeceller. I porevandet er der påvist indhold af PFAS på op til 120.000-250.000 ng/l. Det er PFOS, der påvist i de højeste koncentrationer i både jord og porevand.

TABEL 10. Maksimale påviste koncentrationer af PFAS i jord og grundvand på Lokalitet 5.

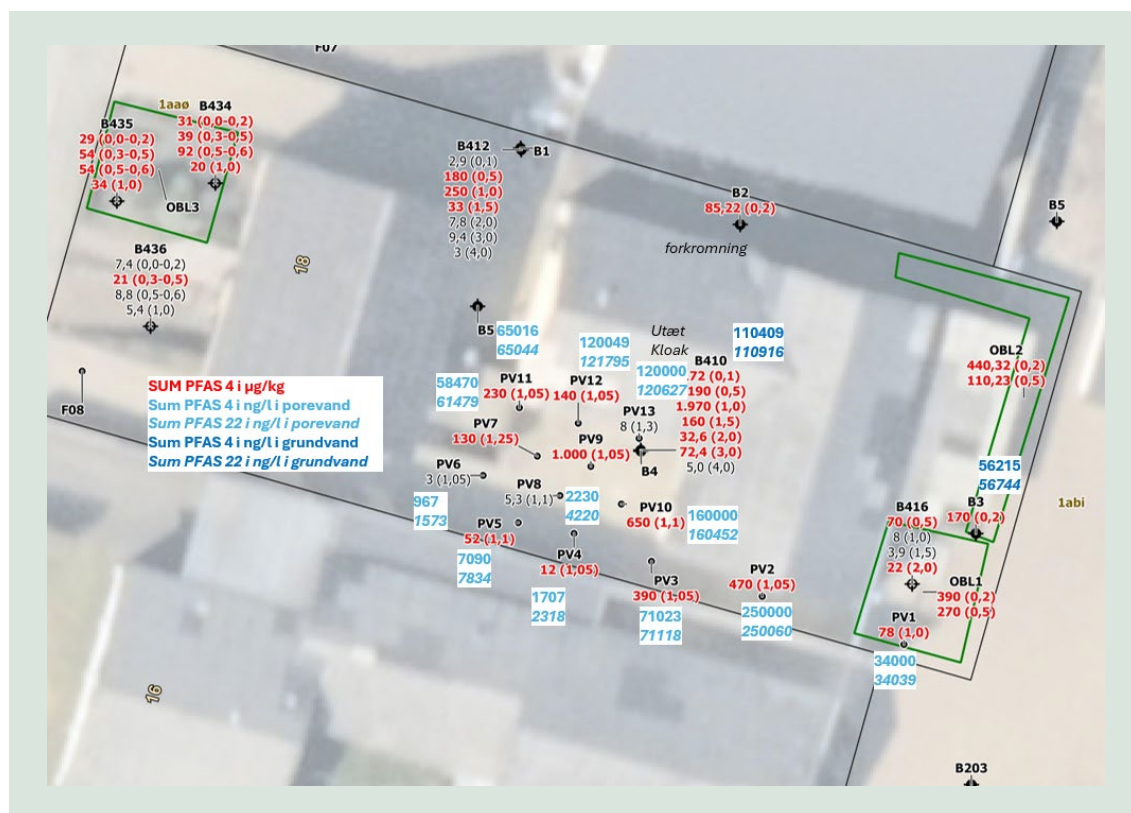
PFAS	Jord (µg/kg TS)	Grundvand, sekundært (ng/l)	Porevand (ng/l)
PFBA (Perfluorbutansyre)	0,61	55	140
PFBS (Perfluorbutansulfonsyre)	0,25	530	780
PFPeA (Perfluorpentansyre)	0,41	360	230
PFPeS (Perfluorpentansulfonsyre)	0	15	230
PFHxA (Perfluorhexansyre)	0,58	31	610
PFHxS (Perfluorhexansulfonsyre)	7,6	550	2.700
PFHpA (Perfluorheptansyre)	0,25	20	120
PFHpS (Perfluorheptansulfonsyre)	2,9	760	2.600
PFOA (Perfluoroktansyre)	0,39	70	200
PFOS (Perfluoroktansulfonsyre)	1.970	199.000	250.000
6:2 FTS (Fluortelomersulfonat)	ip	ip	ip
PFOSA (Perfluoroktansulfonamid)	0,1	ip	ip
PFNA (Perfluoronansyre)	0,58	ip	ip
PFNS (Perfluoronansulfonsyre)	0,73	17	17
PFDA (Perfluordekansyre)	ip	ip	ip

PFAS	Jord (µg/kg TS)	Grundvand, sekundært (ng/l)	Porevand (ng/l)
PFDS (Perfluordekansulfonsyre)	ip	ip	ip
PFUnDA (Perfluorundekansyre)	0,11	ip	ip
PFUnDS (Perfluorundekansulfonsyre)	ip	ip	ip
PFDODA (Perfluordodekansyre)	ip	ip	ip
PFDODS (Perfluordodekansulfonsyre)	ip	ip	ip
PFTrDA (Perfluortridekansyre)	3,7	ip	ip
PFTrDS (Perfluortridekansulfonsyre)	ip	170	ip
Sum af 4 PFAS	1.970	199.620	252.900
Sum af 22 PFAS	1.972	200.458	257.627

Det har ikke været muligt at få oplyst den kemiske sammensætning af det anvendte skum og dermed indhold af PFAS. Forureningen aftager markant i dybden på lokaliteten.

3.7.2 Vigtigste resultater

En situationsplan over PFAS forurening i jord og grundvand/porevand på lokaliteten fremgår i FIGUR 20. Det er PFOS, der påvist i de højeste koncentrationer i både jord og porevand. Med afstand fra hotspottet stiger andelen af de øvrige stoffer, såsom PFBS, PFPeS og PFHxS, selvom PFOS er altid dominerende.



FIGUR 20. Situationsplan med udvalgte resultater fra lokalitet 5.

3.7.3 Udarbejdet lokal specifik konceptuel model

Den konceptuelle model for lokaliteten 4 og 5 er samlet i afsnit 3.6.3, hvortil der henvises.

3.8 Lokalitet 6

Lokaliteten har gennem en længere årrække fungeret som losseplads, fyldplads samt special-depot for aske og slagge. Deponering stammer fra et affaldsforbrændingsanlæg samt slam fra et renseanlæg. Udover forurening med PFAS er der også påvist forurening med især pesticider og chlorphenoler.

3.8.1 Koncentrationsniveauer

I nedenstående tabel er de højeste koncentrationer, der er påvist i deponeret materiale og grundvand (opdelt på sekundært og primært grundvandsmagasin) opsummeret. Kun koncentrationerne fra de seneste omfattende undersøgelser i 2022 og 2023 er medtaget. Det skal bemærkes, at en maksimal koncentration af en PFAS ikke nødvendigvis er påvist i den samme prøve som den maksimale koncentration af en anden PFAS, da der er tale om flere forskellige kildeområder.

TABEL 11. Maksimale påviste koncentrationer af PFAS i deponeret materiale og grundvand (sekundært og primært) på lokalitet 6.

PFAS	Deponeret materiale (µg/kg TS)	Grundvand, sekundært (ng/l)	Grundvand, primært (ng/l)
PFBA (Perfluorbutansyre)	2,38	2.400	400
PFBS (Perfluorbutansulfonsyre)	i.p. (typisk <0,3)	i.p. (typisk <0,3)	2,4
PFPeA (Perfluorpentansyre)	5,21	7.900	1.400
PFPeS (Perfluorpentansulfonsyre)	i.p. (typisk <0,3)	i.p. (typisk <0,3)	0,46
PFHxA (Perfluorhexansyre)	15,1	16.000	1.400
PFHxS (Perfluorhexansulfonsyre)	i.p. (typisk <0,3)	i.p. (typisk <0,3)	17
PFHpA (Perfluorheptansyre)	15,6	2.400	150
PFHpS (Perfluorheptansulfonsyre)	i.p. (typisk <0,3)	i.p. (typisk <0,3)	i.p. (typisk <0,3)
PFOA (Perfluoroktansyre)	81,5	9.500	120
PFOS (Perfluoroktansulfonsyre)	8,37	i.p. (typisk <0,3)	7,2
6:2 FTS (Fluortelomersulfonat)	11,4	4.100	24
PFOSA (Perfluoroktansulfonamid)	i.p. (typisk <0,3)	i.p. (typisk <0,3)	i.p. (typisk <0,3)
PFNA (Perfluornonansyre)	44	92	4,7
PFNS (Perfluornonansulfonsyre)	i.p. (typisk <0,3)	i.p. (typisk <0,3)	i.p. (typisk <0,3)
PFDA (Perfluordekansyre)	141	14	9,1
PFDS (Perfluordekansulfonsyre)	i.p. (typisk <0,3)	i.p. (typisk <0,3)	i.p. (typisk <0,3)
PFUnDA (Perfluorundekansyre)	352	i.p. (typisk <0,3)	i.p. (typisk <0,3)
PFUnDS (Perfluorundekansulfonsyre)	i.p. (typisk <0,3)	i.p. (typisk <0,3)	i.p. (typisk <0,3)
PFDoDA (Perfluordodekansyre)	43,4	i.p. (typisk <0,3)	i.p. (typisk <0,3)
PFDoDS (Perfluordodekansulfonsyre)	i.p. (typisk <0,3)	i.p. (typisk <0,3)	i.p. (typisk <0,3)
PFTTrDA (Perfluortridekansyre)	9,46	i.p. (typisk <0,3)	i.p. (typisk <0,3)
PFTTrDS (Perfluortridekansulfonsyre)	i.p. (typisk <0,3)	i.p. (typisk <0,3)	i.p. (typisk <0,3)
Sum af 4 PFAS	134	9.600	140
Sum af 22 PFAS	412	42.400	3.370

I.p.: ikke påvist (den typiske detektionsgrænse er angivet i ()).

Som det fremgår, er der påvist koncentrationer af PFAS i prøver fra det deponeret materiale, som svagt overskrider jordkvalitetskriteriet for sum af 22 PFAS (400 µg/kg TS), samt for sum af 4 PFAS (100 µg/kg TS). En enkelt blandprøve blev udtaget fra opboret jord, hvor der ikke blev påvist indhold over jordkvalitetskriteriet.

Der er påvist kraftig forurening af PFAS i det primære grundvandsmagasin, hvor koncentrationerne overskrider grundvandskvalitetskriterierne markant (op til 70 gange for sum af 4 PFAS

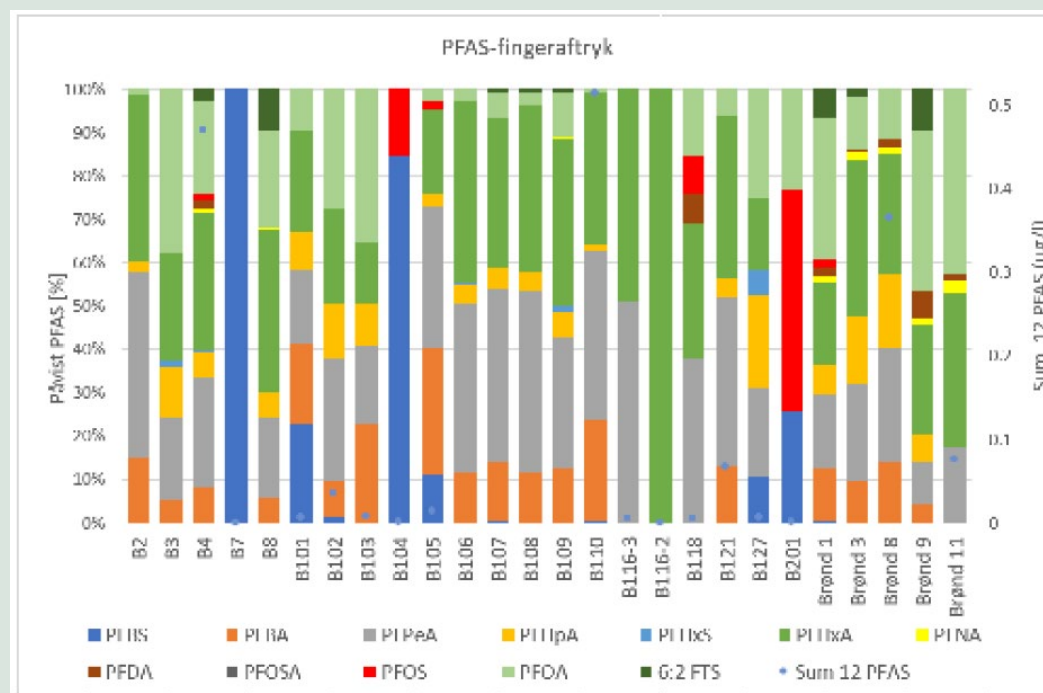
og 34 gange for sum af 22 PFAS). En enkelt prøve fra et terrænnært sekundært magasin viser forurening, som overskrider kriterierne for sum af 4 PFAS på 4.800 gange og 420 gange for sum af 22 PFAS.

Udover grundvandsprøver er der udtaget vandprøver i brønde fra specialdepotet. Her er sum af 4 PFAS påvist på mellem 34 - 90.000 ng/l og sum af 22 PFAS på 436 – 230.000 ng/l. En nærliggende sø (ikke målsat) er også prøvetaget otte gange over et år. Indholdet af PFAS fluktuerer over året, men i juni samt juli er det generelle miljøkvalitetskrav for indlandsvand overskredet med maksimalt 1,3 gange. Det vurderes, at indholdet af PFAS i søen muligvis kan relateres til grundvandsforureningen fra lokaliteten.

3.8.2 Vigtigste resultater

Nogle af de vigtigste resultater er fremhævet nedenfor.

Baseret på en tidligere undersøgelse samt den seneste undersøgelse er den procentvise fordeling af 12-PFAS-forbindelser i grundvand udarbejdet. PFPeA, PFHxA og PFOA udgør den største andel af sum af 12 PFAS i alle udtagne prøver, men også PFBA og PFHpA ses i høje koncentrationer. Ved et af kildeområderne ses et højere indhold af 6:2 FTS. Nedstrøms en af kildeområderne ses et lettere forøget indhold af PFPeA og PFHxA, hvilket kan indikere nedbrydning af 6:2 FTS opstrøms. Fingeraftrykket viser en forholdsvis ensartet fordeling, hvilket indikerer, at der med stor sandsynlighed kun er en type kilde til forureningen.



FIGUR 21. PFAS- fingeraftryk der viser den procent vise fordeling af PFAS- forbindelser i analyse-rede vandprøver på lokalitet 6. Blå prikker angiver den samlede sum, som angives på y-aksen til højre. Kan prikken ikke ses, er det fordi, indholdet ligger uden for skalaen (dvs. indhold større end 0,5 µg/l).

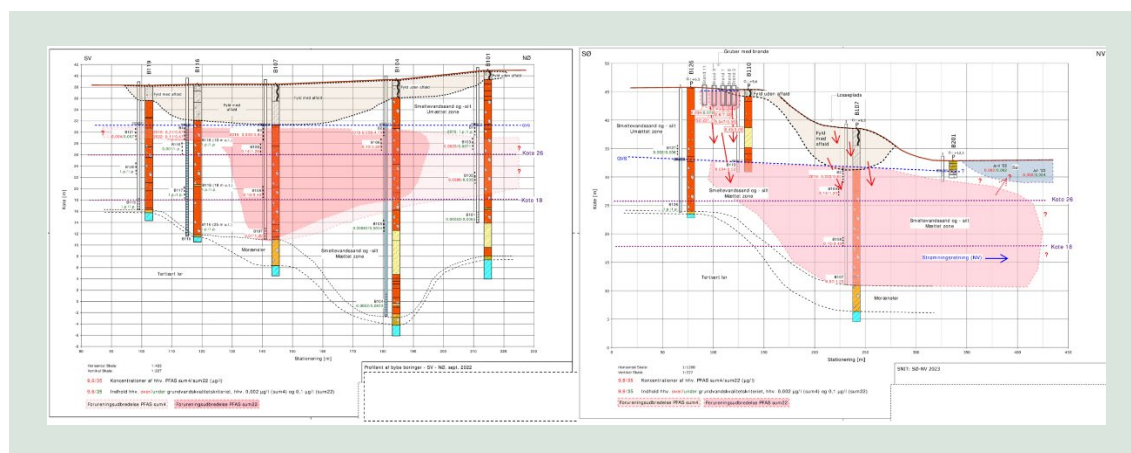
En fingeraftryksanalyse er også foretaget på vandprøver udtaget fra overfladevand. Indholdet af PFAS udgøres primært af PFBS, PFOS, PFHpA, PFHxA, og PFOA. De tre sidstnævnte for-

bindelser anses at stamme fra den tidligere losseplads. PFAS-sammensætningen samt koncentrationer fluktuierer over tid, hvilket kan indikere, at overfladevandet modtager PFAS-holdigt vand fra andre kilder.

3.8.3 Udarbejdet lokal specifik konceptuel model

I FIGUR 22 er vist en overordnet konceptuel fortolkning af geologien og forureningen for lokaliteten. Den konceptuelle model er vist ved to snit (SV-NØ og SØ-NV). Lokaliteten er beliggende på kanten af en begravet dal i et morænelandskab præget af dødishuller. Det vurderes, at smeltevandssandet observeret på lossepladsen udgør en selvstændig geologisk enhed, og denne har direkte hydraulisk kontakt med sandet/gruset i den begravede dal. Det nærliggende overfladevand vurderes ikke at være i direkte hydraulisk kontakt med grundvandet under lossepladsen.

Lokaliteten passer ikke umiddelbart til nogle af de definerede typologier, men vi vurderer, at det nærmeste er typologi 6.



FIGUR 22. Lokal specifik konceptuel model for lokalitet 6. Geologi samt forureningsudbredelse af sum af 4 PFAS og sum af 22 PFAS for profilsnit SV-NØ (figur til venstre) og SØ-NV (figur til højre).

3.9 Lokalitet 7

Lokaliteten har i perioden fra 1973 til 1992 været benyttet til møbelproduktion med galvaniseringsanlæg og lakering. Selve galvaniseringen har været forkromning af metaldele til møbler, og er foregået i en række forkromningskar. Der er udført indledende undersøgelser i 1990'erne, og i 2017 er der udført supplerende undersøgelser, hvor der er udtaget vandprøver til analyse for PFAS. I 2023 er der udført en udvidet forureningsundersøgelse, der har bl.a. omfatter jord og vandprøver for PFAS.

På ejendommen træffes vekslende lag af ler og sand til ca. 5 meters dybde. Derefter træffes sand, som vurderes at udgøre et sammenhængende sekundært grundvandsmagasin. Det primære grundvandsmagasin i området træffes i ca. kote -10 til -25 (svarende til ca. 35 -50 m ut.t.)

PFAS forurening er konstateret i det sekundære grundvand og i jorden. Jordforurening med PFAS er påvist i 0,5 til 6,5 m u.t. Grundvandsforurening er knyttet til det sekundære grundvandsmagasin, der består af fint til mellemkornet sand og træffes fra 6-8 meter under terræn. Jf. den regionale model underlejres sandmagasinet af smeltevandsler i ca. 20 m u.t.

3.9.1 Koncentrationsniveauer

Ved undersøgelsen er der påvist indhold af sum af 22 PFAS i jord på op til 150 µg/kg TS i 6,5 m u.t. hvor PFOS er det dominerende komponent. Derudover påvises der lave koncentrationer af 6:2 FTS på ca. 0,19 µg/kg TS.

I det sekundære grundvand ses meget høje indhold af 6:2 FTS på op til 62.000 ng/l i en enkelt boring, filtersat i overgangen til det sekundære grundvand 4-8 m u.t. Niveauet er ikke genfundet i andre boringer, der er dog nedstrøms truffet 6:2 FTS koncentrationer på over 3.000 ng/l. Dermed er 6:2 FTS det dominerende komponent i grundvandet. Derudover træffes der høje niveauer af PFPeA (239 ng/l), PFHxA 130 ng/l, PFHxS (935 ng/l), PFOA 110 ng/l og PFOS 97 ng/l. Maksimale koncentrationer er opsummeret i TABEL 12.

TABEL 12. Maksimale påviste koncentrationer af PFAS jord og grundvand (sekundært) på lokalitet 7.

PFAS	Grundvand, sekundært (ng/l)	Jord (µg/kg TS)
PFBA (Perfluorbutansyre)	41	i.p
PFBS (Perfluorbutansulfonsyre)	17	i.p
PFPeA (Perfluorpentansyre)	239	0,3
PFPeS (Perfluorpentansulfonsyre)	56	i.p
PFHxA (Perfluorhexansyre)	130	0,16
PFHxS (Perfluorhexansulfonsyre)	935	0,31
PFHpA (Perfluorheptansyre)	140	i.p
PFHpS (Perfluorheptansulfonsyre)	114	0,33
PFOA (Perfluoroktansyre)	229	0,054
PFOS (Perfluoroktansulfonsyre)	97	150
6:2 FTS (Fluortelomersulfonat)	62.000	0,19
PFOSA (Perfluoroktansulfonamid)	i.p	i.p
PFNA (Perfluornonansyre)	i.p	0,034
PFNS (Perfluornonansulfonsyre)	i.p	i.p
PFDA (Perfluordekansyre)	i.p	i.p
PFDS (Perfluordekansulfonsyre)	i.p	i.p
PFUnDA (Perfluorundekansyre)	i.p	i.p
PFUnDS (Perfluorundekansulfonsyre)	i.p	i.p
PFDODA (Perfluordodekansyre)	i.p	i.p
PFDODS (Perfluordodekansulfonsyre)	i.p	i.p
PFTTrDA (Perfluortridekansyre)	i.p	i.p
PFTTrDS (Perfluortridekansulfonsyre)	i.p	i.p
Sum af 4 PFAS	1.180	150
Sum af 22 PFAS	63.000	150

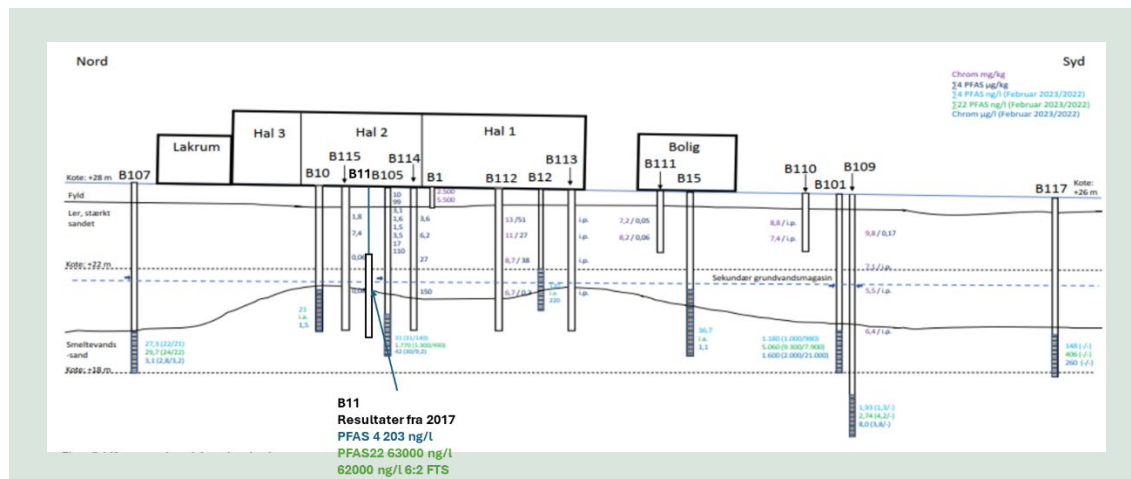
3.9.2 Vigtigste resultater

I en boring træffes ekstremt høje grundvandskoncentrationer af 6:2 FTS > 60.000 ng/l. 6:2 FTS kan transformeres til PFHxA, PFPeA og 5:3 FTCA //. Både PFPeA og PFHxA er fundet i høje niveauer (100-300 ng/l) i grundvandet på lokaliteten, mens der ikke er undersøgt for 5:3 FTCA. Boringen, hvor de højeste niveauer er truffet i grundvandet, er filtersat i overgangen til

vandspejlet. Det er muligt, at forklaringen for den store forskel mellem denne boring og de øvrige boringer ligger i PFAS tendens til at blive i overgangen mellem luft og vand.

3.9.3 Udarbejdet lokal specifik konceptuel model

Forureningssituationen på lokaliteten sammenfattes af nedenstående konceptuel model.



FIGUR 23. Lokal specifik konceptuel model for lokalitet 7. Modificeret fra undersøgelsesrapport.

Af den konceptuelle model fremgår, at forurening i jorden, som består primært af PFAS'erne i sum af 4 PFAS og mest PFOS (150 µg/kg TS), træffes tæt på kildeområdet. Den højeste koncentration i jord er truffet under vandspejlet i 6,5 m u.t. De højeste koncentrationer af PFOS i vand er "kun" 97 ng/l, og er truffet ca. 15 meter nedstrøms kildeområdet.

Lokalitetens hydrogeologi passer ikke umiddelbart til nogle af de definerede typologier, men det vurderes, at det nærmeste er typologi 3A.

3.10 Lokalitet 8

På lokaliteten har der fra 1900 og frem til efter 1990 været garveri. Alle bygninger tilhørende det tidligere garveri er revet ned, og der er i dag opført butikker. Der blev påvist en kraftig olieforurening af grundvandet omkring tankene med terpentin, petroleum og benzin, og derfor blev der i 1998 etableret et afværgebrøn i det terrænnære grundvand, hvorfra forurenede grundvand blev opsamlet og ledt til spildevandsanlæg. Brønnen er fortsat i drift, og der pumpes knap 1.000 m³ drønvand op fra den tilknyttede pumpebrønd om året.

Der er siden 1992 udført en række undersøgelser og udført afværgetiltag i forhold til anvendelse af området, samt i forhold til grundvandet i området, som ligger i et indvindingsopland. De udførte undersøgelser har tidligere haft størst fokus på kulbrinte-forureningen fra tanke og produktion og senere fokus på de chlorerede opløsningsmidler i ft. områdets primære grundvand og for den lokale vandindvinding. Den seneste undersøgelse blev iværksat, da der blev påvist indhold af PFAS i nærliggende indvindingsboringer. Undersøgelsen havde desuden til formål at undersøge, hvorvidt det påviste indhold af PFAS stammer fra denne lokalitet eller fra andre kilder opstrøms.

3.10.1 Koncentrationsniveauer

Ved undersøgelserne blev der påvist høje indhold af PFAS primært PFHxS, PFHpA, PFOA og PFOS i grundvandet. Maksimal koncentrationer er opsummeret i TABEL 13.

TABEL 13. Maksimale påviste koncentrationer af PFAS i grundvand (primært og sekundært) samt drænvand på lokalitet 8.

PFAS	Grundvand, primært (ng/l)	Grundvand, sekundært (ng/l)	Drænvand (ng/l)
PFBA (Perfluorbutansyre)	130	150	130
PFBS (Perfluorbutansulfonsyre)	80	210	190
PFPeA (Perfluorpentansyre)	240	230	190
PFPeS (Perfluorpentansulfonsyre)	47	150	120
PFHxA (Perfluorhexansyre)	390	260	180
PFHxS (Perfluorhexansulfonsyre)	670	1.270	780
PFHpA (Perfluorheptansyre)	590	500	410
PFHpS (Perfluorheptansulfonsyre)	12	48	44
PFOA (Perfluoroktansyre)	880	970	780
PFOS (Perfluoroktansulfonsyre)	960	1.200	2.790
6:2 FTS (Fluortelomersulfonat)	i.p.	i.p.	i.p.
PFOSA (Perfluoroktansulfonamid)	i.p.	2,7	14
PFNA (Perfluornonansyre)	154	310	260
PFNS (Perfluornonansulfonsyre)	i.p.	i.p.	i.p.
PFDA (Perfluordekansyre)	7,0	105	39
PFDS (Perfluordekansulfonsyre)	i.p.	i.p.	i.p.
PFUnDA (Perfluorundekansyre)	i.p.	4,1	4,2
PFUnDS (Perfluorundekansulfonsyre)	i.p.	i.p.	i.p.
PFDoDA (Perfluordodekansyre)	i.p.	i.p.	i.p.
PFDoDS (Perfluordodekansulfonsyre)	i.p.	i.p.	i.p.
PFTTrDA (Perfluortridekansyre)	i.p.	i.p.	i.p.
PFTTrDS (Perfluortridekansulfonsyre)	i.p.	i.p.	i.p.
Sum af 4 PFAS	2.664	3.750	4.610
Sum af 22 PFAS	4.160	5.150	5.750
i.p.: ikke påvist			

3.10.2 Vigtigste resultater

Der er påvist høje indhold i det sekundære grundvand, i drænvandet og i det primære grundvand centralt på lokaliteten. Indholdene overskrider grundvandskvalitetskriteriet for sum af 4 PFAS-forbindelser op til 1.875 gange og for sum af 22 PFAS-forbindelser op til 51 gange. Der er således påvist et højt indhold af PFAS på selve lokaliteten, og kun i begrænset omfang opstrøms denne lokalitet. I monitoringsboringerne, der er placeret mellem lokaliteten og indvindingsboringerne, er der påvist begrænset forhøjet indhold over grundvandskvalitetskriterierne (op til ca. 4 gange). De højeste koncentrationer er påvist imellem de tidligere garveribygninger, men ved undersøgelsen er der ikke udført borer ved specifikke tidligere kilder.

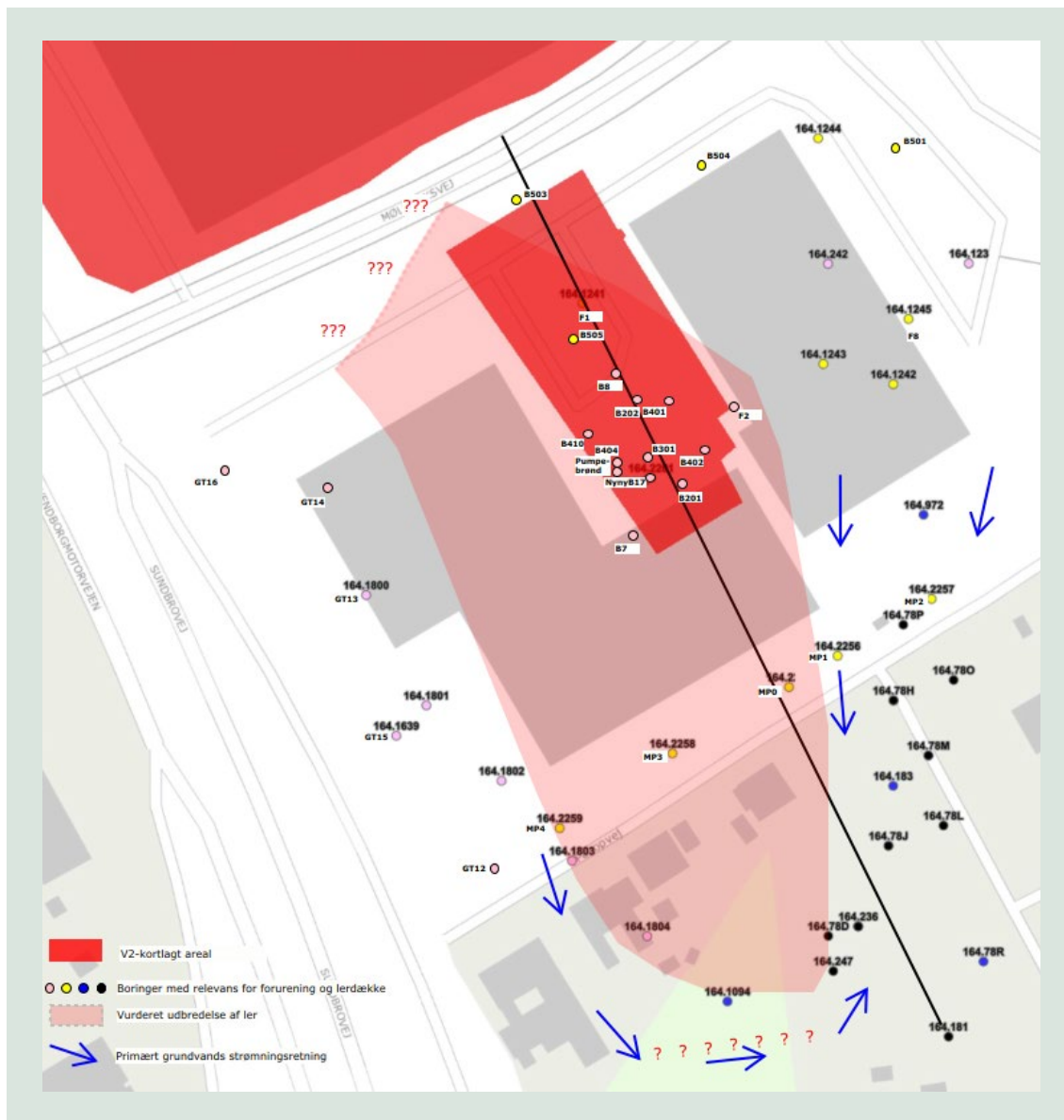
I drænvandet er der påvist et meget højt indhold af PFOS, sammenlignet med prøver fra grundvand.

Det påviste indhold af PFAS i det primære og sekundære grundvand vurderes at kunne stamme fra de tidligere aktiviteter med garveri på lokaliteten.

3.10.3 Udarbejdet lokal specifik konceptuelle modeller

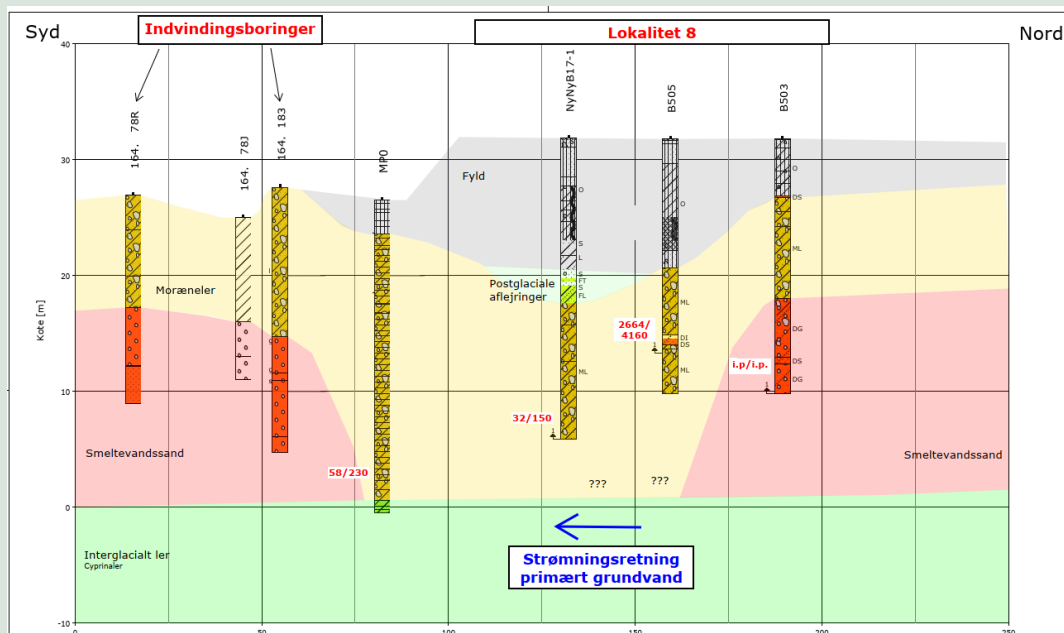
I FIGUR 24 og FIGUR 25 er vist en overordnet konceptuel fortolkning af geologien. På baggrund af de udførte borer vurderes der at være et område langs vejen, kaldet "Morænelersbræmme", hvor områdets primære grundvandsmagasin ikke eksisterer. Området uden primært grundvandsmagasin strækker sig mod nord, hvor magasinet heller ikke er truffet i en række borer. I FIGUR 24 er vist en vurderet udbredelse af det område, hvor områdets pri-

mære grundvandsmagasin sandsynligvis ikke eksisterer. Udbredelsen er vurderet ud fra relativt få boringer og er som følge heraf usikker. På figuren er med pile angivet, at grundvand kan strømme til indvindingsboringer fra begge sider af "morænelersbræmmen", Det vurderes at evt. forureningsspredning med PFAS i det primære magasin følger samme spredningsveje.



FIGUR 24. Vurderet udbredelse af område uden primært grundvand.

Den konceptuelle model (FIGUR 25) viser det geologiske snit beliggende i nord-sydgående retning, og af figuren fremgår de påviste koncentrationer fra den seneste undersøgelse. Det ses af figuren, at strømningsretningen af de primære grundvand er mod syd mod indvindingsboringerne.



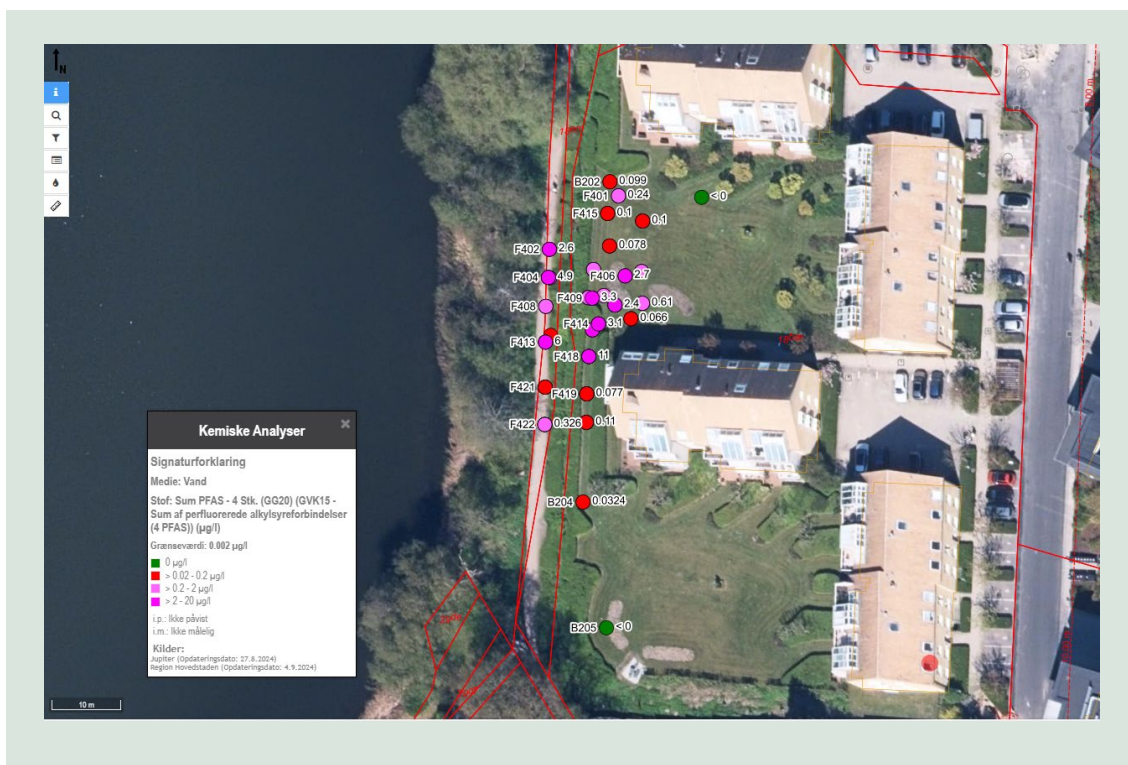
FIGUR 25. Lokal specifik konceptuel model for lokalitet 8. Geologi samt forureningskoncentration i ng/l af PFAS (illustreret som sum af 4 PFAS/sum af 22 PFAS) for profilsnit Nord-Syd i strømningsretning af primært magasin.

Lokaliteten passer ikke umiddelbart til nogle af de definerede typologier, men vi vurderer, at det nærmeste er typologi 4.

3.11 Lokalitet 9

På lokaliteten har der ligget en plast og gummifabrik med galvaniseringsanlæg. Lokaliteten ligger ved en sø og kanalsystem. Der er udført omfattende undersøgelser på lokaliteten, og udtaget jord- og vandprøver samt installeret sugeceller. Desuden er der udført geofysiske undersøgelser. På lokaliteten foreligger også en kraftig forurening med chlorerede opløsningsmidler. En situationsplan over lokaliteten med indhold af PFAS 4 i det sekundære grundvand (i µg/l) fremgår af FIGUR 26.

Terrænkoterne lokalt på lokaliteten har store variationer på grunden med de højeste koter i den syd sydøstlige del af lokaliteten og faldende mod søen og mod nord. Geologien består af et 1-4 m tykt fyldlag med varierende indhold af muld, sand, ler, grus. I dele af fyldlaget var der desuden slagger, tegl- og plaststykker m.m. Fyldlaget er sammenblandet med det øvre sandlag i DK-modellen. På den sydlige del af ejendommen er der et udbredt terrænnært vådt sandlag med varierende tykkelser mellem 0,3 og mere end 5 meter tykt. Fyldlaget og det øvre sandlag underlejres på lokaliteten af moræneler med indslag af smeltevandssand og smeltevandssler med varierende tykkelser. Det øvre lag af moræneler ser ikke ud til at være tilstede på den sydlige del af lokaliteten jf. de geofysiske undersøgelser som også er udført på den pågældende lokalitet. Det nedre morænelerslag ser ud til at tynde ud mod nord, hvorved der potentielt set findes en direkte hydraulisk kontakt mellem det regionale sandmagasin som benævnes mellem sand 1 i DK-modellen og det primære grundvandsmagasin og kalken, hvorfra der indvindes.



FIGUR 26. Situationsplan med angivelse af koncentrationer i grundvand, for lokalitet 9.

Der er udført HPT og slugtest i det terrænnære sandlag/ fyld. HPT viser meget højere ledningsevne end de udførte slugtests. (faktor 10 til 1000). Der er også variationer af grundvandspejl i borerne. I december 2022 lå vandspejlet i borerne B202-B205 i kote 18,3-18,5 m DVR90, og der ses overordnet en opadrettet gradient i selve det terrænnære sand. I pejlerunden fra sommer 2023 ses der igen ca. samme potentiale. Derfor vurderes ikke, at der er store vandspejlsvariationer i det terrænnære grundvand på lokaliteten.

3.11.1 Koncentrationsniveauer

Ved undersøgelserne blev der påvist høje indhold af PFAS primært PFOS i grundvandet. Maksimale koncentrationer er opsummeret i TABEL 14.

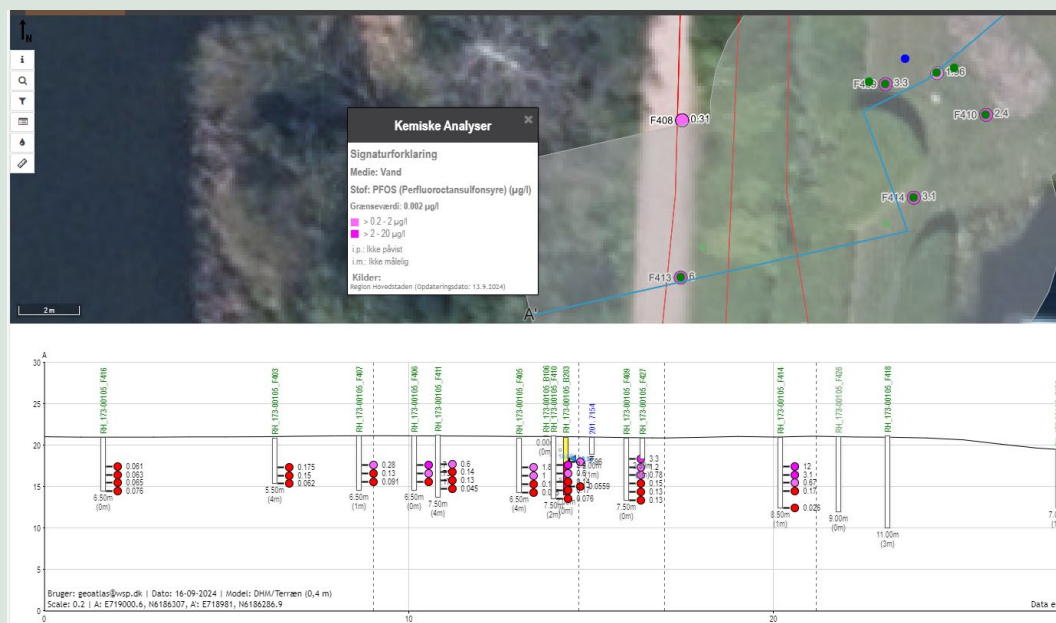
TABEL 14. Maksimale påviste koncentrationer af PFAS jord og grundvand (sekundært) på Lokalitet 9.

PFAS	Jordprøver - (µg/kg TS)	Grundvand, sekundært (ng/l)
PFBA (Perfluorbutansyre)	0,27	40
PFBS (Perfluorbutansulfonsyre)	0,04	24
PFPeA (Perfluorpentansyre)	0	31
PFPeS (Perfluorpentansulfonsyre)	0,09	36
PFHxA (Perfluorhexansyre)	0,11	33
PFHxS (Perfluorhexansulfonsyre)	0,23	110
PFHpA (Perfluorheptansyre)	0,14	17
PFHpS (Perfluorheptansulfonsyre)	0,45	270
PFOA (Perfluoroktansyre)	0,46	71
PFOS (Perfluoroktansulfonsyre)	160	12.000
6:2 FTS (Fluortelomersulfonat)	0	4
PFOSA (Perfluoroktansulfonamid)	0	ip
PFNA (Perfluornonansyre)	0,1	6,7
PFNS (Perfluornonansulfonsyre)	0	1,4
PFDA (Perfluordekansyre)	0,11	2,9
PFDS (Perfluordekansulfonsyre)	0,26	2,1
PFUnDA (Perfluorundekansyre)	0	ip
PFUnDS (Perfluorundekansulfonsyre)	0	ip
PFDoDA (Perfluordodekansyre)	0	1,1
PFDoDS (Perfluordodekansulfonsyre)	0	ip
PFTTrDA (Perfluortridekansyre)	0	2
PFTTrDS (Perfluortridekansulfonsyre)	0	ip
Sum af 4 PFAS	160	12.000
Sum af 22 PFAS	162	12.000
ip: ikke påvist		

3.11.2 Vigtigste resultater

På lokaliteten ses der en kraftig forurening med primært PFOS, der spreder sig i det øvre sandlag. Der er truffet PFOS i jorden, i porevandet i den umættede zone og i overgangen til vandspejlet med meget høje koncentrationer og en meget stejl koncentrationsgradient over dybden i det øvre grundvandsmagasin. Derimod ses der for andre stoffer et nogenlunde ensartet niveau over dybden eks. for PFBA, PFPeA og PFHxA. Det faktum at der er store forskel mellem koncentrationen af PFOS nær vandspejlet og de dybere prøver, mens der for de øvrige stoffer ses mere ensartede niveauer, understreger betydning af luft-vand grænsefladen for PFOS tilbageholdelse. PFOS er desuden det eneste stof, der er fundet i høje koncentrationer i jordprøverne.

Dette illustreres af FIGUR 27 og FIGUR 28, hvor der bemærkes, at koncentrationerne er angivet i µg/l.



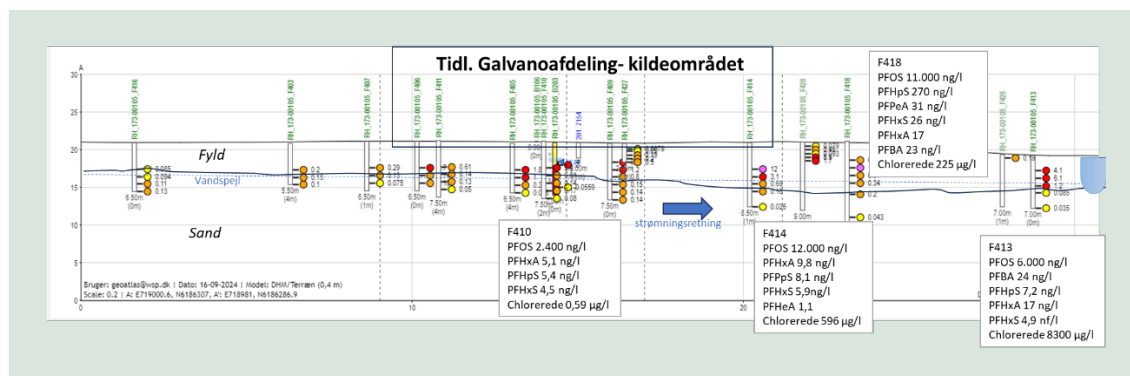
FIGUR 27. Indhold af PFOS over dybden med afstand fra kildeområdet, på lokalitet 9.



FIGUR 28. Indhold af PFHxA over dybden med afstand fra kildeområdet, på lokalitet 9.

3.11.3 Udarbejdet lokal specifik konceptuel model

Der er udarbejdet en overordnet konceptuel model for lokaliteten (FIGUR 29).



FIGUR 29. Skitse af lokal specifik konceptuel model, for lokalitet 9.

Den konceptuelle model viser et geologisk snit fra øst mod vest, hvor søen ligger. Det fremgår, at de højeste koncentrationer påvises i overgangen mellem den mættede og den umættede zone, men at forurening har spredt sig mod søen formentlig med det terrænære grundvand. I forureningsfanen findes koncentrationer af PFOS i samme høje størrelsesorden som i kildeområdet. Afstanden er dog kun 30-40 meter og med en grundvandshastighed i det sekundære grundvand på 7-8 meter om året og en forureningsalder på over 40 år (industriaktiviteterne sluttede i 1984) vurderes det, at hovedparten af de mere mobile PFAS har forladt lokaliteten og er endt i søen. Lokaliteten vurderes at ligne mest typologi 6.

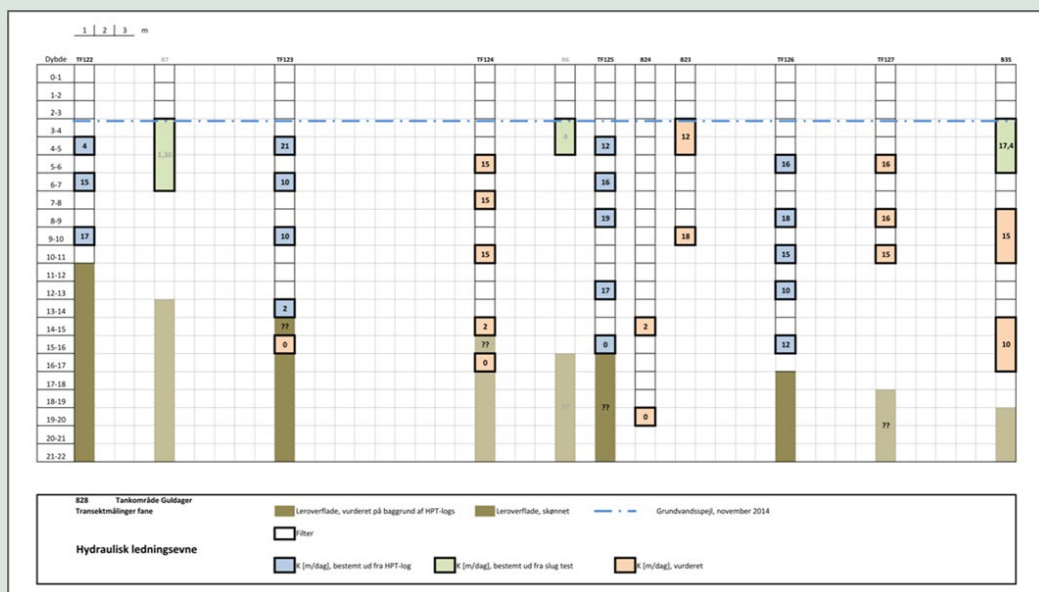
3.12 Lokalitet 10

Lokaliteten er et oliedepot, som blev etableret i 1965. Der er tidligere udført undersøgelser og afværgeforanstaltninger i forbindelse med en olieforurening.

I 2022 og 2023 blev der gennemført undersøgelser ved en pumpestation, som ligger ved oliedepotet. På anlægget blev der i ca. 2007 installeret et automatisk rumslukningssystem baseret på film-forming fluoroprotein foam (FFFP) – brandskum baseret på moderne fluorotelomer PFAS. Ved installation og regelmæssige test af anlægget er skum fra anlægget blevet sprøjtet ud på ubefæstet jord ved bygningerne.

Forurening med PFAS er konstateret i et sekundært grundvandsmagasin med en overliggende ca. 3 m umættet zone (fyld, sand og moræner). Grundvandsmagasinet er afgrænset nedadtil af smeltevandsler, som hælder fra øst mod vest fra 6-7 m u.t. til mere end 30 m u.t., således at det sekundære grundvandsmagasin har stigende mægtighed fra øst mod vest. Det observeres, at forureningen med PFAS (og oliestoffer) dykker i grundvandsmagasinet fra ca. 3-7 m u.t. til 15-20 m u.t. inden for 100 m fra kildeområdet. Undersøgelserne omfatter ikke prøvetagning af primært grundvandsmagasin, som forekommer ca. 40-50 m u.t.

FIGUR 30 viser et profilsnit (fra øst mod vest) langs et transekt på tværs af strømingsretning. Transektet anvendes til monitoring af restforurening af olieforurening. I bunden af profilet fremgår overflade af smeltevandsler, der vertikalt adskiller det sekundære grundvandsmagasin og det primære grundvandsmagasin. Der er blevet udført forskellige målinger af den hydrauliske ledningsevne. Disse tal (i m/dag) er angivet på figuren.



FIGUR 30. Øst-vestgående profil/transekt på tværs af strømningsretning i sekundært grundvandsmagasin på Lokalitet 10. Hydraulisk ledningsevne i meter/dag er angivet, hvor det er målt.

3.12.1 Koncentrationsniveauer

Ved undersøgelserne er der blevet påvist høje indhold af PFAS primært 6:2 FTS, PFHxA og PFPeA i grundvandet, mens indhold i jordprøver (MIS-prøver fra 0-0,1 m u.t.) ikke overskrider jordkvalitetskriterierne. Maksimale koncentrationer er opsummeret i TABEL 15.

TABEL 15. Maksimale påviste koncentrationer af PFAS jord og grundvand (sekundært) på Lokalitet 10.

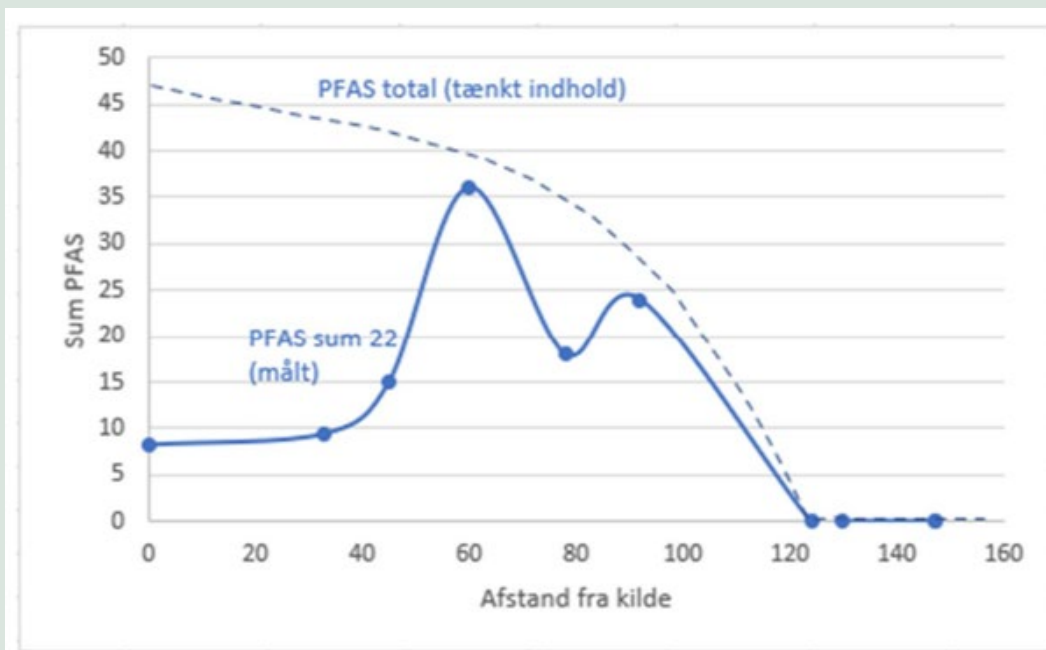
PFAS	Jordprøver (MIS prøver fra overflade 0,0-0,1 m u.t.) - (µg/kg TS)	Grundvand, sekundært (ng/l)
PFBA (Perfluorbutansyre)	i.p.	681
PFBS (Perfluorbutansulfonsyre)	i.p.	2,3
PFPeA (Perfluorpentansyre)	0,922	8.400
PFPeS (Perfluorpentansulfonsyre)	i.p.	0,72
PFHxA (Perfluorhexansyre)	0,643	2.200
PFHxS (Perfluorhexansulfonsyre)	i.p.	11
PFHpA (Perfluorheptansyre)	0,574	600
PFHpS (Perfluorheptansulfonsyre)	i.p.	0,72
PFOA (Perfluoroktansyre)	1,58	500
PFOS (Perfluoroktansulfonsyre)	i.p.	7,5
6:2 FTS (Fluortelomersulfonat)	5,67	29.000
PFOSA (Perfluoroktansulfonamid)	i.p.	2,6
PFNA (Perfluornonansyre)	1,27	34
PFNS (Perfluornonansulfonsyre)	i.p.	i.p.
PFDA (Perfluordekansyre)	i.p.	i.p.
PFDS (Perfluordekanesulfonsyre)	i.p.	i.p.
PFUnDA (Perfluorundekansyre)	0,75	i.p.
PFUnDS (Perfluorundekansulfonsyre)	i.p.	i.p.
PFDoDA (Perfluordodekansyre)	i.p.	i.p.
PFDoDS (Perfluordodekansulfonsyre)	i.p.	2,6
PFTTrDA (Perfluortridekansyre)	i.p.	i.p.
PFTTrDS (Perfluortridekansulfonsyre)	i.p.	i.p.
Sum af 4 PFAS	2,72	1.000
Sum af 22 PFAS	10	36.000
i.p.: ikke påvist		

Prøvetagning af grundvand fra borer i transekt langs strømningsretning viser, at de højeste indhold af PFAS (36.000 ng/l) er påvist i forureningsfane nedstrøms lokaliteten, mens påvist indhold i kildeområde er på et lavere niveau (8.200 - 9.400 ng/l).

3.12.2 Vigtigste resultater

Forureningen vurderes at stamme fra det installerede rumslukningsstem med "moderne" fluo-rotelomer PFAS. Ved undersøgelserne blev det vurderet, at der ikke er påvist væsentligt indhold af PFAS fra eventuel anvendelse af ældre PFAS-skum herunder skum (AFFF) baseret på PFOS. Der er dog heller ingen historiske oplysninger, der understøtter, at der skal være anvendt ældre PFOS holdigt skum. Forurening med PFAS udgøres primært af 6:2 FTS og PFCA'er, som kan være nedbrydningsprodukter af mere komplekse fluorotelomerer (både anioniske, kationiske og zwitterioniske fluorosurfactans).

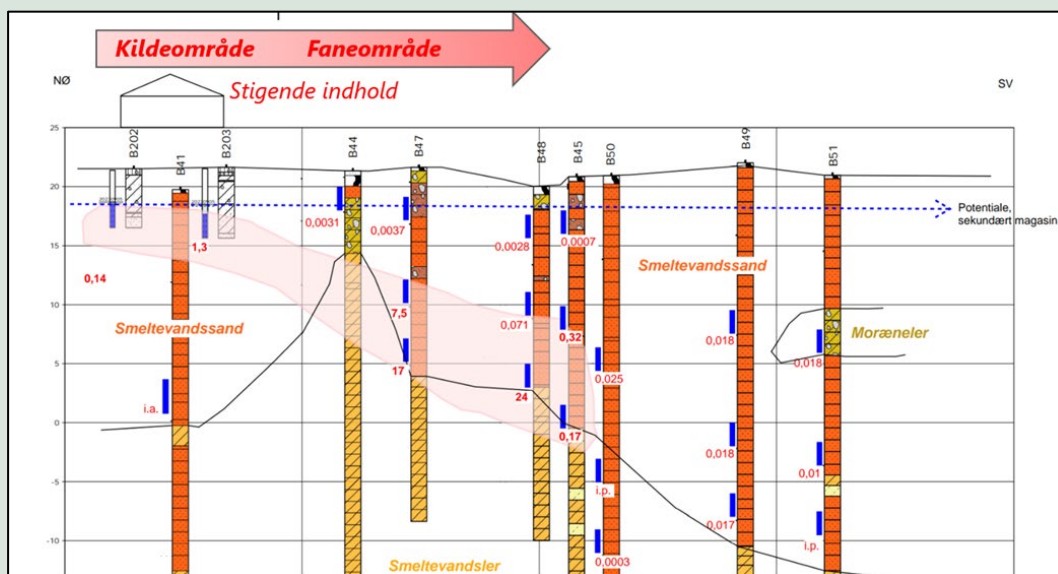
Der er observeret stigende koncentrationer af PFAS i grundvandet nedstrøms kildeområdet. Dette vurderes ikke at skyldes, at forureningsfluxen til grundvandet har peaket pga. udvaskning af kilden, og at fluxen derfor reduceres yderligere i fremtiden. På grund af forureningens relative unge alder vurderes de stigende indhold i grundvandet at være udtryk for, at der sandsynligvis forekommer precursorer i kildeområdet, som ikke er med i de udførte analyser (target analyse for 22 PFAS). Disse precursorer kan fx gradvist nedbrydes til bl.a. 6:2 FTS og PFCA'er i fanen. Denne vurdering er illustreret på FIGUR 31.



FIGUR 31. Målt indhold af PFAS (PFAS 22 i µg/l) i grundvand i transekt langs strømningens retning på lokalitet 10. X-aksen angivet afstand til kilde (i m). Blå optrukket linje er målte indhold af PFAS, mens den stiplede blå linje er et fiktivt indhold af PFAS, der også omfatter indhold af precursorer (som ikke indgår analysepakken af de 22 PFAS).

3.12.3 Udarbejdet lokal specifik konceptuel model

I FIGUR 32 er vist en overordnet konceptuel fortolkning af geologien og forureningen for lokaliteten. Den konceptuelle model er vist for snit (NØ-SV) på langs af strømningens retning. PFAS forurening er udbredt i sekundært grundvandsmagasin primært bestående af smeltevands-sand. Der kan observeres en dykkende forureningsfane i området nedstrøms kildeområde. Der ses stigende indhold af PFAS fra kildeområde og nedstrøms i fanen, hvilket som nævnt vurderes at være omsætning af precursorer.



FIGUR 32. Lokal specifik konceptuel model for lokalitet 10. Geologi samt forureningsudbredelse af PFAS (illustreret for sum af 22 PFAS) for profilsnit NØ-SV på langs af strømningsretning (indhold af PFAS 22 er angivet i µg/l).

3.13 Vigtigste erfaringer fra gennemgangen af de udvalgte lokaliteter

Der er blevet gennemgået en række velundersøgte lokaliteter fra Danmark i et forsøg på udtrække generelle erfaringer vedr. konceptuelle modeller i forskellige danske geologier. De 10 lokaliteter viste sig at være meget forskellige i forhold til geologi, hydrogeologi samt forureningsspredning, og det er derfor ikke muligt at komme med nogle betragtninger, der vil gælde alle PFAS forurenede grunde i Danmark. Det viste sig også, at der ikke er et tilstrækkeligt antal lokaliteter hvor der foreligger undersøgelser i alle relevante medier (jord, porevand, sekundært og primært grundvand) til at udtrække generelle konklusioner for typologierne.

På trods af ovenstående kan der uddrages følgende læringer fra de forskellige projekter:

Jordprøver:

- Generelt påvises der forholdsvis lave koncentrationer af PFAS i jordprøverne, og kun i nogle få tilfælde i koncentrationer der overskrider jordkvalitetskriterierne markant
- De højeste koncentrationer påvises i den øvre del af jordlagene (0-2 m)
- Der kan ses en tydelig chromatografering i sammensætningen, således at visse PFAS (fx PFOS) tilbageholdes i en vis udstrækning i de øvre jordlag, mens andre PFAS er mere mobile, og derfor kan påvises dybere

Grundvand:

- I grundvandet kan der påvises meget høje koncentrationer, som overskrider grundvandskvalitetskriteriet markant. Dette er især gældende i terrænnært grundvand, men der er også påvist PFAS i dybereliggende grundvandsmagasiner
- På flere af lokaliteterne kan der ses lange grundvandsforureningsfaner med PFAS på mere end 200 meter, ligesom at forureningen kan spredes sig markant vertikalt
- Forureningen kan desuden spredes sig sammen med andre forureninger (blandingsforureninger)

- Der ses på de fleste lokaliteter en tydelig ændring i sammensætning i øvre og nedre grundvand, som følger hypotesen om at de kortere forbindelser træffes dybere.
- Der er observeret dykkende faner med PFAS, hvilket er vigtigt at være opmærksom på i forbindelse med forureningsundersøgelser
- Forureninger i grundvandet kan påvirke nærvedliggende overfladevand / recipienter
- Der er påvist nogle meget høje koncentrationer af PFAS i borer, som er filtersat henover grundvandsspejlet. Det er ikke klarlagt, om disse høje koncentrationer skyldes PFAS forbindelserne præference til at være i overgangen mellem vand og luft, eller om det skyldes kildestyrken af forureningen.
- Det kan derfor have betydning, hvor borerne placeres og hvorledes filtersætningen sker, om den er filtersat tæt på vandspejlet eller dybere i magasinet.

Sammenhørende prøver:

- Der er kun få erfaringer med udtagning af sammenhørende prøver (jord, grundvand, porevand) fra den umættede zone, og det vides derfor ikke, hvorvidt eksisterende beregningsværktøjer (fx JAGG) fx kan beregne grundvandskoncentrationer ud fra jordkoncentrationer

Analyser:

- Der er begrænsede erfaringer med brugen af TOP analysen, AOF analyser og bestemmelse af fluorid.
- De få erfaringer kunne tyde på, at AOF og bestemmelsen af fluorid har en begrænset anvendelse pga. deres høje detektionsgrænser, og at de kun kan anvendes ved meget høje koncentrationer i grundvandet. Samtidig vil de ikke kunne give svar på, hvilke PFAS der er tilstede, men kun om der er nogle.
- Der er lidt flere erfaringer med TOP analysen, og generelt er der gode erfaringer med metoden, idet den kan afsløre om der findes et væsentligt indhold af precursorer, som ikke er omfattet af PFAS 22 analysepakken. Der er dog stadig behov for at få flere erfaringer med metodens anvendelighed og robusthed.

Supplerende viden:

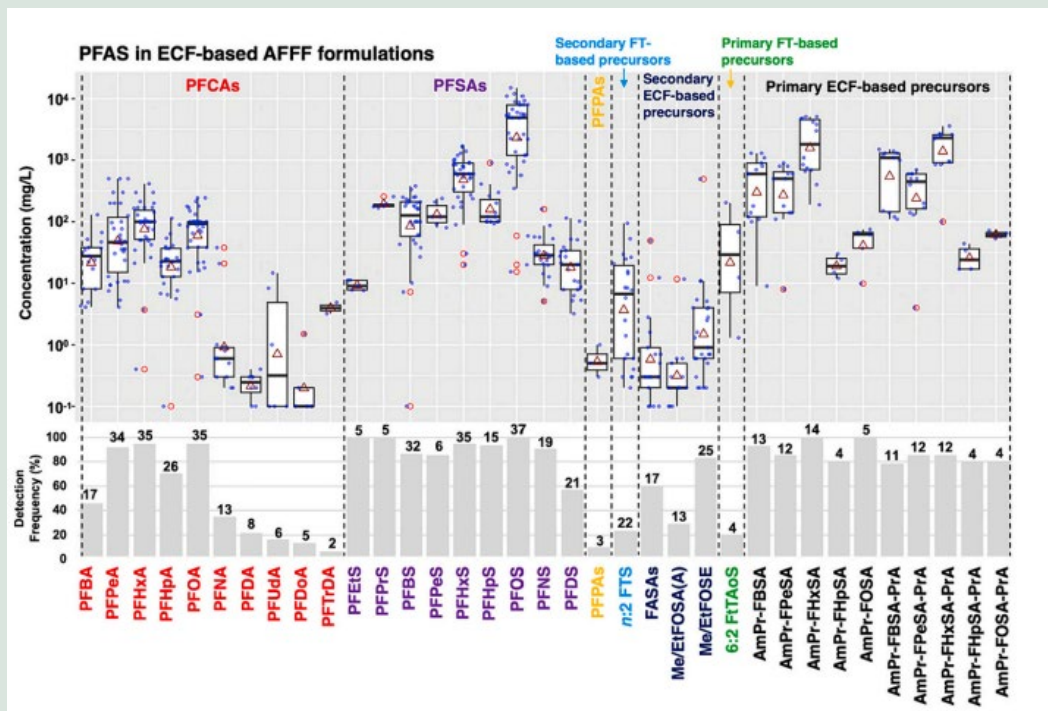
- På de lokaliteter, hvor der påvises et væsentligt indhold af precursorer (fx ved TOP analysen), skal dette indregnes i risikovurderingen, idet omdannelsen af precursorer i grundvandsmagasinet kan betyde forøget koncentrationer nedstrøms forureningskilden. En øgning i koncentrationerne i grundvandet i nedstrøms retning kan derfor ikke nødvendigvis opfattes som et tegn på, at forureningen allerede er blevet udvasket fra kilden, og at det værste derfor er overstået
- Da PFAS typisk er opløst i vandige opløsninger, kan utætte kloakledninger være en medvirkende årsag (og en egentlig kilde) til forekomsten af PFAS i jord og grundvand.

4. Vigtige internationale erfaringer

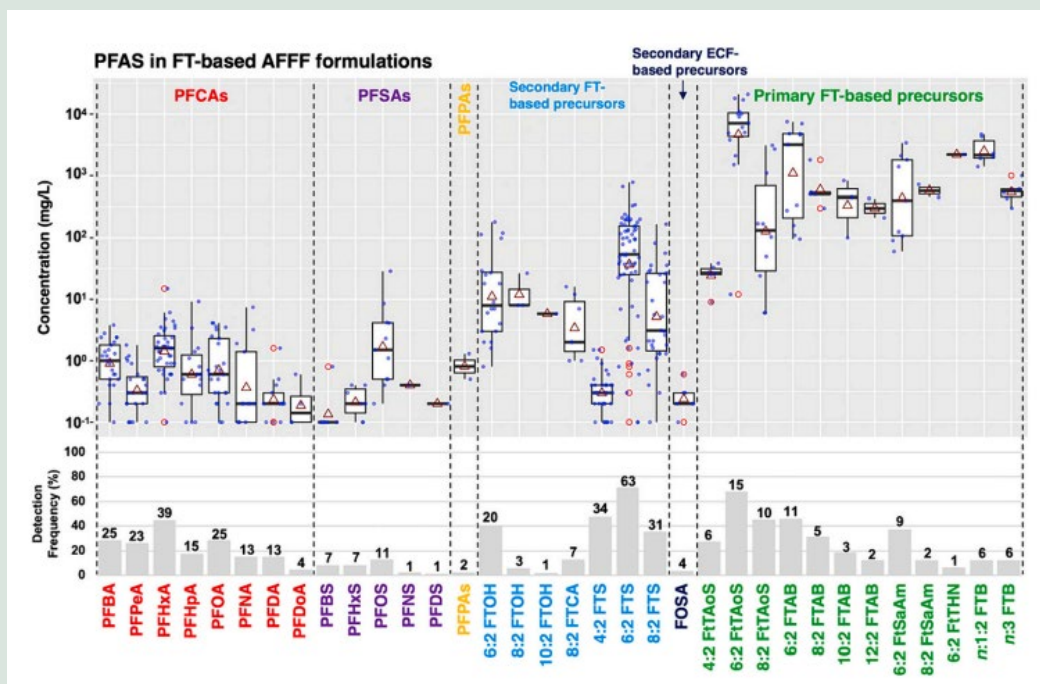
Der er foretaget en gennemgang af nogle få udvalgte artikler i den internationale litteratur med henblik på at se, hvad der er påvist på forskellige grunde forurenet med PFAS med særlig fokus på hvilke PFAS, der påvises i hvilke medier, og hvordan PFAS kan fordele sig vertikalt i jordsøjlen. Det har ikke været formål at lave et tilbundsgående litteraturreview men at beskrive vigtige erfaringer fra udlandet som input til den videre diskussion om konceptuelle modeller. Til sidst i kapitlet er der en katalog over generiske konceptuelle modeller, der dækker over processer og typiske PFAS forureninger.

4.1 Indhold i AFFF brandslukningsskum

I en review artikel fra 2024 (Yan et al., 2024) blev forekomsten af PFAS i AFFF brandslukningsskum beskrevet, både de skumtyper som var baseret på den ældre produktionsmetode af PFAS (ved elektrokemisk fluorering, ECF) samt de skumtyper, hvor PFAS er produceret med den nyere metode, telomerisering baseret på fluorotelomer (FT) (Yan et al., 2024). Resultaterne af disse undersøgelser er gengivet i FIGUR 33 **Error! Reference source not found.** og FIGUR 35 med henblik på at vise, hvad udgangspunktet kan være på en lokalitet, hvor der har været anvendt AFFF brandslukningsskum.



FIGUR 33. Indhold af forskellige PFAS i ECF baseret AFFF brandslukningsskum (øverste del af grafen) samt detektionsfrekvensen (samt antal detektioner) for den enkelte PFAS (nederst). Me-FOSA, EtFOSA samt EtFOSAA er inkluderet i "Me/EtFOSA(A)", mens FBSA, FHxSA, og PFOSA er inkluderet i "FASAs". I "PFPAs" er inkluderet PFOPA og PFDPA. MeFOSE og NEtFOSE er inkluderet i "Me/EtFOSE", mens 4:2 FTS, 6:2 FTS og 8:2 FTS er inkluderet i n:2 FTS. Fra (Yan et al., 2024). Med rød er angivet PFCA (perflourcarboxylsyre) og med lilla PFSA (perfloursulfonesyre), som for størstedelen er medtaget i den sædvanlige PFAS 22 analyse (se afsnit 2.1), de resterende PFAS i figuren er precursorer.



FIGUR 34. Indhold af forskellige PFAS i TF baseret AFFF brandslukningsskum (øverste del af grafen) samt detektionsfrekvens (samt antal detektioner) for den enkelte PFAS (nederst). PFOPA og PFDPa er inkluderet i "PFPA's", mens "n:3 FTB" inkluderer 5:3 FTB, 7:3 FTB, og 9:3 FTB. 5:1:2 FTB, 7:1:2 FTB og 9:1:2 FTB er indeholdt i n:1:2 FTB. Fra (Yan et al., 2024). Med rød er angivet PFCA (perflourcarboxylsyre) og med lilla PFSA (perfloursulfonesyre), som for størstedelen er medtaget i den sædvanlige PFAS 22 analyse (se afsnit 2.1), de resterende PFAS i figuren er precursorer.

Som det fremgår, kan der have været anvendt mange forskellige PFAS i forskellige typer af AFFF skum. Det er værd at bemærke, at der kan være og har været anvendt mange precursorer (markeret med blå, mørkeblå og grøn og sort på FIGUR 33 og blå, sort og grønt på FIGUR 34 precursorer, som der ikke bliver analyseret for i dag i Danmark (afsnit 2.1). Hvilke PFAS/precursor der er anvendt/anvendes afhænger blandt andet af, hvilket firma som producerer den pågældende AFFF, samt hvornår det er produceret. I artiklen angives, at på en konkret lokalitet er der påvist 52,6% precursorer i en ECF baseret AFFF skum, mens det tilsvarende tal er 99,5% for en FT-baseret AFFF skum (Yan et al., 2024).

I en undersøgelse fra 2013 blev anvendelsen af precursorer i AFF skum gennem tiden samt afhængigheden af producenten undersøgt. I TABEL 16 er opsummeret resultaterne. Som det fremgår, var der stor variation i indholdet af precursorer i de forskellige typer af AFFF skum, indtil at producenterne tilsyneladende gik over til anvendelsen af 100% precursorer i løbet af årtusindskiftet.

TABEL 16. Den procentvisse fordeling mellem precursorer, PFSA (perfloursulfonesyre) og PFCA (perflourcarboxylsyre) i forskellige AFFF skum produceret i perioden 1986-2010 af forskellige producenter. Data er fra (Houtz et al., 2013)citeret i (Ackerman Grunfeld et al., 2024).

Formulation and year	Precursors	PFSA	PFCA
	%	%	%
3M 1988	3	93	4
3M 1989	9	85	6

3M 1992	62	36	3
3M 1993	63	34	3
3M 1998	56	41	3
3M 1998	61	35	4
3M 1999	66	33	2
3M 2001	61	36	3
Chemguard 2008	100	0	0
Chemguard 2010	100	0	0
Ansul 1986	100	0	0
Ansul 1987	100	0	0
Ansul 2009	100	0	0
Ansul 2010	100	0	0
Buckeye 2009	100	0	0
National Foam 2005	100	0	0
National Foam 2005	100	0	0
National Foam 2008	100	0	0

Anvendelsen af precursorer i AFFF skum underbygges af et studie, som har undersøgt forekomsten af PFAS i jord og grundvand på en lokalitet i USA, hvor der var anvendt AFFF brandslukningsskum i perioden 1968-1991 (Adamson et al., 2020). På baggrund af de forskellige undersøgelser blev det estimeret, at ca. 50% af PFAS var kendte PFAS, mens den resterende del var precursorer, hvoraf 83% var zwitterioniske eller kationiske precursorer.

Dette bliver understøttet af nogle undersøgelser på fire canadiske lufthavne, hvor der har været anvendt AFFF brandslukningsskum. Der udgjorde de zwitterioniske eller kationiske PFAS precursorer 34,5-85,5% af det totale indhold af PFAS i topjorden (0,15-0,3 m u.t.), mens de kun udgjorde en mindre del i grundvandet (<20%) (Liu et al., 2022).

4.2 Forekomst af PFAS, hvor der har været anvendt AFFF brandslukningsskum

I en nyere review artikel (Yan et al., 2024) er der givet et overblik over forekomsten af tilstedeværelsen af PFAS i jord, grundvand og overfladevand på forskellige lokaliteter rundt omkring i verden. I de efterfølgende tabeller er resultaterne opsummeret.

I TABEL 17 og TABEL 18 er angivet informationer om forskellige PFAS, som påvises i topjorden (0-1,0 m u.t.) samt i jordprøverne generelt (1,0-15,1 m u.t.). TABEL 19 angiver påviste PFAS i grundvandsprøver, mens TABEL 20 angiver påvist PFAS i overfladevandsprøver.

4.2.1 Jordprøver

De højeste detektionsfrekvenser i topjorden (0-1,0 m u.t.) blev påvist af PFOS (90,9%), PFNS (90,0%) og 6:2 FTS (81,3%), men 7:3 FTCA blev påvist i samtlige prøver, hvor der blev analyseret for PFAS'en, dog var antallet forholdsvis lavt (28 prøver) (TABEL 17). De tre førstnævnte PFAS er alle inkluderet i den danske standard analyse for sum af 22 PFAS, hvorimod 7:3 FTCA ikke er. Det er værd at bemærke, at mange af de PFAS, som indgår i den danske standard analyse (afsnit 2.1), påvises i en stor del af analyserne.

TABEL 17. Påvist PFAS i topjord (0-1,0 m u.t.) på forskellige lokaliteter (data er fra (Yan et al., 2024)). Detektionsfrekvens, koncentrationsintervallet for de påviste PFAS, gennemsnits- og mediankoncentration er angivet for den enkelte PFAS, som er påvist. Datasættet er på i alt 274 prøver på lokaliteter, hvor der har været anvendt AFFF. I artiklen er beskrevet, at de ikke har medtaget PFAS, som er påvist i mindre end 5 prøver, eller hvor detektionsfrekvensen er mindre end 10%, hvilket dog ikke er helt korrekt i tabllen angivet i referencen og dermed i nedenstående tabel. Med rødt er angivet de PFAS, som indgår i sum af 22 PFAS.

PFAS	Antal påvist/antal prøver (detektionsfrekvens)	Koncentrationsinterval (µg/kg)	Gennemsnit (µg/kg)	Median (µg/kg)
PFBA	137/213 (64,3%)	0,1-456	18	2,3
PFPeA	143/223 (64,1%)	0,1-1.421	49	5,9
PFHxA	183/268 (68,3%)	0,1-2.761	66	6,0
PFHpA	144/223 (64,6%)	0,1-323	11	2,4
PFOA	206/274 (75,2%)	0,1-11.484	115	4,0
PFNA	125/223 (56,1%)	0-59	6,3	2,2
PFDA	92/223 (41,3%)	0-252	9,7	1,0
PFUnDA	62/162 (38,3%)	0-130	13	0,8
PFDoDA	56/162 (34,6%)	0-155	11	1,3
PFTTrDA	49/160 (30,6%)	0-263	19	0,3
PFTeDA	32/158 (20,3%)	0-82	9,2	0,7
PFPPrS	4/10 (40,0%)	0,2-29	7,5	0,4
PFBS	94/223 (42,2%)	0-1.672	51	1,3
PFPeS	5/10 (50,0%)	0-66	17	0,9
PFHxS	219/268 (81,7%)	0-23.875	288	8,0
PFHpS	60/148 (40,5%)	0-2.494	61	2,5
PFOS	249/274 (90,9%)	0-55.197	1.485	78
PFNS	9/10 (90,0%)	0-8.900	1.041	1,9
PFDS	100/209 (47,8%)	0-5.700	70	1,4
6:2 FTUA	27/105 (25,7%)	0-25	1,4	0,3
8:2 FTUA	30/105 (28,6%)	0-53	2,1	0,1
4:2 FTS	36/132 (27,3%)	0-126	3,8	0,1
6:2 FTS	130/160 (81,3%)	0-6.200	256	40
8:2 FTS	101/148 (68,2%)	0-4.073	156	14
10:2 FTS	3/10 (30,0%)	0,3-0,4	0,3	0,4
5:3 FTCA	29/95 (30,5%)	0,3-16	3,1	1,5
7:3 FTCA	28/28 (100%)	0,2-15	1,6	0,4
FHxSA	18/26 (69,2%)	1,1-1.800	360	12,0
PFOSA	97/148 (65,5%)	0-3.400	110	3,0
FOSAA	10/105 (9,5%)	0-0,8	0,2	0,0
EtFOSA	17/132 (12,9%)	0-0,7	0,1	0,0
6:2 FTAB	81/117 (69,2%)	1,7-631.338	12.975	494
6:2 FtSaAm	19/83 (22,9%)	8-7.074	727	116
AmPr-FHxSA	8/22 (36,4%)	6-12.000	1.754	66
AmPr-FOSA	5/28 (17,9%)	0,5-8,2	3,8	4,6
TAmPr-FHxSA	4/28 (14,3%)	2,1-14.000	46.670	9
TAmPr-FOSA	3/6 (50%)	0,2-0,2	0,2	0,2

De højeste koncentrationer i topjorden (0-1,0 m u.t.) findes af 6:2 FTAB, PFOS, PFHxS, TAmPr-FHxSA, AmPr-FHxSA og PFOA, som alle er påvist i koncentrationer over 10.000 µg/kg. Kun PFOS, PFHxS og PFOA indgår i standard analysepakken i Danmark.

TABEL 18. Påvist PFAS i jord (1,0-15,1 m u.t.) på forskellige lokaliteter (data er fra (Yan et al., 2024)). Detektionsfrekvens, koncentrationsintervallet for de påviste PFAS, gennemsnits- og mediankoncentration er angivet for den enkelte PFAS, som er påvist. Datasættet er på i alt 169 prøver på lokaliteter, hvor der har været anvendt AFFF. I artiklen er beskrevet, at de ikke har medtaget PFAS, som er påvist i mindre end 5 prøver, eller hvor detektionsfrekvensen er mindre end 10%, hvilket dog ikke er helt korrekt i tabllen angivet i referencen og dermed i nedenstående tabel. Med rødt er angivet de PFAS, som indgår i sum af 22 PFAS.

PFAS	Antal påvist/antal prøver (detektionsfrekvens)	Koncentrationsinterval (µg/kg)	Gennemsnit (µg/kg)	Median (µg/kg)
PFBA	45/153 (29,4%)	1,2-52	11	5,0
PFPeA	99/153 (64,7%)	0,1-142	14	7,0
PFHxA	120/153 (78,4%)	0,4-297	31	11
PFHpA	96/153 (62,7%)	0,2-38	6,2	3,0
PFOA	114/169 (67,5%)	0,2-536	43	8,4
PFNA	39/153 (25,5%)	0,1-4,2	1,2	1,0
PFDA	34/153 (22,2%)	0,3-6,0	1,1	0,7
PFUnDA	15/137 (10,9%)	0,0-5,0	0,5	0,1
PFPPrS	26/47 (55,3%)	0,1-16	2,5	1,5
PFBS	100/153 (65,4%)	0,0-1.105	42	5,0
PFPeS	45/47 (95,7%)	0,1-51	6,4	2,8
PFHxS	127/153 (83,0%)	0,7-947	84	25
PFHpS	75/137 (54,7%)	0,1-51	6,0	3,5
PFOS	135/169 (79,9%)	0,0-3.960	231	80
PFNS	29/47 (61,7%)	0,1-14	1,4	0,4
PFDS	25/153 (16,3%)	0,0-52	7,8	2,1
4:2 FTS	15/127 (11,8%)	0,6-5,7	2,4	2,1
6:2 FTS	106/137 (77,4%)	0,4-370	49	26,5
8:2 FTS	61/137 (44,5%)	0,1-198	26	9,6
FHxSA	49/57 (86,0%)	0,6-110	22	16,8
PFOSA	52/137 (38,0%)	0,1-138	17	5,8
MeFOSAA	12/127 (9,4%)	0,1-3,4	1,1	0,5
6:2 FTAB	54/111 (48,6%)	4-11.699	1.847	279,5
6:2 FtSaAm	5/90 (5,6%)	10-243	79,2	41
AmPr-FHxSA	8/31 (25,8%)	0,8-676,7	317,7	353,1
TAmPr-FHxSA	8/21 (38,1%)	0,4-2.192	703,2	636,9

Dybere i jorden er koncentrationsniveauerne generelt lavere (TABEL 18) end i topjorden (0-1,0 m u.t., TABEL 17), selvom median værdien for de kortkædet PFCA og PFSA ligger over de tilsvarende for topjorden.

PFPeS, PFHxS og FHxSA påvises alle i over 80% af prøverne. Sammenlignet med data offentliggjort hos ITRC (ITRC, 2023b) ligger de afrapporterede data i samme niveau.

4.2.2 Grundvandsprøver

I nedenstående tabel er opsummeret resultaterne for 383 vandprøver, som er medtaget i data-håndteringen i (Yan et al., 2024).

TABEL 19. Påvist PFAS i grundvand på forskellige lokaliteter (data er fra (Yan et al., 2024)). Detektionsfrekvens, koncentrationsintervallet for de påviste PFAS, gennemsnits- og median-koncentration er angivet for den enkelte PFAS, som er påvist. Datasættet er på i alt 383 prøver på lokaliteter, hvor der har været anvendt AFFF. I artiklen er beskrevet, at de ikke har medtaget PFAS, som er påvist i mindre end 5 prøver, eller hvor detektionsfrekvensen er mindre end 10%, hvilket for sidstnævnte dog ikke er helt korrekt i nedenstående tabel. Med rødt er angivet de PFAS, som indgår i sum af 22 PFAS.

PFAS	Antal påvist/antal prøver (detektionsfrekvens)	Koncentrationsinterval (ng/l)	Gennemsnit (ng/l)	Median (ng/l)
PFPPrA	3/9 (33.3%)	400-18.000	10.467	13.000
PFBA	160/309 (51.8%)	0,8-87.000	8.009	656
PFPeA	194/312 (62.2%)	0,1-300.000	15.802	517
PFHxA	245/346 (70.8%)	0,1-480.000	27.772	440
PFHpA	213/320 (66.6%)	0,1-149.000	5.679	205
PFOA	243/346 (70.2%)	0,1-6.570.000	76.867	568
PFNA	121/312 (38.8%)	0,1-66.700	1.505	110
PFDA	60/312 (19.2%)	0,2-143.040	2.817	18
PFUnDA	49/266 (18.4%)	3-534	40	17
PFDoDA	17/245 (6.9%)	0,5-36	13	14
PFEtS	8/11 (72.7%)	11-7.500	1.716	375
PFPPrS	32/37 (86.5%)	19-176.000	25.919	10.800
PFBS	199/331 (60.1%)	0,4-210.000	16.634	430
PFPeS	42/45 (93.3%)	49-220.000	31.893	7.200
PFHxS	290/357 (81.2%)	0,1-1.300.000	55.777	1.062
PFHpS	88/134 (65.7%)	0,3-32.000	4.312	1.550
PFOS	289/357 (81.0%)	0,1-4.600.000	70.265	2.048
PFNS	24/49 (49.0%)	7-20.000	2.966	445
PFDS	40/301 (13.3%)	1,2-1.700	53	9,0
4:2 FTS	28/115 (24.3%)	5,2-12.000	3.196	835
6:2 FTS	187/328 (57.0%)	0,2-14.600.000	183.787	2.700
8:2 FTS	105/325 (32.3%)	0,1-98.000	3.649	628
FHxSA	62/88 (70.5%)	28-1.520.000	98.439	11.000
PFOSA	37/251 (14.7%)	1-22.000	2.442	119
6:2 FTAB	10/79 (12.7%)	45-91.000	10.216	291
AmPr-FBSA	7/45 (15.6%)	2,8-720	195,4	26
AmPr-FPeSA	8/45 (17.8%)	2,8-190	44,9	8,3
AmPr-FHxSA	7/45 (15.6%)	5,7-260	88,8	36
AmPr-FBSA-PrA	5/45 (11.1%)	4,1-660	170	8,0
AmPr-FPeSA-PrA	5/45 (11.1%)	2,7-610	156,6	6,9
AmPr-FHxSA-PrA	5/45 (11.1%)	2,7-590	129,7	10

Der påvises nogle meget høje koncentrationer af PFAS i grundvandet (TABEL 19) i forhold til de danske grundvandskvalitetskriterier på 2 ng/l (sum af 4 PFAS) og 100 ng/l (sum af 22

PFAS). 6:2 FTS, PFOA, PFOS, FHxSA (Perfluorohexanesulfonamide) og PFHxS er alle påvist i koncentrationer over 1.000.000 ng/l. Det er også værd at bemærke, at mange af PFAS påvises i over halvdelen af prøverne, men også at detektionsfrekvensen generelt falder med stigende molekyl størrelse, hvilke er meget lige de danske erfaringer, hvor stoffer større end PFUnDA stort set aldrig påvises i grundvandsprøver

Af de PFAS, som ikke er med i standardanalysen, er det især de ultrakorte PFAS samt FHxSA, som påvises i flere grundvandsprøver.

Forekomsten af mange forskellige PFAS i vandprøver understøttes af en nyere undersøgelse, hvor data fra over 12.000 overfladevandprøver og 33.900 grundvandsprøver fra hele verden var indsamlet og databehandlet (Ackerman Grunfeld et al., 2024). Der blev samlet set identificeret navne på over 200 forskellige PFAS (Ackerman Grunfeld et al., 2024), hvoraf de fleste i TABEL 19 er genfundet i oversigten. De resterende (AMPr-xx i TABEL 19) kan ikke umiddelbart genfindes, hvilket sandsynligvis skyldes en anden navngivning.

I England er der fokus på 47 forskellige PFAS i drikkevand (DWI, 2021), hvoraf de 30 PFAS i TABEL 1 er med i deres analysepakke. Dertil kommer altså 17 andre PFAS. Der er ikke kendskab til, i hvilket omfang de supplerende 17 PFAS bliver påvist.

Den amerikanske miljøstyrelse, US EPA, har udviklet en analysemetode nr. 1633 til analyse i blandt andet vandige opløsninger (USEPA, 2021). I denne metode bestemmes 71 forskellige PFAS, hvoraf de 20 af de 22 PFAS er med. Kun de tungere PFUnDS og PFTrDS er ikke med.

4.2.3 Overfladevandprøver

TABEL 20. Påvist PFAS i overfladevand på forskellige lokaliteter (data er fra (Yan et al., 2024)). Detektionsfrekvens, koncentrationsintervallet for de påviste PFAS, gennemsnits- og mediankoncentration er angivet for den enkelte PFAS, som er påvist. Datasættet er på i alt 204 prøver på lokaliteter, hvor der har været anvendt AFFF. I artiklen er beskrevet, at de ikke har medtaget PFAS, som er påvist i mindre end 5 prøver, eller hvor detektionsfrekvensen er mindre end 10%, hvilket for sidstnævnte dog ikke er helt korrekt i nedenstående tabel. Med rødt er angivet de PFAS, som indgår i sum af 22 PFAS.

PFAS	Antal påvist/antal prøver (detektionsfrekvens)	Koncentrationsinterval (ng/l)	Gennemsnit (ng/l)	Median (ng/l)
PFBA	60/99 (60,6%)	0,5-899	175	24
PFPeA	79/109 (72,5%)	0,2-4.120	393	19
PFHxA	91/123 (74,0%)	0,2-6.500	626	22
PFHpA	110/136 (80,9%)	0,3-1.340	122	10
PFOA	180/204 (88,2%)	0,3-11.300	446	32
PFNA	98/136 (72,1%)	0,2-3.290	109	4,4
PFDA	56/136 (41,2%)	0,2-130	15	5,6
PFUnDA	28/131 (21,4%)	0,3-547	56	6,0
PFBS	73/109 (67,0%)	0,1-3.500	394	13
PFHxS	150/204 (73,5%)	0,1-134.000	3.726	46
PFHpS	42/88 (47,7%)	0,3-3.200	567	61
PFOS	172/204 (84,3%)	0,4-2.210.000	36.393	140
PFDS	5/125 (4%)	0,7-8,0	3,7	3,6
4:2 FTS	7/88 (8,0%)	0,7-15,9	6,6	5,0
6:2 FTS	57/94 (60,6%)	0,1-10.200	810	28
8:2 FTS	23/88 (26,1%)	0,2-249	45	22

PFOSA	43/125 (34,4%)	0,1-139	9,3	1,8
6:2 FTAB	11/16 (68,8%)	59-17.874	2.189	426

I overfladevandprøverne (TABEL 20) er det især PFOA, PFOS og PFHpA, som generelt påvises i de fleste prøver (>80%). Den eneste PFAS, der har en høj detektionsfrekvens (dog med et lavt antal), og som ikke er med i den danske standardanalyse er 6:2 FTAB.

Det er værd at bemærke, at de prøver, hvor PFOS påvises, er koncentrationerne over de danske miljøkvalitetskrav (0,13 ng/l for havvand, 0,65 ng/l for ferskvand, angivet som årsgennemsnit).

4.2.4 Sammenstilling af data på tværs af medier

I TABEL 21 er opsummeret detektionsfrekvenserne af de enkelte PFAS i de forskellige prøver angivet i TABEL 17 - TABEL 20 (Yan et al., 2024).

TABEL 21. Detektionsfrekvens af PFAS i forskellige typer af prøver. Opsummeret fra TABEL 17 til TABEL 20, og angivet i faldende detektionsfrekvens baseret på værdierne for topjord (0-1,0 m u.t.). Data fra (Yan et al., 2024). i.a.: ikke angivet i (Yan et al., 2024). Med rødt er angivet de PFAS, som indgår i sum af 22 PFAS.

PFAS	Top-jord	Andre jordprøver	Grundvandsprøver	Overfladevandsprøver
7:3 FTCA	100%	i.a.	i.a.	i.a.
PFOS	91%	80%	81%	84%
PFNS	90%	62%	49%	i.a.
PFHxS	82%	83%	81%	74%
6:2 FTS	81%	77%	57%	61%
PFOA	75%	68%	70%	88%
FHxSA	69%	86%	71%	i.a.
6:2 FTAB	69%	49%	13%	69%
PFHxA	68%	78%	71%	74%
8:2 FTS	68%	45%	32%	26%
PFOSA	66%	38%	15%	34%
PFHpA	65%	63%	67%	81%
PFBA	64%	29%	52%	61%
PFPeA	64%	65%	62%	73%
PFNA	56%	26%	39%	72%
PFPeS	50%	96%	93%	i.a.
TAmPr-FOSA	50%	i.a.	i.a.	i.a.
PFDS	48%	16%	13%	4%
PFBS	42%	65%	60%	67%
PFDA	41%	22%	19%	41%
PFHpS	41%	55%	66%	48%
PFPrS	40%	55%	87%	i.a.
PFUnDA	38%	11%	18%	21%
AmPr-FHxSA	36%	26%	16%	i.a.
PFDoDA	35%	i.a.	7%	i.a.
PFTTrDA	31%	i.a.	i.a.	i.a.
5:3 acid	31%	i.a.	i.a.	i.a.
10:2 FTS	30%	i.a.	i.a.	i.a.
8:2 FTUA	29%	i.a.	i.a.	i.a.
4:2 FTS	27%	12%	24%	8%
6:2 FTUA	26%	i.a.	i.a.	i.a.
6:2 FtSaAm	23%	6%	i.a.	i.a.

PFTeDA	20%	i.a.	i.a.	i.a.
AmPr-FOSA	18%	i.a.	i.a.	i.a.
TAmPr-FHxSA	14%	38%	i.a.	i.a.
EtFOSA	13%	i.a.	i.a.	i.a.
FOSAA	10%	i.a.	i.a.	i.a.
PFPrA	i.a.	i.a.	33%	i.a.
PFETs	i.a.	i.a.	73%	i.a.
MeFOSAA	i.a.	9%	i.a.	i.a.
AmPr-FBSA	i.a.	i.a.	16%	i.a.
AmPr-FPeSA	i.a.	i.a.	18%	i.a.
AmPr-FBSA-PrA	i.a.	i.a.	11%	i.a.
AmPr-FPeSA-PrA	i.a.	i.a.	11%	i.a.
AmPr-FHxSA-PrA	i.a.	i.a.	11%	i.a.

Som det fremgår af TABEL 21, er der en rimelig sammenhæng mellem, hvad der påvises / hvad der er analyseret for i de forskellige medier, og den danske standard analysepakke for 22 PFAS dækker rimeligt, hvad der er påvist i de forskellige medier, dog er der flere precursorer (herunder -sulfonamider samt de sekundære precursorer så som fx 7:3 FTCA, som kan stamme fra nedbrydning af nogle andre precursorer) og kortkædede PFAS, som man kunne overveje at tage med.

4.3 Forslag til analyseprogram - fra Canada

I en artikel, hvor fire canadiske lokaliteter ved lufthavne blev undersøgt, udarbejdede forfatterne en liste over, hvad de mener, der bør indgå i et analyseprogram (Liu et al., 2022).

I TABEL 22 er vist deres forslag til prioriteringsliste af PFAS i forhold til jord- og grundvandsprøver.

TABEL 22. Prioriteringsliste over PFAS til analyseprogram, for jord- og grundvandsprøver (Liu et al., 2022).

Jordprøver		Grundvandsprøver	
No.	PFAS Analyte	No.	PFAS Analyte
1	PFOS	1	6:2 FTSA
2	7:1:2 FTB	2	FBSA
3	8:2 FTSA	3	FHxSA
4	6:2 FTAB	4	PFOS
5	5:1:2 FTB	5	FPeSA
6	6:2 FTSA	6	6:2 FTSAS-SO
7	6:2 demethyl-FTA	7	PFHxS
8	N-TAmP-FHxSA	8	FPrSA
9	6:2 FTSHA-SO	9	6:2 FTSAS-SO ₂
10	N-HOEAmP-FHxSA	10	PFHxA
11	PFHxS	11	PFPeA
12	7:3 FTB	12	MeFBSAA
13	5:3 FTB	13	PFOA
14	9:1:2 FTB	14	PFBA
15	N-CMAmP-FBSAP	15	PFHpA
16	FHxSA	16	8:2 FTSA
17	11:1:2 FTB	17	N-CMAmP-FHxSA
18	PFPHpS	18	N-SPAmP-FHxSA
19	PFHxA	19	8:2 FTSAS-SO ₂
20	10:2 FTSA	20	4:2 FTA
21	6:2 FTA	21	PFPeS
22	AmPr-FHxSA	22	N-TamP-N-MeFBSA
23	8:2 FTSo ₂ PA	23	AmPr-FHxSAP
24	PFNS	24	N-SP-FHxSA
25	N-CMAmP-FHxSA	25	PFHpS

Hvis man ser på forslaget til analyse for jordprøver indgår 6 af PFAS i det danske analysepakke, PFOS (nr. 1 på listen), 6:2 FTSA (6:2 FTS, 6), PFHxS (11), PFHpS (18), PFHxA (19) og PFNS (24), mens de resterende 19 ikke gør. Sammenlignet med hvad der er påvist i jorden i den anden undersøgelse (TABEL 17 og TABEL 18, (Yan et al., 2024)) er det, udover de nævnte PFAS, også 10:2 FTSA og Am-Pr-FHxSA som er med i begge lister. Der tages dog forbehold for, at navngivningen af de forskellige PFAS kan være forskelligt i de forskellige litteraturkilder.

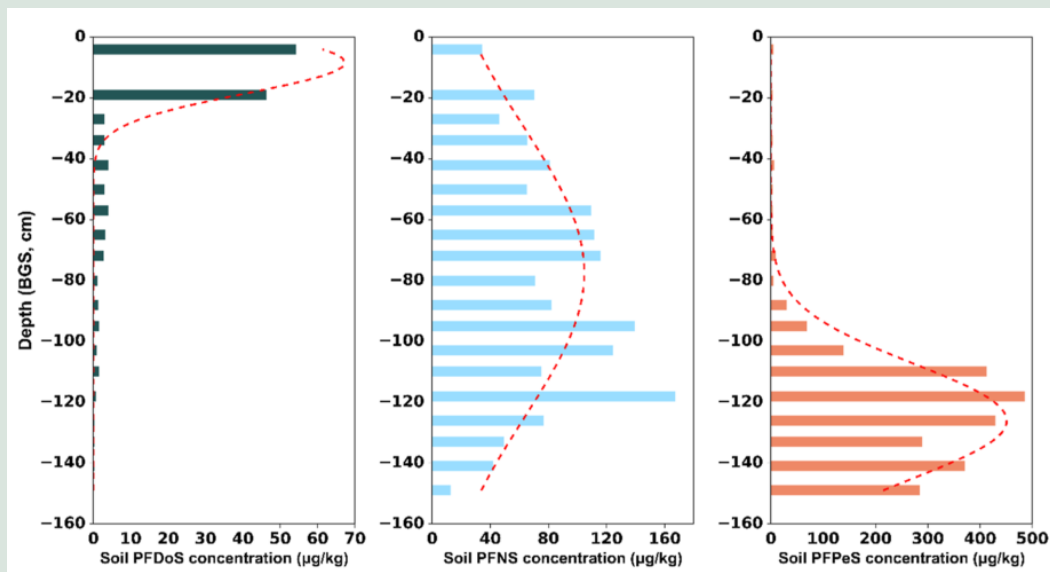
For grundvandsprøverne indgår 10 af de danske PFAS i TABEL 22 (nr. 1, 3, 4, 7, 10, 11, 13, 14, 21 og 25). Sammenlignet med hvad der er påvist i den anden undersøgelse i grundvandet (TABEL 19, (Yan et al., 2024)), er det kun 8:2 FTSA som indgår i begge oversigter (udover de 10 ovennævnte PFAS).

Ved sammenligning af de to artikler er det tydeligt, at det kan være meget svært at opstille et konkret analyseprogram, som skal være generelt dækkende for alle lokaliteter forurenede med PFAS, blandt andet fordi de forskellige AFFF skumtyper kan indeholde mange forskellige PFAS, og at de forskellige industrier anvender mange forskellige PFAS. Det er dog tydeligt ud fra de internationale erfaringer, at PFAS 22 pakken sandsynligvis med stor fordel kunne udvides til at dække flere PFAS. Det er især precursorer, der også træffes i grundvandsprøver, som kunne medtages. Dette er uddybet i afsnit 5.2.

4.4 Eksempel på vertikal fordeling af PFAS under en brandøvelsesplads.

Et amerikansk studie (Bigler et al., 2024) har udtaget kerneprøver på en brandøvelseslokalitet i Arizona, hvor der er udført øvelser hver måned i perioden 1968-1972. Geologien på lokaliteten er karakteriseret ved sand med silt og ler indslag. Nedbøren er på ca. 270 mm/år, hvoraf kun en del infiltrerer til jorden, grundet fordampning på grund af de høje temperaturer. Fordeling af tre PFAS (PFDoS med 12 C-F, PFNS med 9 C-F og PFPeS med 5 C-F) i jordprøverne illustrerer meget klart den chromatografering, der kan ske i den umættede zone, hvor de tunge PFAS bliver tilbageholdt i den øvre del af jorden, mens de mere kortkædede PFAS spredes dybere.

Dette understøtter nogle af de erfaringer, der også er gjort på danske projekter.



FIGUR 35. Koncentrationsprofiler af PFDoS, PFNS og PFPeS i den umættede zone (Bigler et al., 2024).

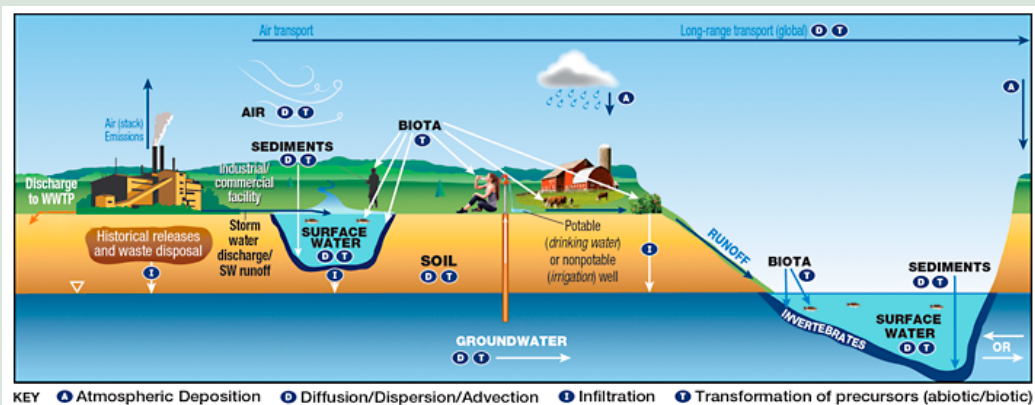
4.5 Katalog over konceptuelle modeller

I afsnit 1.1 er der i forbindelse med introduktionen til PFAS vist en generel konceptuel model til forståelse for forekomsten og spredningen af PFAS i miljøet.

I forbindelse med den overordnede litteraturgennemgang er der indsamlet forskellige supplerende konceptuelle modeller, som illustrerer spredning af PFAS samt processer i forbindelse hermed i miljøet. De er opsamlet i dette afsnit.

4.5.1 Konceptuel model over PFAS kilder, sprednings- og eksponeringsveje

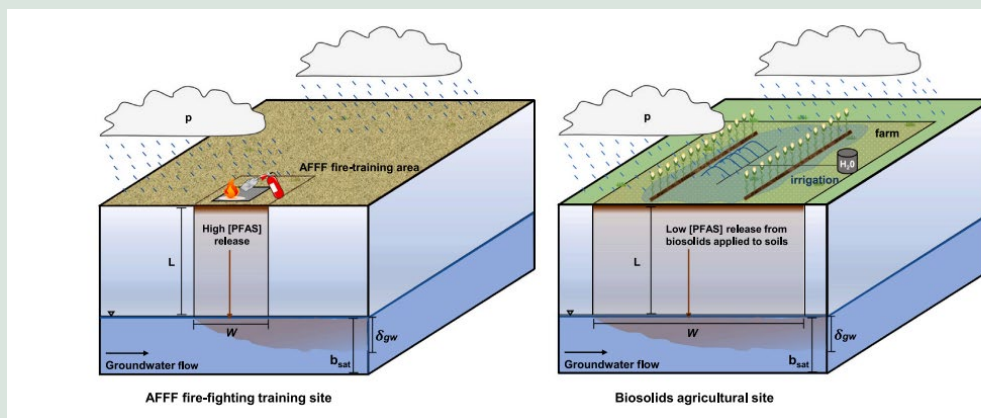
ITRC har lavet en konceptuel model, hvor flere kilder og sprednings- og eksponeringsveje over for mennesker og miljø er medtaget (ITRC, 2023a). Af figuren (som medtager nogle af de samme kilder som FIGUR 1) fremgår andre kilder til PFAS forurening af jord og grundvand end anvendelse af AFFF brandslukningsskum på en øvelsesplads.



FIGUR 36. Konceptuel model for spredning- og eksponeringsveje. Fra ITRC (ITRC, 2023a)).

FIGUR 37 viser en generisk konceptuel model, der illustrerer forskelle mellem en punktkilde forurening og en fladekilde forurening med PFAS, eksempelvis som resultat af udbringning af PFAS forurenat slam. De væsentlige forskelle er:

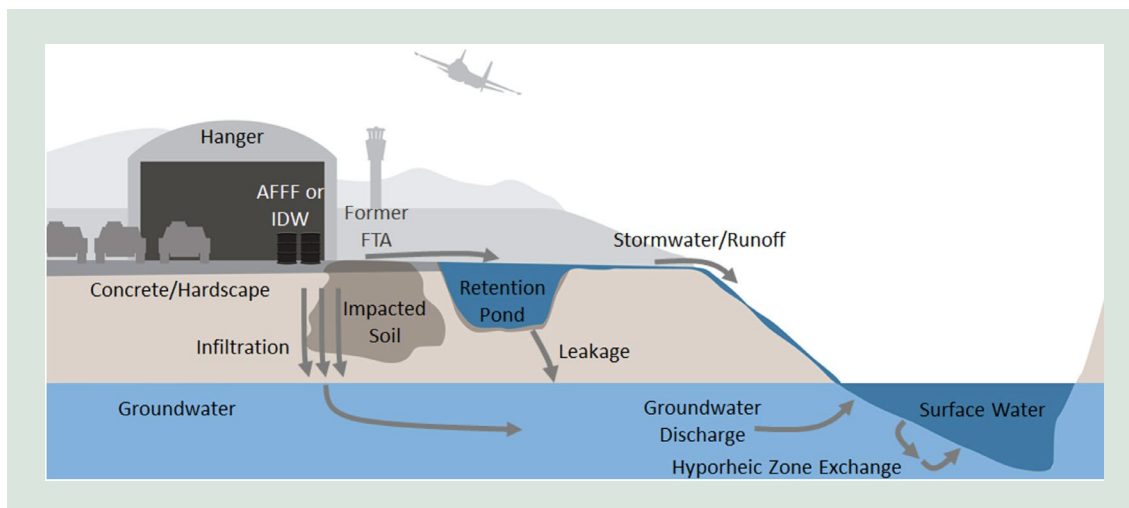
- Infiltration, som ofte er mindre på industrielle lokaliteter pga. belægning og kloakering.
- PFAS koncentration, som typisk er højere ved industrielle/brandsluknings udslip,
- Forureningsfanens bredde, som er meget mindre på industrielle lokaliteter.



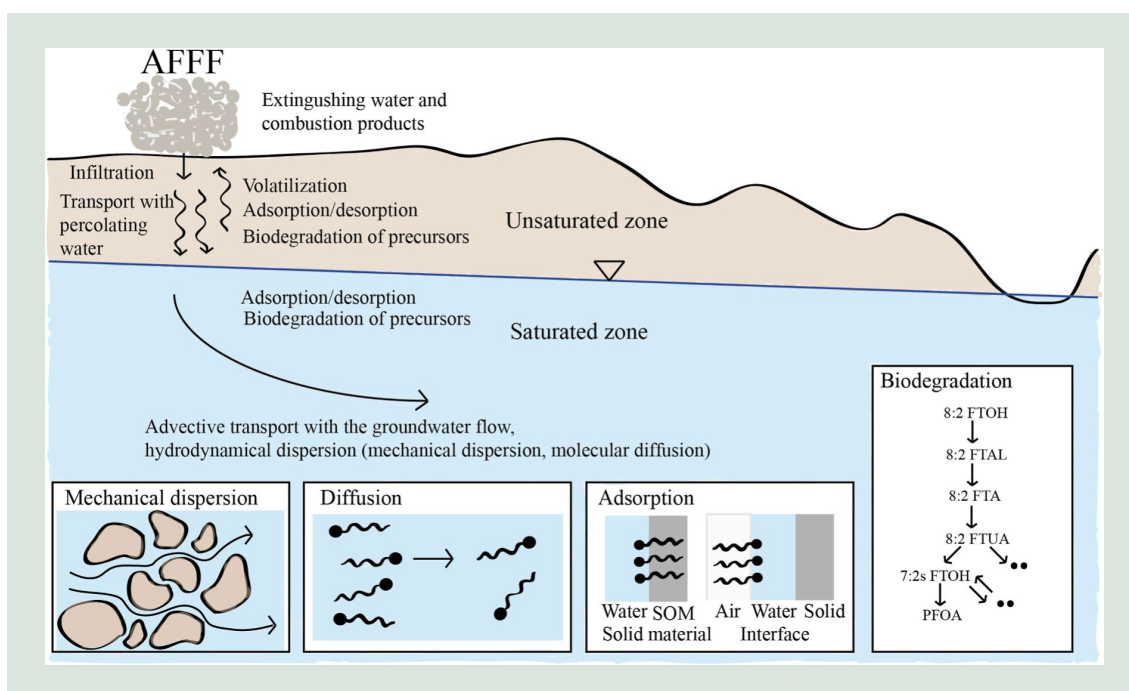
FIGUR 37. Forskel i forureningsaftryk fra punkt vs. Fladekilder (fra (Smith et al., 2024a)).

4.5.2 Konceptuel model for brandøvelsespladser/lufthavne

I nedenstående FIGUR 38 vises en generisk konceptuel model af PFAS forurening ved brandøvelsespladser knyttet til lufthavne. Der vil typisk være et kraftigt hotspot i jorden, hvorfra forurening kan sive ned til det underliggende grundvand. I visse tilfælde vil vandet, som anvendes i forbindelse med øvelserne, blive ledt til nogle bassiner, hvorfra der vil være risiko for, at vandet kan sive ned i jorden. Derudover kan der ske en afstrømning til nærliggende overfladevand, enten ved overflade afstrømning, igennem kloak eller via det terrænnære grundvand. Det er ligeledes vigtigt at understrege, at de påvirkede overflader og installationer, såsom beton/ asfalt belægninger på brandøvelsespladser kan udgøre langvarige kilder til PFAS udvaskning, da PFAS typisk vil sorbere til disse overflader, og langsomt desorbere igen.



FIGUR 38. Konceptuel model af PFAS forurening og spredningsveje ved en brandøvelsesplads (fra (Divine et al., 2023)).

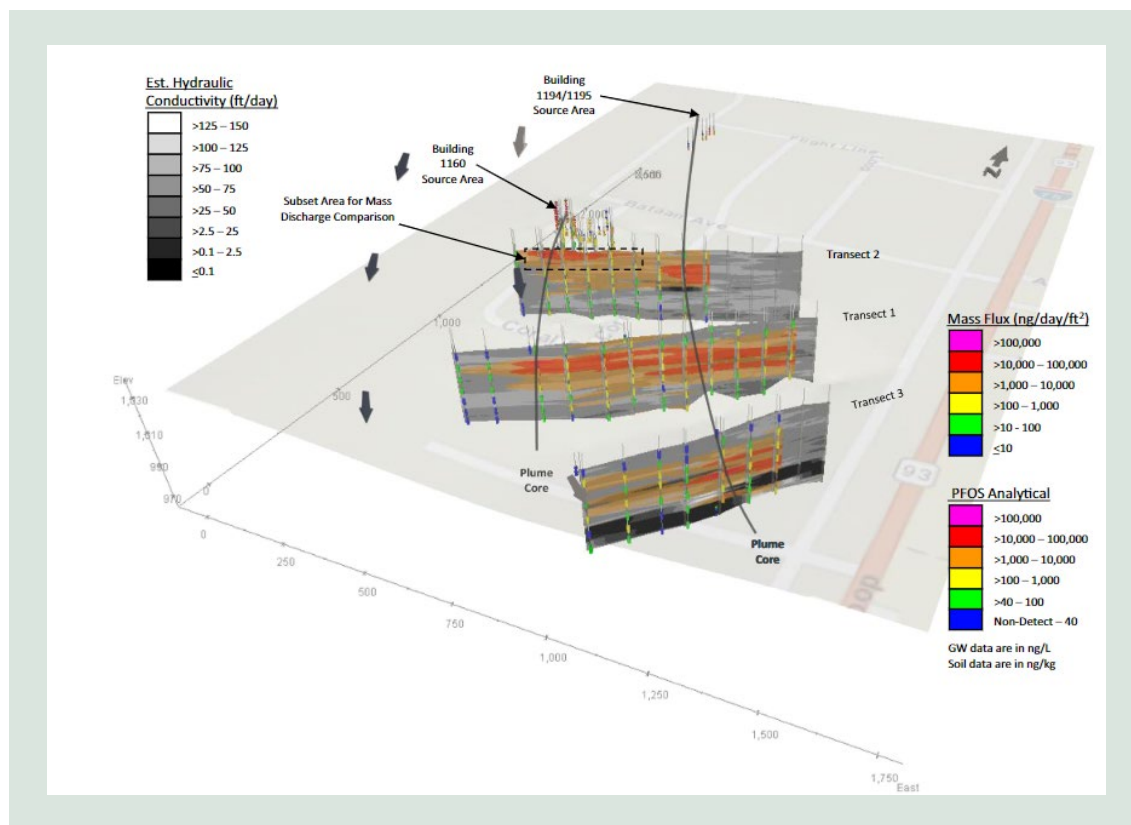


FIGUR 39. Processer, der kan være medvirkende til at styre spredningen af PFAS i jord og grundvand på brandøvelsespladser (fra (Rasmusson & Fagerlund, 2024a)).

FIGUR 39 illustrerer de vigtigste processer, der styrer PFAS spredning og tilbageholdelse af PFAS i jord og grundvand. Figuren tager udgangspunkt i en forurening med brandsluknings-skum men vil også være gældende for andre typer kilder. Som det fremgår, er der en del processer, som er de samme som for andre forureningskomponenter, men tilbageholdelsen i den umættede zone pga. luft-vand overfladen er meget specifikt for PFAS.

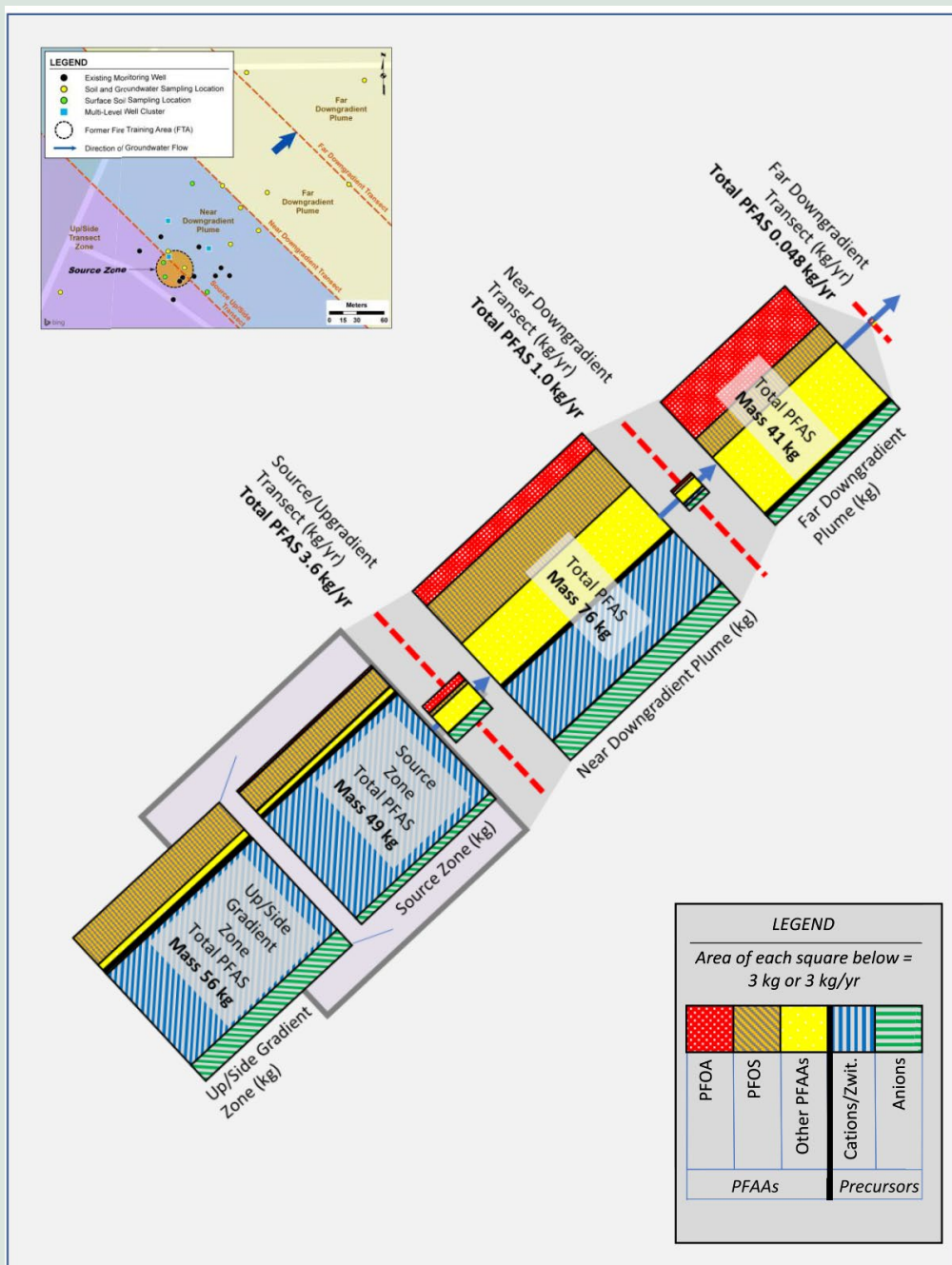
4.5.3 Konceptuelle modeller over forureningsfaner

Når PFAS har spredt sig til grundvandet, vil der typisk ske en horisontal og vertikal spredning, som hovedsageligt er styret af de hydrogeologiske forhold men også indhold af fx organisk indhold i sedimentet. Til illustration af dette er der på FIGUR 40 vist, hvordan massestrømmen af PFAS ændrer sig med afstand fra kildeområdet, samt hvordan hovedparten af massen flytter sig i de mest permeable zoner.



FIGUR 40. Konceptuel model, der visualiserer flux af PFAS (mest PFOS) nedstrøms kildeområdet på en foruren lokalitet i USA (fra (Quinnan et al., 2021)).

FIGUR 41 viser en alternativ illustration af den konceptuelle forståelse for en forureningsfane, hvor der skelnes mellem forskellige kategorier af PFAS (to typer af precursorer), PFOS, PFOA og de øvrige PFAS. Ved at bruge en kategorisering af PFAS, kan man få overblik over massefordeling af de enkelte grupper i forskellige zoner, og dermed klarhed omkring, hvor evt. indsats for at mindske risiko skal ske. For eksempel viser FIGUR 41 tydeligt, at den samlede PFAS masse er nogenlunde jævn fordelt over hele det forurenede område (kilde området og den yderste del af fanen), dog er det precursorer der dominerer kilden, mens PFOA og PFAA dominerer den yderste del af grundvandforureningsfanen.



FIGUR 41. Eksempel på en konceptuel forståelse af spredningen af PFAS i grundvandet, hvor størstedelen af PFAS i kildeområdet udgøres af precursorer, mens når man kommer længere væk fra kildeområdet, bliver det mere de ikke nedbrydelige PFAS, der dominerer (herunder de PFSA som bliver dannet ved nedbrydningen af precursorerne), fra (Adamson et al., 2020).

5. Nuværende konceptuel forståelse og identifikation af videnshuller

I dette kapitel opsummeres de vigtigste punkter fra resultaterne af de danske undersøgelser og den gennemgåede litteratur sammen med en diskussion af de mest centrale videnshuller.

5.1 Forekomst af PFAS i forskellige brancher påviste stoffer

På nuværende tidspunkt er der opgjort i 2023 i Danmark undersøgt 1.451 forurenede grunde for PFAS af regionerne. Regionerne har tidligere antaget, at der kan være op til 15.000 lokaliteter, hvor der har været anvendt PFAS.

Regionerne har tidligere oplyst, at der påvises PFAS på mellem 66-100% af lokaliteterne for de enkelte brancher med en gennemsnitlig hitrate på 93% (Jensen et al., 2024).

Lokalisering af kilder til PFAS forurening kan til tider være vanskelig, da grundejerne ikke ved, om de har anvendt PFAS og i givet fald hvorhenne. Typiske kilder på virksomheder er brandøvelsespladser, forkromningskar og kemikalieoplag. I forbindelse med undersøgelser skal der rettes særlig opmærksomhed til dræn og kloakker, som kan fungere som spredningsveje og ved utætheder i dem danne kildeområder langt fra selve PFAS-aktiviteten. Dette er set på nogle af de gennemgået lokaliteter, hvor kloakken har haft en stor betydning for forureningens udbredelse.

Erfaringerne fra Regionernes data har desuden bekræftet, at de mest forurenede brancher er de brancher, der har været udpeget af tidligere projekter. Der er dog en bias i datasættet, idet de brancher, som blev identificeret i 2016, er nogle af de brancher, som også er mest undersøgt. Med udgangspunkt i regionernes undersøgelser ser det ud til, at de højeste fund er påvist i de brancher, hvor der i forvejen var mistanke om kraftige forureninger med PFAS, dvs. brancherne Brandvæsen og redningskorps, Lufthavne mv., Lossepladser, Overfladebehandling af metal, Forsvar, Elektronikfremstilling samt Møbelindustri. I disse brancher er der alle påvist koncentrationer i grundvandet på over 60.000 ng/l for sum af 22 PFAS. For de fleste PFAS kan ses en detektionsfrekvens på over 20% uanset brancher. PFOA og PFBA påvises i over 40% af prøverne uanset branche. Det skal bemærkes, at nogle brancher som eksempelvis Forsvaret, raffinaderier, og lufthavne kan være underrepræsenteret i det gennemgåede datasæt, men stadig relevant at undersøge for PFAS i brandslukningsskum.

Enkelte PFAS påvises meget sjældent i grundvandsprøverne. Der er tale om de langkædede PFAS såsom PFDOSA, PFDODS, PFDS, PFTrDS, PFUnDA og PFUnDS. Derudover, har man i regionernes undersøgelser undersøgt for flere stoffer i få prøver. Her var det PFTeDA, 4:2 FTS, og FOSAA, som blev hyppigst påvist, men det er kun i 4% af prøverne.

Der er et meget mindre datagrundlag for jordprøver, idet kun 12% af lokaliteterne er undersøgt med jordprøver. Den vigtigste erfaring fra Regionernes datasæt er, at der generelt ikke er påvist indhold af nogle enkelte PFAS over 1 µg/kg TS i dybder større end 5 m u.t.

5.1.1 Der mangler viden om precursorer

Blandt regionernes undersøgelser er der få brandøvelsespladser, idet hovedparten af disse i Danmark er undersøgt af andre aktører (Forsvaret eller Lufthavne). På grund af dette, og fordi

der ligger et større datagrundlag i udlandet er der inddraget erfaringer fra resten af verden vedr. forekomst af PFAS på brandøvelsespladser. Der anvendes og kan være anvendt mange forskellige PFAS i de forskellige brandslukningsskum typer. Andel af precursorer kan være helt op til 100%. Undersøgelser i Canada har vist, at PFAS precursorer udgør 34,5-85,5% af det totale indhold af PFAS i topjorden (0-1,0 m u.t.), mens de kun udgjorde en mindre del i grundvandet (<20%). Yderligere undersøgelser af jord, grundvand og overfladevand ved brandøvelsespladser (Yan et al., 2024) med udvidede analysepakker har vist, at flere stoffer udover de 22 PFAS påvises hyppigt (>20-30% af prøverne) og i nogle tilfælde i ret høje medionkoncentrationer, eks. 494 µg/kg TS for 6:2 FTAB i jord (med fund i 69% af prøverne, TABEL 17), 11.000 ng/l i grundvand for FHxSA (med fund i 70%, TABEL 19) og 426 ng/l 6:2 FTAB i overfladevand (med fund i 68,8%, TABEL 20).

Problematikken med precursorer kan også være gældende i andre brancher, idet de også kan have precursorer. Der er efterhånden en vis viden om en del af precursorer, men det vurderes ikke realistisk at udvide analysepakken, så de dækker alle precursorer og anvendelser. Det kunne derfor overvejes om andre mere avancerede analysemetoder såsom TOP assay kan anvendes.

5.2 Analysepakker – behov for udvidelser?

I Danmark analyseres normalt for 22 forskellige PFAS (jord og grundvand), og da der er flere end 10.000 forskellige PFAS, vil det være overraskende, hvis standardanalysepakken dækker alle de PFAS, som der kan findes i miljøet. I regionernes analyser er der sjældent anvendt en udvidet analysepakke for PFAS udover de 22 PFAS, men på enkelte prøver er der analyseret for andre PFAS fx MeFoSAA, PFTeDA, 4:2 FTS, 8:2 FTS og EtFOSAA. De pågældende PFAS har dog en meget lav detektionsfrekvens på <5% i regionernes undersøgelser, og generelt påvises de ikke, eller i meget lave koncentrationer.

Data fra internationale studier kunne tyde på, at der er nogle PFAS, som vi overser, hvilket er tydeligt, når man ser på erfaringerne fra de amerikanske og canadiske undersøgelser af brandøvelsespladser. Når man sammenligner, hvilke PFAS der er påvist i de forskellige internationale undersøgelser af brandøvelsespladser er det tydeligt, at det kan være meget svært at opstille et konkret analyseprogram, som kan være generelt dækkende for alle lokaliteter forurenede med PFAS.

De mere avancerede analysemetoder (såsom TOP analysen og AOF) har på nogle projekter afsløret, at der sandsynligvis findes en væsentlig pulje af precursorer, som ikke bliver identificeret ved den sædvanlige target analyse. Det er ikke på alle lokaliteter, at der påvises indikationer på precursorer, men internationale data viser, at det ikke er usandsynligt, at der kan findes precursorer i den øverste del af jorden i et kildeområde, især hvis der har været anvendt en nyere form for fx brandslukningsskum.

Precursorerne kan også findes i grundvandet, dog tyder de internationale data på, at det ikke er så tit, at de bliver påvist. Der er dog behov for at få afdækket omfanget af forekomsten af precursorer i Danmark, da datagrundlaget er meget lille. Det drejer sig om både de anioniske precursorer, men også om de kationiske og zwitterioniske precursorer, da der ikke er særlig meget kendskab til disse.

Med udgangspunkt i den gennemgåede international litteratur, danske erfaringer og nuværende vidensniveau kan man overveje at udvide analysepakken især ved brandøvelsespladser, eller hvor der har været anvendt brandslukningsskum. Udvidelsen kan omfatte følgende PFAS, som er fundet ofte og på tværs af medier: 4:2 FTS, 5:3 FTCA, 7:3 FTCA, FHxSA, 6:2 FTAB, PFTeDA, 8:2 FTSA og FOSAA, der er påvist i udlandet og Danmark. Derudover kan supplerende analyser (TOP-analysen) være et vigtigt værktøj i mange sager. Inden der træffes beslutning om udvidelse af analyseprogrammet, bør der dog udføres et egentlig litteratur review, indhentes erfaringer fra udlandet, og forskellige interessenter bør have mulighed for at kommentere på det.

5.2.1 Der mangler viden om ultra korte PFAS

Data fra konkrete projekter i Danmark, hvor der er analyseret for de ultra korte PFAS har vist, at de normalt kan påvises i grundvandet, og selvom PFAS'en TFA ikke nødvendigvis stammer fra en PFAS punktkilde, men kan stamme fra fx kølemiddel i airconditionanlæg (Albers, 2024), så bør der skaffes et større vidensgrundlag til vurdering af forekomsten af ultra korte PFAS især i grundvandet med henblik på at kunne vurdere, om der er nogle PFAS, som overses i den normale risikovurdering.

5.3 Betydning af forureningens alder for PFAS sammensætning

I nærværende gennemgang har der ikke været stor fokus på, hvilke PFAS der har været anvendt i de forskellige produkter, men litteraturen viste, at fx anvendelsen af PFAS i AFFF har ændret sig markant gennem tiden, og i forhold til producenten. Hvilket betydning dette har for forekomsten og spredningen af PFAS i den umættede zone er ukendt. Vil anvendelsen af precursorer i nogle af de nyere produkter kunne medføre en øget udvaskning af nogle af de gamle PFAS? Og vil det betyde, at der faktisk bliver dannet nogle nedbrydningsprodukter (enten i form af andre precursorer eller mere stabile PFAS) med tiden, så at det kan risikeres, at en forurening med PFAS forandres markant i løbet af fremtiden, og at en nuværende risikovurdering derfor bliver en forkert vurdering i fremtiden? Der er behov for at få dette afdækket.

5.4 Transport i umættet og mættet zone og ændring af forureningens sammensætning

Den generelle nuværende konceptuelle forståelse af de forskellige PFAS stoffers spredning i jord og grundvand kan opsummeres således:

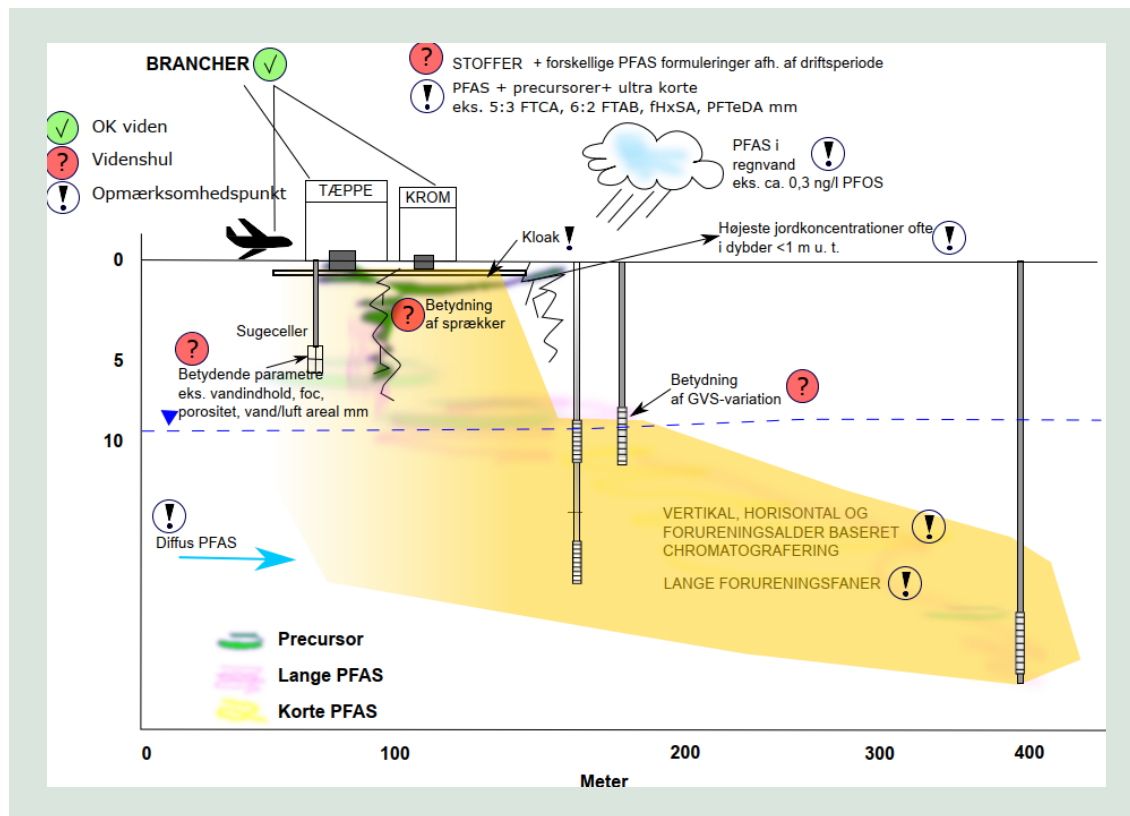
- Fordelingen i luft-vand grænsefladen i den umættede zone vurderes at kunne være en central mekanisme for tilbageholdelse af PFAS, især for de mere langkædede PFAS som PFOS og PFOA. Erfaringerne fra Regionernes undersøgelser viser et meget klart billede af, at de højeste koncentrationer for stort set alle PFAS træffes i de øverste 10 meter, og typisk inden for de øverste 2-3 m. Dette vurderes i høj grad at skyldes tilbageholdelse i den umættede zone.
- De kortkædede PFAS er mere mobile og dermed spreder sig dybere og længere end de langkædede PFAS, ligesom at carboxylsyrene er mere mobile end sulfonsyrene. Kigger man på udvalgte lang- og kortkædede PFAS, fx. PFOS og PFHxS vs. PFBA, ses det, at PFBA træffes forventeligt i større dybder. Ændringen i forureningssammensætningen af PFAS i henholdsvis øvre og nedre grundvand er observeret på flere af lokaliteterne, hvor de korte carboxylsyrer træffes dybere.
- PFOS er den mest dominerende PFAS i jorden på flere lokaliteter, og selvom der er en konsensus om, at PFOS burde binde sig til den øverste del af jorden, så findes

den også dybt i grundvandet. Tilsvarende kan der påvises PFOA i grundvandet. Årsagen til dette er ikke fastlagt, men en mulig forklaring kan være omdannelse af precursorer.

- Det er svært at uddrage generelle konklusioner omkring, hvordan forskellige geologiske typologier påvirker PFAS' spredning i jorden, idet der ikke er et tilstrækkeligt antal velundersøgte lokaliteter af forskellige geologiske typer. Når man kigger det samlede datasæt, ses der en tendens til, at der fx måske er en større forekomst af PFOS i større dybder i Region Hovedstaden (Ierede aflejringer) end i områder, hvor de øverste lag består af sand.
- PFAS faner kan være lange og sammensætning i spidsen af fanen er typisk domineret af korte carboxylsyrer. På flere af lokaliteterne ses der lange grundvandsforureningsfaner med PFAS på mere end 200 meter og på enkelte af Forsvarets lokaliteter er der observeret grundvandsforureningsfaner, der er 1-2 km lange, ligesom at der i sekundære grundvandsmagasiner generelt ses lange forureningsfaner. Lange forureningsfaner i grundvandet er også noget, der karakteriserer PFAS forureninger i udlandet /**Fejl! Bogmærke er ikke defineret.**/.

6. Opsummering

Med baggrund i erfaringer fra danske undersøgelser og den internationale litteratur er der i FIGUR 42 vist et eksempel på en udvidet konceptuel model, der viser vidensniveauer og nogle af videnshullerne for forståelsen af spredningen af PFAS på forurenede grunde.



FIGUR 42. Eksempel på generisk konceptuel skitse af forskellig eksisterende viden og eksempler på videnshuller for forureninger med PFAS. Forureningsfanen illustrerer bl.a. hvordan der længst væk i fanen kan forekomme højere koncentrationer af kortkædede PFAS forbindelser end ved kilden er ikke fyldestgørende, da blandt andet spredningen i den umættede zone stadig er yderst mangelfuld forstået, og fortsat forskning er nødvendigt til at skabe forståelsen af de forskellige processer.

Der er efterhånden en del viden om, hvilke brancher der kan være væsentlig punktkilder til forurening med PFAS af jord og grundvand i Danmark. Det kan dog være svært at lokalisere de præcise hotspots på lokaliteterne.

Det anbefales, at der skal være opmærksomhed på kloakkerne, da de kan være spredningsveje for PFAS forurening. Da PFAS efterhånden findes overalt i miljøet, så skal man også være opmærksom på, om påvist PFAS stammer fra en kilde eller skal tilskrives et diffus bidrag.

Det kan blive vanskeligt at opnå en dækkende analysepakke for de forskellige PFAS i forskellige brancher, men med baggrund i de nationale og udenlandske erfaringer er der identificeret en række PFAS, som det kunne overvejes at medtage i et fremtidigt analyseprogram. I givet fald bør forskellige interessenter inddrages i denne proces.

Der er viden om, at mange PFAS såsom PFOS tilbageholdes i stor grad i den umættede zone, men den fulde forståelse af processerne er mangelfuld. For eksempel er PFOS den mest dominerende PFAS i jorden på flere lokaliteter, og selvom der er en konsensus om, at PFOS burde binde sig til den øverste del af jorden, så findes den også dybt i grundvandet. Der er ikke tilstrækkelig viden om, hvorfor dette er tilfældet, ligesom den generelle forståelse for spredningen og chromatograferingen af PFAS i den umættede zone er yderst sparsomt især under danske forhold.

Der er derfor behov for væsentlig mere viden omkring spredningen af PFAS i den umættede zone, herunder fx betydningen af effekten af vand-luft grænsefladen. Ligeledes mangler der viden om, hvilken betydning vandindhold i den umættede zone har for de koncentrationer, der måles i porevandet.

Der er ikke tilstrækkeligt kendskab til, hvilken betydning sprækker i fx moræneler har for tilbageholdelsen i den umættede zone, samt hvilken betydning en eventuel tidlig variation i infiltrationen har. Forekomsten af sprækker er særligt relevant for de lokaliteter, der ligger i det østlige Danmark.

Fra et undersøgelsesperspektiv mangler der viden omkring, hvilken betydning filterplaceringen har i forhold til grundvandsspejlet. Vil koncentrationerne i vandprøver udtaget i den kapillære zone / allerøverst ved grundvandsspejlet vise nogle markant anderledes (højere) koncentrationer, end hvis der udtages vandprøver et lille stykke under grundvandsspejlet? Fænomenet er set for overfladevand, hvor koncentrationerne i et mikrolag kan være flere størrelsesordner højere, end hvad der påvises lige under mikrolaget. Og hvad betyder det med fluktuationer i grundvandsspejlet?

Der er også et behov for, at der opnås mere viden om, hvordan de forskellige PFAS spredes i grundvandsmagasinet. På nogle lokaliteter er der observeret grundvandsforureningsfaner på over 1-2 km, hvilket kan være lidt overraskende. Ved tolkning og vurdering af forureningsfaner er man nødt til at fravige det traditionelle tilgang, hvor man kigger på det samlede forureningsniveau / sum parametrene (fx ved forureninger med chlorerede opløsningsmidler), men for PFAS er det nødvendigt for en god konceptuel forståelse at kigge nærmere på den konkrete PFAS sammensætning i forskellige afstande fra kilden og forskellige dybder og have særlig opmærksomhed på chromatograferingen. Der er desuden meget begrænset viden om nedbrydningsprocesserne i grundvandsmagasiner, som omdanner precursorer til andre PFAS.

Nogle konceptuelle modeller for PFAS forureninger (samt det bagvedliggende undersøgelsesgrundlag) bærer præg af, at de er udarbejdet med baggrund i den traditionelle forståelse for spredningen med forureninger med fx chlorerede opløsningsmidler eller oliekomponenter. PFAS er dog surfactants, og deres fysisk-kemiske parametre og derved opførelse i jord og grundvand kan være meget forskelligt fra de traditionelle forureningsparametre. Denne manglende forståelse og erfaring giver anledning til mindre optimale undersøgelsesstrategier, hvad angår placering af borerne og filter, samt vurdering af forureningens omfang på et forkert grundlag såsom en underestimering af forureningsfanens længde.

7. Referencer

- Ackerman Grunfeld, D., Gilbert, D., Hou, J., Jones, A. M., Lee, M. J., Kibbey, T. C. G., & O'Carroll, D. M. (2024). Underestimated burden of per- and polyfluoroalkyl substances in global surface waters and groundwaters. *Nature Geoscience*, 17(4), 340–346. <https://doi.org/10.1038/s41561-024-01402-8>
- Adamson, D. T., Nickerson, A., Kulkarni, P. R., Higgins, C. P., Popovic, J., Field, J., Rodowa, A., Newell, C., Deblanc, P., & Kornuc, J. J. (2020). Mass-Based, Field-Scale Demonstration of PFAS Retention within AFFF-Associated Source Areas. *Environmental Science and Technology*, 54(24), 15768–15777. <https://doi.org/10.1021/acs.est.0c04472>
- Albers, C. N. (2024). *Diffus grundvandsforurening med trifluoreddikesyre (TFA)*. Danmarks og Grønlands geologiske undersøgelser.
- Arshadi, M., Garza-Rubalcava, U., Guedes, A., Cápiro, N. L., Pennell, K. D., Christ, J., & Abriola, L. M. (2024). Modeling 1-D aqueous film forming foam transport through the vadose zone under realistic site and release conditions. *Science of the Total Environment*, 919. <https://doi.org/10.1016/J.SCITOTENV.2024.170566>
- Baun, A., Bjerg, P. L., Jensen, J., Jensen, T. K., Lyngberg, A., Strobel, B. W., Vinggaard, A. M., Vorkamp, K., & Trier, X. (2023). *Begrænsning af menneskers og miljøets eksponering for PFAS i Danmark – Del 1: Identifikation af videnshuller. Rapport fra Videnstaskforce for PFAS-forurening*. 1–90.
- Bierbaum, T., Hansen, S. K., Poudel, B., & Haslauer, C. (2023). Investigating rate-limited sorption, sorption to air-water interfaces, and colloid-facilitated transport during PFAS leaching. *Environmental Science and Pollution Research International*, 30(58), 121529–121547. <https://doi.org/10.1007/S11356-023-30811-2>
- Bigler, M. C., Brusseau, M. L., Guo, B., Jones, S. L., Pritchard, J. C., Higgins, C. P., & Hatton, J. (2024). High-Resolution Depth-Discrete Analysis of PFAS Distribution and Leaching for a Vadose-Zone Source at an AFFF-Impacted Site. *Environmental Science and Technology*, 58(22), 9863–9874. <https://doi.org/10.1021/acs.est.4c01615>
- Brusseau, M. L. (2020). Simulating PFAS transport influenced by rate-limited multi-process retention. *Water Research*, 168, 115179. <https://doi.org/10.1016/J.WATRES.2019.115179>
- Brusseau, M. L. (2023). Determining air-water interfacial areas for the retention and transport of PFAS and other interfacially active solutes in unsaturated porous media. *Science of the Total Environment*, 884. <https://doi.org/10.1016/J.SCITOTENV.2023.163730>
- Brusseau, M. L. (2024). Field versus laboratory measurements of PFAS sorption by soils and sediments. *Journal of Hazardous Materials Advances*, 16. <https://doi.org/10.1016/J.HAZADV.2024.100508>
- Buck, R. C., Franklin, J., Berger, U., Conder, J. M., Cousins, I. T., Voogt, P. De, Jensen, A. A., Kannan, K., Mabury, S. A., & van Leeuwen, S. P. J. (2011). Perfluoroalkyl and polyfluoroalkyl substances in the environment: Terminology, classification, and origins. *Integrated Environmental Assessment and Management*, 7(4), 513–541. <https://doi.org/10.1002/IEAM.258>
- Coffin, E. S., Reeves, D. M., & Cassidy, D. P. (2023). PFAS in municipal solid waste landfills: Sources, leachate composition, chemical transformations, and future challenges. *Current Opinion in Environmental Science and Health*, 31(Figure 1), 100418. <https://doi.org/10.1016/j.coesh.2022.100418>
- Cogorno, J., & Rolle, M. (2024). Impact of Variable Water Chemistry on PFOS-Goethite Interactions: Experimental Evidence and Surface Complexation Modeling. *Environmental Science & Technology*, 58(3), 1731–1740. <https://doi.org/10.1021/acs.est.3c09501>

- Costanza-Robinson, M. S., Harrold, K. H., & Lieb-Lappen, R. M. (2008). X-ray microtomography determination of air-water interfacial area-water saturation relationships in sandy porous media. *Environmental Science and Technology*, 42(8), 2949–2956. <https://doi.org/10.1021/ES072080D>
- Divine, C., Wadhawan, A., Pulikkal, V., Khambhammettu, P., & Erickson, J. (2023). Polyfluoroalkyl substances requiring a renewed focus on groundwater-surface water interactions. *Groundwater Monitoring and Remediation*, 43(1), 14–31. <https://doi.org/10.1111/gwmr.12569>
- DWI. (2021). *No Title*. <https://dwi-content.s3.eu-west-2.amazonaws.com/wp-content/uploads/2021/10/04203217/Information-Letter-PFAS-Monitoring.pdf>
- Garza-Rubalcava, U., Klevan, C., Pennell, K. D., & Abriola, L. M. (2025). Transport and competitive interfacial adsorption of PFOA and PFOS in unsaturated porous media: Experiments and modeling. *Water Research*, 268, 122728. <https://doi.org/10.1016/j.watres.2024.122728>
- Gefell, M. J., Huang, H., Opdyke, D., Gustafson, K., Vlassopoulos, D., McCray, J. E., Best, S., & Carey, M. (2022). Modeling <sc>PFAS</sc> Fate and Transport in Groundwater, with and Without Precursor Transformation. *Groundwater*, 60(1), 6–14. <https://doi.org/10.1111/gwat.13152>
- Guo, B., Saleem, H., & Brusseau, M. L. (2023). Predicting Interfacial Tension and Adsorption at Fluid-Fluid Interfaces for Mixtures of PFAS and/or Hydrocarbon Surfactants. *Environmental Science and Technology*, 57(21), 8044–8052. <https://doi.org/10.1021/acs.est.2c08601>
- Guo, B., Zeng, J., & Brusseau, M. L. (2020). A Mathematical Model for the Release, Transport, and Retention of Per- and Polyfluoroalkyl Substances (PFAS) in the Vadose Zone. *Water Resources Research*, 56(2), e2019WR026667. <https://doi.org/10.1029/2019WR026667>
- Guo, B., Zeng, J., Brusseau, M. L., & Zhang, Y. (2022). A screening model for quantifying PFAS leaching in the vadose zone and mass discharge to groundwater. *Advances in Water Resources*, 160, 104102. <https://doi.org/10.1016/J.ADVWATRES.2021.104102>
- Hort, H. M., Stockwell, E. B., Newell, C. J., Scalia, J., & Panday, S. (2024). Modeling and Evaluation of PFOS Retention in the Unsaturated Zone above the Water Table. *Groundwater Monitoring and Remediation*. <https://doi.org/10.1111/gwmr.12662>
- Houtz, E. F., Higgins, C. P., Field, J. A., & Sedlak, D. L. (2013). Persistence of perfluoroalkyl acid precursors in AFFF-impacted groundwater and soil. *Environmental Science and Technology*, 47(15), 8187–8195. <https://doi.org/10.1021/es4018877>
- Huang, D., Saleem, H., Guo, B., & Brusseau, M. L. (2022). The impact of multiple-component PFAS solutions on fluid-fluid interfacial adsorption and transport of PFOS in unsaturated porous media. *Science of the Total Environment*, 806. <https://doi.org/10.1016/J.SCI-TOTENV.2021.150595>
- ITRC. (2023a). *Per- and Polyfluoroalkyl Substances (PFAS)*.
- ITRC. (2023b). *Section 17-1 Occurences in soil, sediment, and biosolids*. 13(1), 104–116.
- Jensen, B. B., Tsi-tonaki, K., & Larsen, T. (2024). *RETNINGSLINJER FOR RISIKOVURDERING AF PFAS FUND I VIDEREGAENDE GRUNDVANDSUNDERSØGELSER*. Region Hovedstaden.
- Lasee, S., McDermett, K., Kumar, N., Guelfo, J., Payton, P., Yang, Z., & Anderson, T. A. (2022). Targeted analysis and Total Oxidizable Precursor assay of several insecticides for PFAS. *Journal of Hazardous Materials Letters*, 3(August), 100067. <https://doi.org/10.1016/j.hazl.2022.100067>
- Lassen, C., Maag, J., Krag, A., & Dau, M. S. (2024). *Substance flow analysis of PFASs in Denmark, Final report*.
- Lei, X., Lian, Q., Zhang, X., Karsili, T. K., Holmes, W., Chen, Y., Zappi, M. E., & Gang, D. D. (2023). A review of PFAS adsorption from aqueous solutions: Current approaches, engineering applications, challenges, and opportunities. *Environmental Pollution*, 321, 121138. <https://doi.org/10.1016/j.envpol.2023.121138>

- Liu, M., Munoz, G., Vo Duy, S., Sauvé, S., & Liu, J. (2022). Per- and Polyfluoroalkyl Substances in Contaminated Soil and Groundwater at Airports: A Canadian Case Study. *Environmental Science and Technology*, 56(2), 885–895. <https://doi.org/10.1021/acs.est.1c04798>
- Lyu, Y., Brusseau, M. L., Chen, W., Yan, N., Fu, X., & Lin, X. (2018). Adsorption of PFOA at the Air–Water Interface during Transport in Unsaturated Porous Media. *Environmental Science & Technology*, 52(14), 7745–7753. <https://doi.org/10.1021/acs.est.8b02348>
- Lyu, Y., Wang, B., Du, X., Guo, B., & Brusseau, M. L. (2022). Air-water interfacial adsorption of C4-C10 perfluorocarboxylic acids during transport in unsaturated porous media. *Science of the Total Environment*, 831. <https://doi.org/10.1016/J.SCITOTENV.2022.154905>
- Michigan Department of Environment, G. L. and E. (EGLE). (2020). *Review of Available Software for PFAS Modeling Within the Vadose Zone*.
- Miljøstyrelsen. (2023). *Miljøstyrelsens opgørelse af PFAS i sprøjtemidler*. 23, 1–4.
- Miljøstyrelsen. (2024). *Graensevaerdier for PFAS i miljøet*. november, 1–10. www.mst.dk
- Morsing, L., & Petersen, T. E. L. (2024). *Assessment of parameters for transport and distribution of PFAS in the unsaturated and saturated zone of a sandy aquifer*. Technical University of Denmark.
- Mualem, Y. (1976). A new model for predicting the hydraulic conductivity of unsaturated porous media. *Water Resources Research*, 12(3), 513–522. <https://doi.org/10.1029/WR012i003p00513>
- Nicolajsen, E. S., & Tsitonaki, K. (2016). Kortlægning af brancher der anvender PFAS. In *Miljøstyrelsen, Miljøprojekt nr. 1905* (Issue 1905). Miljøstyrelsen.
- NIRAS. (2021). *Faktaark om PFAS i forchromningsindustrien*. 1–4.
- NIRAS. (2022). *Faktaark for PFAS i forskellige brancher*. Miljøstyrelsen.
- Olsen, J. K., Mortensen, P., & Olesen, M. R. (2024). *Udredningsprojekt vedr. analysemetoder til undersøgelse for PFAS-forbindelser i jord, grundvand og overfladevand* (Issue 2266). Miljøstyrelsen.
- Peng, S., & Brusseau, M. L. (2005). Impact of soil texture on air-water interfacial areas in unsaturated sandy porous media. *Water Resources Research*, 41(3), 1–8. <https://doi.org/10.1029/2004WR003233>
- Peters, A., Hohenbrink, T. L., Iden, S. C., & Durner, W. (2021). A Simple Model to Predict Hydraulic Conductivity in Medium to Dry Soil From the Water Retention Curve. *Water Resources Research*, 57(5), e2020WR029211. <https://doi.org/10.1029/2020WR029211>
- Quinnan, J., Rossi, M., Curry, P., Lupo, M., Miller, M., Korb, H., Orth, C., & Hasbrouck, K. (2021). Application of PFAS-mobile lab to support adaptive characterization and flux-based conceptual site models at AFFF releases. *Remediation*, 31(3), 7–26. <https://doi.org/10.1002/rem.21680>
- Raschke, A., Nejadhashemi, A. P., & Rafiei, V. (2022). Overview of Modeling, Applications, and Knowledge Gaps for Integrated Large-Scale PFAS Modeling. *Journal of Environmental Engineering*, 148(9). [https://doi.org/10.1061/\(asce\)ee.1943-7870.0002033](https://doi.org/10.1061/(asce)ee.1943-7870.0002033)
- Rasmusson, K., & Fagerlund, F. (2024a). Per- and polyfluoroalkyl substances (PFAS) as contaminants in groundwater resources – A comprehensive review of subsurface transport processes. In *Chemosphere* (Vol. 362). Elsevier Ltd. <https://doi.org/10.1016/j.chemosphere.2024.142663>
- Rasmusson, K., & Fagerlund, F. (2024b). Per- and polyfluoroalkyl substances (PFAS) as contaminants in groundwater resources – A comprehensive review of subsurface transport processes. *Chemosphere*, 362, 142663. <https://doi.org/10.1016/j.chemosphere.2024.142663>
- Regionernes Videncenter for Miljø og Ressourcer (VMR). (2022). *Håndbog om undersøgelse og afværge af forurening med PFAS-forbindelser*.
- Schaefer, C. E., Nguyen, D., Christie, E., Shea, S., Higgins, C. P., & Field, J. (2022). Desorption Isotherms for Poly- and Perfluoroalkyl Substances in Soil Collected from an Aqueous Film-Forming Foam Source Area. *Journal of Environmental Engineering*, 148(1). [https://doi.org/10.1061/\(ASCE\)EE.1943-7870.0001952](https://doi.org/10.1061/(ASCE)EE.1943-7870.0001952)

- Sharifan, H., Bagheri, M., Wang, D., Burken, J. G., Higgins, C. P., Liang, Y., Liu, J., Schaefer, C. E., & Blotvogel, J. (2021). Fate and transport of per- and polyfluoroalkyl substances (PFASs) in the vadose zone. *Science of The Total Environment*, 771, 145427. <https://doi.org/10.1016/J.SCITOTENV.2021.145427>
- Silva, J. A. K., Martin, W. A., Johnson, J. L., & McCray, J. E. (2019). Evaluating air-water and NAPL-water interfacial adsorption and retention of Perfluorocarboxylic acids within the Vadose zone. *Journal of Contaminant Hydrology*, 223, 103472. <https://doi.org/10.1016/j.jconhyd.2019.03.004>
- Silva, J. A. K., Martin, W. A., & McCray, J. E. (2021). Air-water interfacial adsorption coefficients for PFAS when present as a multi-component mixture. *Journal of Contaminant Hydrology*, 236. <https://doi.org/10.1016/J.JCONHYD.2020.103731>
- Silva, J. A. K., Šimůnek, J., & McCray, J. E. (2022). Comparison of methods to estimate air-water interfacial areas for evaluating PFAS transport in the vadose zone. *Journal of Contaminant Hydrology*, 247, 103984. <https://doi.org/10.1016/J.JCONHYD.2022.103984>
- Sima, M. W., & Jaffé, P. R. (2021). A critical review of modeling Poly- and Perfluoroalkyl Substances (PFAS) in the soil-water environment. *Science of The Total Environment*, 757, 143793. <https://doi.org/10.1016/J.SCITOTENV.2020.143793>
- Smith, J., Brusseau, M. L., & Guo, B. (2024a). An integrated analytical modeling framework for determining site-specific soil screening levels for PFAS. *Water Research*, 252(Febuary), 121236. <https://doi.org/10.1016/j.watres.2024.121236>
- Smith, J., Brusseau, M. L., & Guo, B. (2024b). An integrated analytical modeling framework for determining site-specific soil screening levels for PFAS. *Water Research*, 252, 121236. <https://doi.org/10.1016/j.watres.2024.121236>
- Stults, J. F., Schaefer, C. E., Fang, Y., Devon, J., Nguyen, D., Real, I., Hao, S., & Guelfo, J. L. (2024). Air-water interfacial collapse and rate-limited solid desorption control Perfluoroalkyl acid leaching from the vadose zone. *Journal of Contaminant Hydrology*, 265. <https://doi.org/10.1016/J.JCONHYD.2024.104382>
- Tsitonaki, K., Priess, S., & Roost, S. (2023). *OVERBLIK OVER VIDEN OM PFAS TIL VURDERING AF GRUNDVANDETS MU-LIGE PÅVIRKNING AF OVERFLADE-VAND DECEMBER 2023*. Miljøstyrelsen.
- Umeh, A. C., Hassan, M., Egbuatu, M., Zeng, Z., Al Amin, M., Samarasinghe, C., & Naidu, R. (2023). Multicomponent PFAS sorption and desorption in common commercial adsorbents: Kinetics, isotherm, adsorbent dose, pH, and index ion and ionic strength effects. *Science of the Total Environment*, 904. <https://doi.org/10.1016/j.scitotenv.2023.166568>
- Umeh, A. C., Naidu, R., Olisa, E., Liu, Y., Qi, F., & Bekele, D. (2024). A systematic investigation of single solute, binary and ternary PFAS transport in water-saturated soil using batch and 1-dimensional column studies: Focus on mixture effects. *Journal of Hazardous Materials*, 461. <https://doi.org/10.1016/J.JHAZMAT.2023.132688>
- USEPA. (2021). *Analysis of Per- and Polyfluoroalkyl Substances (PFAS) in Aqueous, Solid, Biosolids, and Tissue Samples by LC-MS/MS*. July.
- van Genuchten, M. Th. (1980). A Closed-form Equation for Predicting the Hydraulic Conductivity of Unsaturated Soils. *Soil Science Society of America Journal*, 44(5), 892–898. <https://doi.org/10.2136/sssaj1980.03615995004400050002x>
- Vanderborght, J., Fetzner, T., Mosthaf, K., Smits, K. M., & Helmig, R. (2017). Heat and water transport in soils and across the soil-atmosphere interface: 1. Theory and different model concepts. *Water Resources Research*, 53(2), 1057–1079. <https://doi.org/10.1002/2016WR019982>
- VMR. (2022). Håndbog om undersøgelse og afværgelse af forurening med PFAS-forbindelser. 1, 1, 7–154.
- Wallis, I., Hutson, J., Davis, G., Kookana, R., Rayner, J., & Prommer, H. (2022). Model-based identification of vadose zone controls on PFAS mobility under semi-arid climate conditions. *Water Research*, 225, 119096. <https://doi.org/10.1016/J.WATRES.2022.119096>
- Yan, P. F., Dong, S., Pennell, K. D., & Cápiro, N. L. (2024). A review of the occurrence and microbial transformation of per- and polyfluoroalkyl substances (PFAS) in aqueous film-

- forming foam (AFFF)-impacted environments. *Science of the Total Environment*, 927(March). <https://doi.org/10.1016/j.scitotenv.2024.171883>
- Zeng, J., & Guo, B. (2021). Multidimensional simulation of PFAS transport and leaching in the vadose zone: Impact of surfactant-induced flow and subsurface heterogeneities. *Advances in Water Resources*, 155, 104015. <https://doi.org/10.1016/j.advwatres.2021.104015>
- Zeng, J., & Guo, B. (2023). Reduced Accessible Air–Water Interfacial Area Accelerates PFAS Leaching in Heterogeneous Vadose Zones. *Geophysical Research Letters*, 50(8). <https://doi.org/10.1029/2022GL102655>

8. Appendix

Jord

Datagrundlag (antal påviste prøver)
Indgår i median- og maks. koncentration

Datagrundlag (antal påviste prøver)																						
Indgår i median- og maks. koncentration																						
	17 Tekstilindustri	28.51 Overfladebehandling af metal	31 Elektronik, fremstilling	36 Møbelindustri	50 Autolakering og undervognsbeh.	75.25 Brandvæsen og redningskorps	90.0X Losseplads	93.23 Lufthavne mv.	17.51 Tæppefabrikker	21 Papir- og papindustri	22 Trykkerier	25 Gummi- og plastindustri	26 Cement og beton	28 Jern- og metalvareindustri	29 Maskinindustri	35 Fremstilling af fly, skibe og både	40 El-, gas- og varmeforsyning	62 Lufttransport	75.22 Forsvar	90.01 Spildevand	93.01 Vaskerier og renserier	93.01.30 Renserier
(GG20) Sum 22 PFAS	7	40	9	52	46	285	153	13	1	4	24	5	3	18	13	7	4	7	242		9	1
6:2 FTS			1	2		45	13	3														
PFBA	1	2		1	12	118	28	22			9	1		2		16		16	121			
PFBS		2			4	9	5													4		
PFDA		3		1	3	25	19	4		2									56			
PFDS		4	1	1		2	1															
PFDoDA					8	3	2												6		1	
PFHpA					1	107	20	13		1	2			2	2	8		8	53			
PFHpS	3	10	1	1		8	8															
PFHxA	1	1	1	1	3	119	26	11		1	3			3	2	8		8	56			
PFHxS	3	7	1	1		125	22															
PFNA	1				1	43	27	4		1									59			
PFNS						2																
PFOA	5	5	1	15	25	205	106	7	1	4	20	2		12	6	1	3	1	226	1	2	
PFOs	16	42	9	52	43	321	132	32	1	3	23	5	3	17	17	26	3	26	237	1	7	1
PFOSA	3	5	5	7	1	13	14															
PFPeA	1	9	8	8	4	150	22	21		3				3	3	18		18	68			
PFPeS	1					1	7															
PFTriDA						2													3			
PFUnDA						13	8	3							2				13		1	

Jord

Datagrundlag (antal prøver)
Indgår i
detektionsfrekvens

	17 Tekstilindustri	17.51 Tæppefabrikker	21 Papir- og papindustri	22 Trykkerier	24.3 Fremstilling af maling, lak mv.	25 Gummi- og plastindustri	26 Cement og beton	28 Jern- og metalvareindustri	28.51 Overfladebehandling af metal	29 Maskinindustri	31 Elektronik, fremstilling	35 Fremstilling af fly, skibe og både	36 Møbelindustri	40 El-, gas- og varmeforsyning	50 Autolakering og undervognsbeh.	62 Lufttransport	63.23 Lufthavne mv.	75.22 Forsvar	75.25 Brandvæsen og redningskorps	90.01 Spildevand	90.0X Losseplads	93.01 Vaskerier og renserier	93.01.30 Renserier
6:2 FTS	45	2	4	41	4	25	24	82	86	97	16	42	88	7	141	42	48	395	663	11	376	18	47
PFBA	45	2	4	41	4	25	24	82	86	99	16	42	88	7	141	42	48	395	663	11	376	18	47
PFBS	45	2	4	41	4	25	24	82	86	97	16	42	88	7	141	42	48	395	663	11	376	18	47
PFDA	45	2	4	41	4	25	24	82	86	97	16	42	88	7	141	42	48	395	663	11	376	18	47
PFDS	39	2	4	41		18	24	79	70	71	16	42	21	7	38	42	48	372	581	3	217	16	47
PFDoDA	39	2	4	41		18	24	79	70	69	16	42	21	7	38	42	48	372	581	3	217	16	47
PFDoDS	39	2	3	40		6	24	51	31	29	8	42	17	7	36	42	48	372	510	3	119	16	11
PFHpA	45	2	4	41	4	13	24	82	47	58	8	42	88	7	139	42	48	395	621	11	374	18	46
PFHpS	39	2	4	41		6	24	51	31	30	8	42	17	7	36	42	48	372	510	3	117	16	11
PFHxA	45	2	4	41	4	25	24	82	86	99	16	42	88	7	141	42	48	395	663	11	376	18	47
PFHxS	45	2	4	41	4	25	24	82	86	99	16	42	88	7	141	42	48	395	663	11	376	18	47
PFNA	45	2	4	41	4	25	24	82	86	99	16	42	88	7	141	42	48	395	663	11	376	18	47
PFNS	39	2	3	40		6	24	51	31	29	8	42	17	7	36	42	48	372	510	3	117	16	11
PFOA	45	2	4	41	4	25	24	82	86	99	16	42	88	7	141	42	48	395	663	11	376	18	47
PFOs	45	2	4	41	4	25	24	82	86	99	16	42	88	7	141	42	48	395	663	11	376	18	47
PFOSA	45	2	4	41	4	25	24	82	86	99	16	42	88	7	141	42	48	395	663	11	376	18	47
PFPeA	45	2	4	41	4	25	24	82	86	97	16	42	88	7	141	42	48	395	663	11	376	18	47
PFPeS	39	2	3	40		6	24	51	31	29	8	42	17	7	36	42	48	372	510	3	121	26	11
PFTriDA	39	2	3	40		6	24	51	31	29	8	42	17	7	36	42	48	372	510	3	117	16	11
PFTriDS	39	2	3	40		6	24	51	31	29	8	42	17	7	36	42	48	372	510	3	117	16	11
PFUnDA	39	2	4	41		18	24	79	70	69	16	42	21	7	38	42	48	372	581	3	217	16	47
PFUnDS	39	2	3	40		6	24	51	31	29	8	42	17	7	36	42	48	372	510	3	117	16	11

Grundvand

Datagrundlag (antal prøver)
Indgår i
detectionsfrekvens

6:2 FTS	288	59	9	85	226	39	17 Tekstilindustri
PFBA	294	59	9	88	226	39	17.51 Tæppefabrikker
PFBS	288	59	9	85	226	39	18 Beklædningsindustri
PFDA	294	59	9	88	226	39	19 Læder- og skødnæder
PFDoDA	110	17	9	26	52	19	20 Træindustri
PFDoDS	101	17	9	26	52	18	21 Papir- og papirindustri
PFDS	109	17	9	26	52	19	22 Tykkere
PFHnA	294	59	9	88	226	39	24 Kemisk industri
PFHnS	110	17	9	26	52	19	24.3 Fremstilling af maling, lak mv.
PFHnA	294	59	9	88	226	39	25 Gumm- og plastindustri
PFHnS	294	59	9	88	226	39	26 Cement og beton
PFNA	294	59	9	88	226	39	27 Metalbearbejdning
PFNS	101	17	9	26	52	18	28 Jern- og metalvareindustri
PFDA	294	59	9	88	226	39	28.51 Overfladebehandling af metal
PFOS	294	59	9	88	226	39	29 Hælsindustri
PFOSA	294	59	9	88	226	39	31 Elektronik, fremstilling
PFPhA	288	59	9	85	226	39	35 Fremstilling af fly, skibe og både
PFPhS	101	17	9	26	52	18	36 Hælsindustri
PFTiDA	110	17	9	26	52	19	40 El-, gas- og varmeudrustning
PFTiDS	101	17	9	26	52	18	45 El-installation
PFUoDA	110	17	9	26	52	19	50 Ausklæknings og underopbeh.
PFUoDS	101	17	9	26	52	18	62 Lufttransport

Grundvand

Datagrundlag (antal påviste prøver)
Indgår i median- og maks. koncentration

(GG20) Sum 22 PFAS	211	39	6	48	133	33	292	370	86	250	85	192	619	661	1026	206	145	313	72	3	438	10	9	622	2	345	571	3	1720	19	130	825
6:2 FTS	34	1			5	1	1	10	20	1	1	1	1	1	1	1	1	6	16	3												
PFBA	161	34	5	31	78	28	212	269	69	174	69	122	409	387	679	141	99	202	47	2	282	5	9	501	2	261	489	1	950	9	85	575
PFBS	157	28	5	37	79	23	149	239	48	132	64	127	322	382	540	112	104	141	46	4	234	12	10	290	2	155	447	1	822	12	80	540
PFDA	28	4			15		10	19	3	10	1	1	4	4	24	20	40	5	8	16	5			1	7	13	32	111	3	3	49	
PFDS																																
PFDoDA																																
PFDoDS																																
PFHnA	130	26	5	26	70	20	148	257	58	110	67	97	327	316	515	99	97	157	44	1	226	4	9	457	2	209	481	1	881	11	80	516
PFHnS	34	15	2	1	1	1	4	2	2	2	1	1	1	1	1	1	1	2	8	2	3					7	48	1	5	18		
PFHxA	124	24	5	23	69	17	141	250	60	110	71	116	284	281	462	99	94	142	40	1	200	7	9	516	2	227	504	1	839	9	72	509
PFHxS	131	27	5	24	53	12	103	220	44	76	48	58	214	346	400	89	78	123	27	1	157	6	10	477	2	140	463	1	760	13	70	424
PFNA	65	12	1	1	1	1	32	3	41	79	7	36	25	17	75	52	50	32	29	38	21					51	121	280	4	32	115	
PFNS																																
PFODA	176	32	5	40	110	25	216	323	62	170	75	130	462	496	767	147	130	229	66	1	305	7	12	459	2	260	506	4	1468	18	96	680
PFOS	153	21	1	26	95	14	137	254	32	138	54	93	299	469	573	109	112	175	57	1	273	7	11	438	1	155	437	3	1066	18	84	439
PFOSA	30	5	1	1	1	1	1	34	30	7	18	5	20	71	40	72	20	9	20	7	52			1	4	31	31	1	143		3	51
PFPhA	114	23	5	19	38	18	137	185	50	91	46	110	257	242	373	74	76	120	20	2	157	2	6	323	2	209	464	1	540	2	63	420
PFPhS	48	17	3	8	5	1	12	46	6	12	23	8	48	62	53	21	16	20	4	1	15	1	1	2	1	21	141	1	205	3	32	111
PFTiDA																																
PFUoDA																																
PFUoDS																																

Bilag 2:
PFAS transport i jord,
grundvand og umættet zone -
Oversigt over relevante
processer og litteratur om
modellering

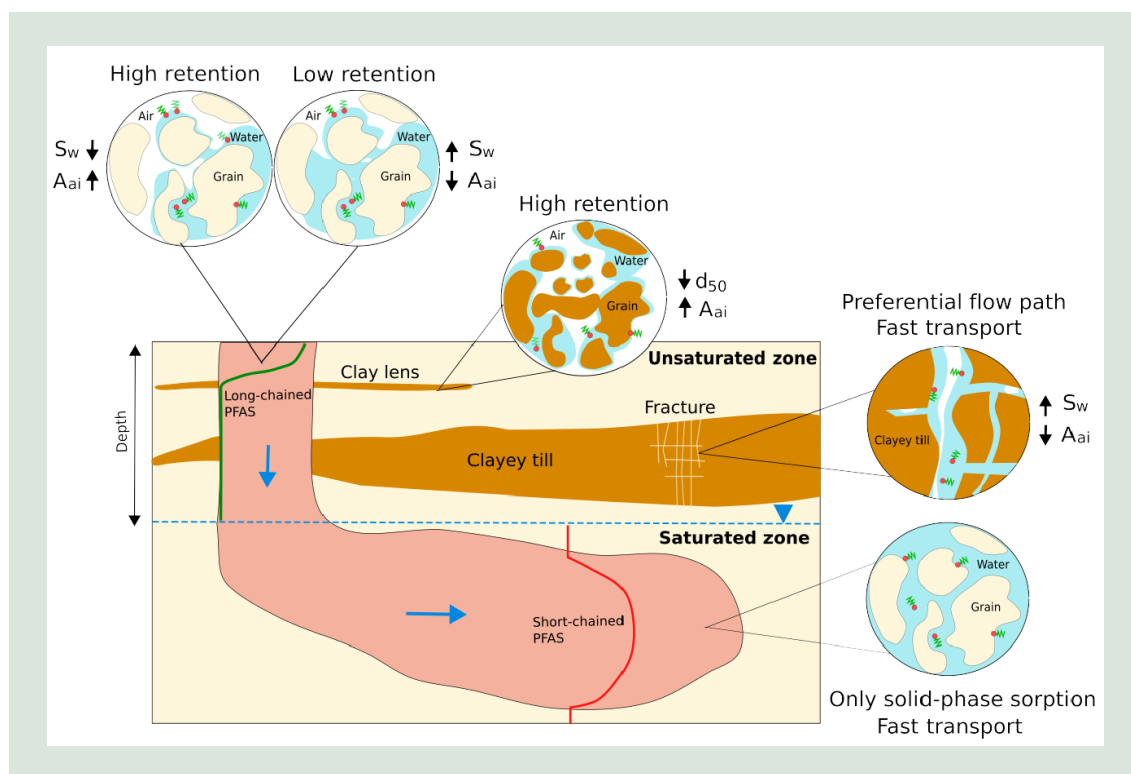
1. Introduktion

Nærværende bilag er udarbejdet af Klaus Mosthaf, Laura Morsing og Poul L. Bjerg, DTU Sustain.

Bilaget skal give et overblik over relevante processer og ligninger til at beskrive PFAS transport i jord og grundvand med modeller. Desuden beskrives litteratur om modeller og software, som bliver anvendt til at simulere PFAS transport i jord og grundvand. Dokumentet er suppleret af en tabel (Excelfil), som giver en større oversigt over artikler om PFAS modellering i jord, grundvand, og den umættede zone. Dette bilag kan rekvireres af DTU Sustain.

2. Grundlæggende processer og ligninger/modeller for at beskrive dem

En overordnet konceptuel model for PFAS transport i jord og grundvand vises i Figur 1. For at beskrive PFAS skæbne og transport i jord og grundvand med hjælp af modeller er der behov for matematiske ligninger eller analytiske løsninger som kan beskrive processerne ifølge den konceptuelle forståelse. Derfor er der behov for ligninger for både vandstrømningen under umættede og mættede forhold og stoftransport inklusive retentions- og nedbrydningsprocesser. De fleste PFAS er dog meget lidt eller ikke nedbrydelige og findes hovedsagelig i vandfasen eller sorberet til jord eller til luft-vand grænsefladen. Nedbrydningen kan være relevant fx for precursors som omdannes til andre PFAS.



FIGUR 1. Konceptuel model af PFAS transport i jord, umættet zone og grundvand. Figur 9 i Mor-sing og Petersen, DTU Sustain (2024). Desuden henvises til kapitel 10 i hovedrapport.

Processerne til at beskrive den vertikale transport af PFAS til grundvandet er listet i TABEL 1. Tabellen skelner mellem primære parametre, som er parametre der kræves for at bestemme transporten af PFAS i den umættede zone, og sekundære parametre som kan anvendes til at estimere de primære værdier. Nogle af værdierne er stoffspekifikke mens andre afhænger af den specifikke lokalitet. Flere af disse parametre gennemgås i det følgende.

TABEL 1. Oversigt over betydende parametre til at beskrive transport og spredning af PFAS i den mættede og umættede zone.

Parameter	Symbol	Enhed	Primær	Kommentar
Fordeling i umættet zone				
Luft-vand grænseflade fordelingskoefficient	K_{ia}	cm	X	For relevante PFAS
Specifikt luft-vand grænsefladeareal	A_{ia}	1/cm	X	For repræsentative PFAS
Vandmætning $\theta_w = \phi \cdot S_w$	θ_w	m ³ /m ³	X	Dybdefordeling og variationer over året
Effektiv porøsitet	ϕ_{eff}	-	X	
Residualt vandindhold	θ_r	-	X	
Van Genuchten parametre	n, α	-, cm	X	For at bestemme den umættede hydrauliske konduktivitet og kapillartryk
Kornstørrelsesfordeling	d	mm		Især d_{50} , d_{10} og d_{60}
Sorption til fast stof				
Jord-vand fordelingskoefficient	K_d	l/kg	X	For repræsentative jordtyper og relevante PFAS (antagelse om lineær sorption ved lave koncentrationer)
Fraktion af organisk kulstof	f_{oc}	-	X	For repræsentative jordtyper
Oktanolvand fordelingskoefficient	K_{ow}	l/l		
Organisk kulstof-vand fordelingskoefficient	K_{oc}	l/kg		
Fordelingskarakterisering				
Kildekoncentration og fordeling over dybden	C_w	ng/l	X	Fx anvendelsesperiode, kildekarakterisering og vertikalt koncentrationsprofil
Fri fase LNAPL/DNAPL				Parametrisering kan være nødvendig på sigt
Ionstyrke	I	mol/l		
Geologiske/hydrogeologiske parametre				
Infiltrationsrate	N	mm/år	X	Herunder variationer over året
Mættet hydraulisk konduktivitet	K_v , K_h	m/s	X	Vertikalt og horisontalt
Mættet hydrauliske gradienter	i_v , i_h	m/m	X	Vertikalt og horisontalt
Tykkelsen af den umættede zone		m	X	
Dybde til redoxgrænsen		m		
Sprækketransport				Er der sprækker observeret eller synlige?
Geologisk typologi				Geologisk karakterisering og områdegeologi
Matrixdiffusion				Detaljeret geologisk karakterisering med fokus på heterogeniteter
Molekylær diffusionskoefficient	D_{aq}	m ²	X	
Dispersiviteter (longitudinal, transversal horisontal, transversal vertikal)	α_L , α_{TH} , α_{TV}		X	Til repræsentative jordtyper

2.1 Vandstrømning i den mættede og umættede zone

Vandinfiltration fra jordoverfladen igennem dæklag og den umættede zone sker overvejende vertikalt, mens grundvandsstrømning i den mættede zone ofte hovedsageligt er horisontal.

Strømningen igennem den umættede zone kan være meget dynamisk med vandinfiltration fra overfladen (fx pga. regn), stagnerede faser med lidt eller ingen infiltration og endda opadgående strømning, fx pga. fordampnings- og plante-evapotranspirationsprocesser.

Vandstrømningen igennem den umættede zone kan beskrives med Richards ligning under antagelsen af en sammenhængende ubegrænset mobil luftfase og en lufttryk p_g som er defineret som 0 Pa (kapillartryk er defineret som $p_c = p_g - p_w$, dermed er $p_c = -p_w$). Diffusiv og advektiv transport af PFAS i luft eller sprækketransport tages der som regel ikke højde for. Alternativ til Richards ligningen kunne der bruges to ligninger (se fx Vanderborght et al. (2017)): en som beskriver vandstrømningen og en som beskriver luftstrømningen. Det kunne være et godt valg for flygtige PFAS, hvor PFAS transporten i luftfasen er betydelig. De er dog kun et begrænset antal PFAS som gælder som flygtige, og Richards ligningen bliver bredt anvendt for at simulere vandstrømningen i umættet zone.

En simpel 3-D version af Richards ligningen kan skrives som:

$$\frac{\partial \theta_w}{\partial t} - \nabla \cdot (\mathbf{K}(\theta_w) \cdot \nabla h) = W$$

med vandindholdet θ_w , hydraulisk head (vandpotentiale) $h = \frac{p_w}{\rho_w g} + z$, sources og sinks W .

Vandfluxen kan beregnes som $\mathbf{q}_w = -\mathbf{K}(\theta_w) \cdot \nabla h$, med den umættede hydraulisk konduktivitet $\mathbf{K}(\theta_w)$, som er defineret som produkt af den relative konduktivitet K_r som er en nonlinear funktion med værdier mellem 0 (maksimal modstand fra luftfasen, ingen vandstrømning) og 1 (ingen modstand fra luftfasen), og den mættede hydrauliske konduktivitetstensor $\mathbf{K}_{sat}$, som afhænger af jordmaterialet:

$$\mathbf{K}(\theta_w) = K_r \cdot \mathbf{K}_{sat}$$

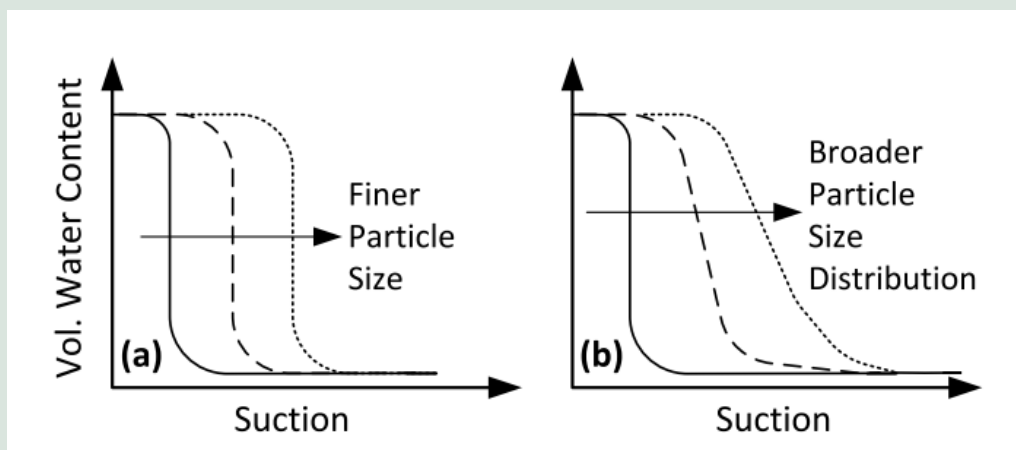
$$K(\theta_w) = S_e^{1/2} \left(1 - \left(1 - S_e^{1/m_{VG}} \right)^{m_{VG}} \right)^2 \cdot K_{sat}$$

S_e er den effektive vandmætning, der defineres som $S_e = \frac{\theta_w - \theta_r}{\theta_s - \theta_r}$ (med det residuale vandindhold θ_r og det mættede vandindhold θ_s som svarer til porøsiteten n , og m_{VG} er en jordspecifik fitting parameter (Mualem, 1976; van Genuchten, 1980). Sammenhæng mellem vandmætning S_w og vandindhold θ_w defineres som $S_w = \theta_w/n$. Under mættede forhold svarer den relative hydrauliske konduktivitet til den mættede hydrauliske konduktivitet ($S_e = 1$ og $K_r = 1$), og strømningen er dermed beskrevet med den almindelige Darcy ligning for mættede forhold. Når umættede forhold skal modelleres, er der behov for en konstitutiv ligning som forbinder vandindhold og kapillartryk. Et koncept som bliver hyppigt brugt, er konceptet udviklet i van Genuchten (1980):

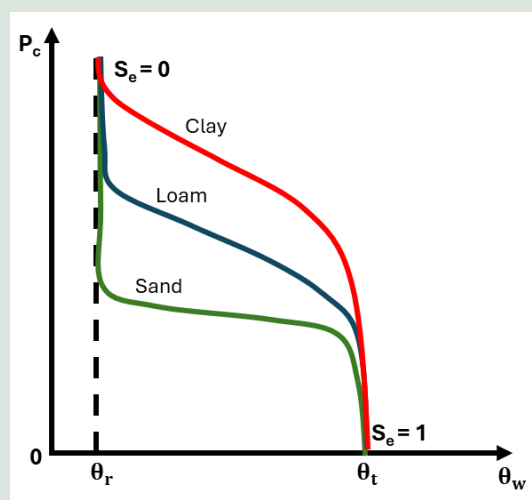
$$\theta = \begin{cases} \theta_r + \frac{\theta_s - \theta_r}{[1 + \alpha |\psi|^{n_{VG}}]^{m_{VG}}}, & \psi \geq 0 \\ \theta_s, & \psi < 0 \end{cases}$$

ψ er potentialet (kapillartryk p_c i Pa eller negativ hydraulisk tryk head $h_p = p_w/\rho_w g$ i m, med antagelsen at lufttryk $p_g = 0$ og dermed $p_c = -p_w$). En typisk kapillartyrk-mætningskurve kan ses i Figur 3, som viser at kapillartryk stiger nonlinearøst ved lavere vandindhold, med en asymptotisk stigning ved det residuale vandindhold.

Mere finkornet jordarter som ler har som regel højere kapillartryk end grovere som fx sand og grus som har større kørner og porer. En meget homogen og velsorteret jordtype har typisk en fladere kapillartryk-mætnings kurve end en jordtype som er meget inhomogen og usorteret. Det betyder at et mere finkornet materiale kan holde på mere vand, og man kan regne med generelt højere vandmætninger i fx moræneler end i sand. En bredere fordeling af pore- eller kornstørrelse fører som regel til en tykkere umættede zone med variationer i vandmætningen, se Figur 2 og Figur 3.



Figur 2: Indflydelse af kornstørrelse (particle size) og kornstørrelsesfordeling (particle size distribution) på vandindhold-kapillartryks kurve.



Figur 3: Illustration af en typisk kapillartryk-vandindholds ($P_c - \theta_w$) kurve for ler, lermuld (loam) og sand (Morsing og Petersen, DTU Sustain, 2024).

For at bruge van Genuchten konceptet har man behov for tre jordspecifikke parametre, α_{VG} , m_{VG} og n_{VG} . m_{VG} beregnes som regel som funktion af n_{VG} ($m_{VG} = 1 - 1/n_{VG}$), men kan også vælges uafhængig af det. Parameteren m_{VG} er den samme som i beregningen af den umættede hydrauliske konduktivitet. Mht. α_{VG} er det vigtigt at tjekke enhederne – den kan findes

som 1/Pa (trykformulering) og 1/cm (hydraulisk head formulering). Svarende til det skal vand-potentialet være defineret i Pa eller cm. Der findes også koncepter som bruger flere parametre med en fokus på en forbedret beskrivelse af tørre forhold, som fx i Peters et al. (2021).

En mere detaljeret beskrivelse af strømnings- og transportligningerne i 1-D findes i Guo et al. (2020), hvor en omfattende model for PFAS skæbne og transport i jord og grundvand er introduceret.

2.2 Transport af PFAS i den umættede zone og i grundvandet

Transporten af PFAS i den umættede zone og i grundvandet er påvirket af forskellige processer, som inkluderer advektion (transport med vandstrømningen), diffusion/dispersion, retention/sorption og nedbrydning. Den generelle ligning for transport af stoffer i jord og grundvand skrives som:

$$\frac{\partial(\theta_w C)}{\partial t} + \rho_b \frac{\partial C_s}{\partial t} + \frac{\partial C_{aw}}{\partial t} + \nabla \cdot (\theta_w C \mathbf{v}) - \nabla \cdot (\theta_w \mathbf{D} \nabla C) = \theta \lambda C + Q$$

C er PFAS koncentrationen i vand, C_s er koncentrationen sorberet til jordmateriale, C_{aw} (som også kan findes som Γ) er koncentrationen sorberet i luft-vand grænsefladen, $\mathbf{v} = \mathbf{q}/\theta_w$ er den lineære strømningshastighed af vand, $\mathbf{D}$ er den hydrodynamiske dispersionstensor (sum af mekanisk dispersion og molekylær diffusion), λ er nedbrydningsraten, Q er andre sources/sinks. Retentionsprocesserne i transportligningen inkluderer sorption til jordmateriale og til luft-vand interface, som illustreret i Figur 4.

Særligt for overfladeaktive stoffer er det tredje udtryk i transportligningen ($\partial C_{aw}/\partial t$), som gør det muligt at beskrive sorption af PFAS til luft-vand grænseflade. Til forskel for chlorerede opløsningsmidler og pesticider er PFAS overfladeaktiv og kan sorbere til luft-vand grænsefladen. Den slags sorption kan være vigtigt for langkædede PFAS i den umættede zone. Langkædede PFAS er defineret som: Perfluoroalkyl sulfonic acids, PFSAs med $N \geq 6$, og perfluoroalkyl carboxylic acids, PFCAs, med $N \geq 7$ kulstof atomer (Buck et al., 2011). For PFAS med færre kulstofatomer er indflydelsen af sorption til luft-vand interface på stofretention som regel mindre relevant. Samtidigt er sorption til jordmateriale ofte stærkere for langkædede PFAS. Dermed er der som regel en stærkere tilbageholdelse for de langkædede PFAS og de findes ofte i de øvre jordlag, mens de kortkædede PFAS er mere mobile og transporteres hurtigere og findes dermed i dybere jordlag.

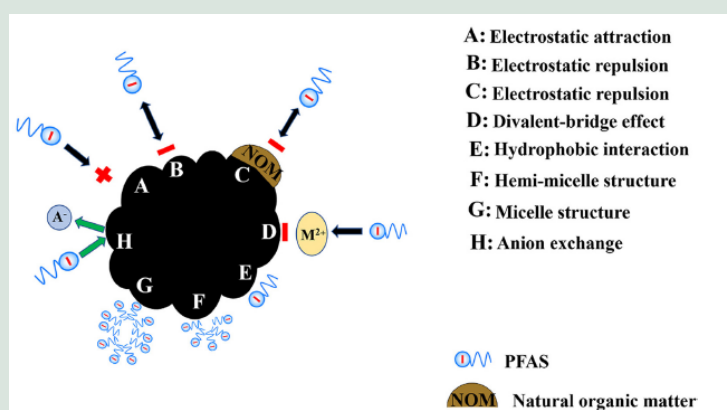
2.2.1 Sorption til jordmateriale

Sorption til jordmateriale kan beskrives med forskellige mere eller mindre komplekse sorptionsmodeller. En omfattende oversigt over forskellige sorptionsprocesser og -parametre findes i Lei et al. (2023) og Sima & Jaffé (2021), og er illustreret i Figur 4. Valget af sorptionsmodellen skal ske baseret på forskellige overvejelser om, fx, intervallen af PFAS koncentrationerne, egenskaber af PFAS og jordmateriale, strømningsforhold (findes der kinetisk sorption/desorption?). Ofte anvendes en simpel ligevægts sorptionsmodel med en jordspecifik fordelingskoefficient K_d .

Værdien af K_d kan afhænge af grundvandskemi (fx pH, ionstyrke), jordsammensætning, tilstedeværelse af andre stoffer, og PFAS koncentrationen. Sorption af PFAS kan ske til organisk materiale, hydrofobisk interaktion, eller igennem elektrostatiske interaktioner. Mange PFAS er anioniske, mens der findes også zwitterioniske og kationiske PFAS. Ladningen kan have en indflydelse især på elektrostatiske interaktioner med fx mineraler og jordpartikler. Sorption til af PFOS til mineraler blev undersøgt i Cogorno & Rolle (2024), og en kompleks model for at beskrive af PFOS sorption til Goethite blev udviklet.

For at beskrive ligevægts sorption til organisk materiale anvendes ofte en lineær sorptionsmodel $C_s = K_d C$ med $K_d = K_{oc} f_{oc}$, eller en Freundlich isotherm $C_s = K_f C^N$ (for koncentrationsintervaller og PFAS som viser ikke-linearitet), med Freundlich fittingparametre K_f og N . Brusseau (2024) viser en lineær sammenhæng mellem $\log K_{oc}$ værdien og den molare volumen af PFAS.

Effekten af kinetisk (de-)sorption blev undersøgt bl.a. i (Bierbaum et al., 2023; Brusseau, 2020; Schaefer et al., 2022) og (Stults et al., 2024). Sidstnævnte studie konkluderer, at det kan være nødvendigt i felten at inkludere kinetisk desorption for at beskrive tidsudviklingen af PFAS transporten. Zeng et al. (2021, 2023) rapporterer at kinetisk sorption til jordmateriale har en minimal effekt på PFAS udsivning i homogene områder baseret på lokalitetsspecifikke værdier som blev brugt i deres undersøgelse. Men forfattere bemærker at det kan være anderledes ved en anden lokalitet (med andre sorptionsegenskaber).



Figur 4: Oversigt over mulige sorptionsprocesser til jordpartikler. Grafisk abstract i (Lei et al., 2023).

Konkurrerede sorption af PFAS ved høje koncentrationer blev undersøgt i Umeh et al. (2024) og Garza-Rubalcava et al. (2025). Blandinger af PFAS viser ikke-linearitet i sorptionsisotermerne, især ved totale koncentrationer over 20 µg/L, hvilket markant reducerer sorption, særligt for PFOA og PFHxS. PFAS i blandinger har dermed større sandsynlighed for at sive ned til grundvandet på grund af reduceret sorption. Effekten er mindre relevant for lave PFAS koncentrationer.

2.2.2 Sorption til luft-vand grænseflade

Mængden af PFAS sorberet i luft-vand grænseflader i den umættede zone kan beskrives igennem koncentrationen i grænsefladearealet C_{ia} (også kaldt surface excess Γ), som er defineret som produkt af det specifikke luft-vand grænsefladeareal A_{ia} , sorptionskoefficienten til luft-vand grænseflade K_{ia} , og vandkoncentrationen C :

$$C_{ia} = \Gamma = A_{ia} \cdot K_{ia} \cdot C$$

2.2.3 Den samlede retardation

Den samlede retardation i den umættede zone kan beregnes som (Brusseau, 2020):

$$R = 1 + K_d \frac{\rho_b}{\theta_w} + K_{ia} \frac{A_{ia}}{\theta_w}$$

hvor det andet led ($K_d \frac{\rho_b}{\theta_w}$) er sorption til jordmateriale (med fordelingskoefficient K_d og bulk densitet ρ_b) mens det tredje led ($K_{ia} \frac{A_{ia}}{\theta_w}$) beskriver sorption i luft-vand grænseflade. I forskellige artikler beregnes en fraktion af retardation F_{AWIA} , som kvantificerer om sorption til jordmateriale eller til luft-vand grænseflade dominerer, afhængig af vandindholdet:

$$F_{AWIA} = \frac{R - 1 - \frac{K_d \rho_b}{\theta_w}}{R - 1} = \frac{K_{ia} \frac{A_{ia}}{\theta_w}}{R - 1}$$

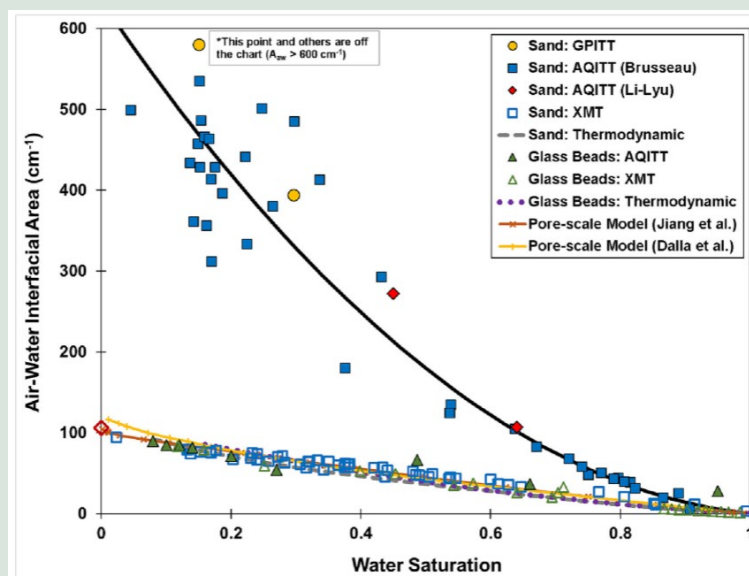
En lav F_{AWIA} værdi betyder at sorption til jordmateriale overvejer.

Som regel beskrives sorptionen til luft-vand grænseflade som ligevægtssorption, men der findes PFAS stoffer som viser en kinetisk sorption. Rate-begrænset (kinetisk) sorption til luft-vand grænseflade blev undersøgt fx i (Bierbaum et al., 2023; Brusseau, 2020).

2.2.4 Hvordan kan luft-vandgrænsefladearealet A_{ia} bestemmes?

Det specifikke luft-vand grænsefladeareal A_{ia} er defineret som luft-vand overflade (fx cm^2) per volumen (fx cm^3) og har dermed enheden $1/\text{længde}$ (fx $1/\text{cm}$). Beskrivelsen af luft-vand grænsefladearealet er udfordrende, fordi det er svært at måle og afhænger bl.a. af jordegenskaberne, som kan være meget heterogen. En enkelt prøve kunne være kun begrænset repræsentativ, og overfladespænding kan være koncentrationsafhængig ved høje PFAS koncentrationer, kapillarkræfter, og vandmætningen. En eksperimentel bestemmelse kræver indtil nu avanceret udstyr og forsøgsopsætninger (fx med grænsefladeaktive sporstoffer). Desuden kan sammenhæng mellem grænsefladearealet og mætningen vise hysteres (det betyder lidt forskellige parameterværdier for drænage og imbibition). Dermed kan strømningshistorikken have en indflydelse på værdien af luft-grænsefladearealet, ligesom det er tilfaldt for kapillarmætnings sammenhæng.

Forskellige praktiske metoder for at estimere og bestemme A_{ia} blev udviklet. Flere af dem er baseret på vandmætningen S_w og median af kornstørrelse d_{50} . Figur 5 viser eksempler af luft-vand grænseflade – mætningskurver for sand og glasperler.



Figur 5: Eksempel for kurver, som relaterer luft-vand grænsefladearealet til vandmætning for en sand og glasperler. Fra Brusseau (2023).

Brusseau (2023) giver en oversigt over forskellige koncepter og regressioner, og forslår en simpel kombinerede ligning for at estimere A_{ia} :

$$A_{ia} = (-2.85 \cdot S_w + 3.6) \cdot ((1 - S_w) \cdot 3.9 \cdot d_{50}^{-1.2})$$

Ligningen er baseret på malinger af tre sandjorde og er udviklet med antagelsen af sfæriske partikler, og kan bruges for at estimere A_{ia} i tilfælde, hvor kornstørrelsesfordeling er de eneste jorddata, som er tilgængelige. Dermed er dog ikke taget højde for andre jordspecifikke detaljer af kornstørrelsesfordelingen end median af korndiameter (d_{50}).

Andre estimeringsmetoder for A_{ia} bruger uensformighedstal $U = d_{60}/d_{10}$ for at inkludere flere detaljer af kornstørrelsesfordeling. De fleste undersøgelser og bestemmelse af A_{ia} findes dog for sand, og det er ikke klart, hvor vidt ligningen kan anvendes for andre jordarter, og for medier som viser en præferentiel strømning (fx pga. makroporer, sprækker, heterogeniteter). Der mangler viden og gode estimeringsmetoder for andre jordarter som findes i Danmark (fx moræner, kalk).

Nogle vigtige artikler, som giver estimeringsmetoder for A_{ia} er kort beskrevet i følgende liste. Peng & Brusseau (2005) præsenterer en koncept for at bestemme A_{ia} baseret på bulk densitet, specifikt overfladeareal af jordpartiklerne, og uensformighedstal U . A_{ia} blev beskrevet til at være generelt større for medier med stort specifikt overfladeareal, dvs. generelt lille d_{50} . Desuden aftager A_{ia} generelt med påtagende vandmætning. I artiklen bliver A_{ia} bestemt som

$$A_{ia} = s[1 + (\alpha_{VG} S_w)^a]^{-b} - c$$

med det specifikke overfladeareal af jordpartiklerne s og fitting parameters a , b og c . En mere praktisk anvendelig version af ligningen er

$$A_{ia} = s[1 + (\alpha_{VG} (S_w - S_m)^{n_{VG}})]^{-m_{VG}}$$

med $n_{VG} = \frac{1}{2-m_{VG}}$ (lidt modificerede Van Genuchten parametre, normalt $n_{VG} = \frac{1}{1-m_{VG}}$), med monolag mætning S_m , ækvivalent til n monolayer coverage af jordpartikler (lavere end den resterende mætning); fx 0.00062.

Forfattere giver et estimat af specifikt overfladeareal $SA = 6/(d_{50} \rho_p)$ med middel partikel diameter d_{50} (cm) og partikeldensitet $\rho_p = 2.69 \text{ g/cm}^3$; værdier for SA er i cm^2/g ; overfladeareal per volumen er defineret som $s = SA \times \rho_b$. Værdierne af SA bestemt på den måde findes dog at være betydeligt lavere end værdier bestemt med, fx, N_2 -BET metoden. I artiklen bliver α_{VG} estimeret som $\alpha_{VG} = 14.3 \ln(U) + 3.72$ (relation mellem α_{VG} og uensformighedstal), baseret på regressionsanalyse.

Costanza-Robinson et al. (2008) har bestemt en empirisk relation mellem grænsefladearealet og mætning baseret på synchrotron X-ray microtomography af ni sandede porøse medier. Ifølge artiklen aftager grænsefladearealet lineært med vandmætningen:

$$A_{ia} = SA(-0.9112 S_w + 0.9031)$$

Det maksimale grænsefladeareal kan estimeres med det geometriske overfladeareal af jordmaterialet $SA = 6(1 - \phi)/d_{50}$. Estimat bruger smooth particle assumption – passer mest for jorde med tilnærmelsesvis runde partikler.

Lyu et al. (2018) bestemmer A_{ia} som lineær approksimation baseret på maksimalt specifikt grænsefladeareal A_{max} og vandmætningen S_w . Også her aftager A_{ia} lineært med vandmætningen:

$$A_{ia} = (1 - S_w)A_{max}$$

Der defineres et estimat af $A_{max} = 216 \text{ 1/cm}$ for 0.35 mm sand (A_{max} kan bestemmes med N/BET metoden). Desuden giver forfattere en empirisk formel for at bestemme $A_{max} = 61.3 d_{50}^{-1.2}$ (regression med d_{50} in mm). Bemærk: Brusseau (2023) beregner A_{max} med d_{50} i cm. Dermed er ligningen $A_{max} = 3.9 d_{50}^{-1.2}$.

Silva et al. (2022) sammenligner forskellige metoder for at estimere luft-vand grænsefladearealer. De præsenterer en Leverett Thermodynamic Model (LTM), baseret på integral af jord-vand retentions kurve (Van Genuchten) over et mætningsinterval og overfladespænding:

$$A_{ia} = \frac{1}{\gamma_0} \int_{\theta}^{\theta_s} P_c(\theta) d\theta = \frac{\rho_w g}{\gamma_0} \int_{\theta}^{\theta_s} h(\theta) d\theta$$

$$\frac{dA_{ia}}{d\theta} = \frac{P_c}{\gamma_0} = \rho_w g h / \gamma_0$$

Van Genuchten parametre bliver bestemt der med en pedotransfer funktion, som baserer på d_{60} og uenformighedstal U . Forfattere skriver, at for overfladeaktive stoffer som PFAS, A_{ia} målinger med overfladeaktive tracers (sporstoffer) giver de mest akkurate værdier, mens LTM fører til det bedste estimat af $A_{ia} - S_w$ sammenhæng. En empirisk model / korrektur for LTM model bliver forslået, som tager højde for ujævn overflade af jordpartikler, som bruger NBET arealet og en jævn geometrisk overflade

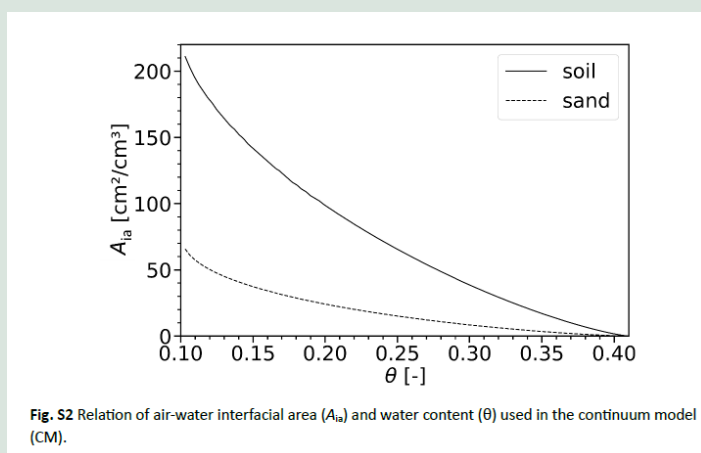
Brusseau (2023) beskriver en korrigeret ligning (korrigeret AQITT-baserede lineær metode) som bruger nitrogen-Brunauer-Emmett-Teller (NBET) specific surface area (SSA) metoden for at bestemme det specifikke overfladeareal (NBSSA). Artiklen forslår en korrektur faktor for konceptet beskrevet i Lyu et al. (2018) for at tage højde for den nonlineære sammenhæng mellem A_{ia} og S_w . NBSSA sammenlignes med geometric smooth-surfacearea GSSA ($1/\text{cm}$) = $6(1 - n)/d_{50}$. NBSSA inkluderer effekten af overfladeruhed af partikler på overfladearealet, mens GSSA antager en jævnt sfærisk overflade og estimerer af SSA ville være lavere.

Silva et al. (2019) beskriver, at ionstyrke kan påvirke sorption til luft-vand-interface. Som regel er der mere sorption med højere ionstyrke.

Wallis et al. (2022) bruger A_{ia} som lineær funktion af S_w ; de laver en modellerings benchmark med Guo et al. (2020) og Zeng et al. (2021). Modellen beskriver effekten af dynamisk vandstrømning i den umættede zone med opadgående strømning og transport pga. evapotranspiration og nedadrettet transport efter infiltrationsevents. Deres resultater viser den stærkeste vertikale PFAS transport efter stærkt regnfald: Hurtig nedadrettet transport og ringe luft-vand grænsefladeareal pga. højere vandmætning.

Bierbaum et al. (2023) bruger konceptet som er implementeret i HYDRUS software (efter Bradford et al. 2015):

$$A_{ia} = \frac{\rho_w g}{\gamma} \int_{\theta}^{\theta_s} h(\theta) d\theta$$



Figur 6: Relation mellem luft-vand grænseflade areal og vandindhold.

2.2.5 Hvordan kan fordelingskoefficienten K_{ia} bestemmes?

Fordelingskoefficienten K_{ia} afhænger af forskellige faktorer som PFAS koncentration og stofegenskab, jordtype, og miljøforhold/betingelser. Der er forskellige koncepter for at bestemme fordelingskoefficienten K_{ia} .

Der er bl.a. regressioner præsenteret i (Lyu et al., 2018, 2022), som giver ligninger baseret på kædelængde (antal C-atomer) af PFAS ud fra regressionsanalyser. Et eksempel er regressionen i Lyu et al (2022) for C4-C10 perfluorocarboxylic syrer (PFCAs) og koncentrationer af 1 mg/L:

$$\log K_{ia} = 0.46 \cdot N - 5.8$$

med N antal af kulstof atomer i PFAS, og K_{ia} i cm. Lyu et al. (2018) bestemmer K_{ia} for den homologe serie af sodium perfluoroalkyl carboxylates via regression:

$$\log K_{ia} = 0.56 \cdot N - 7.5$$

Det viser at regressioner giver kun gode approksimationer af K_{ia} indenfor en homologe stofgruppe.

Lyu et al. (2022) skriver at K_{ia} kan bestemmes via den lokale stigning i overfladespænding over PFAS koncentrationen:

$$K_{ia} = \frac{\Gamma}{C} = \frac{-1}{xR_gTC} \frac{\partial \gamma}{\partial \ln C}$$

K_{ia} blev fx bestemt for PFOA som 0.00285 cm for en PFOA koncentration af 1 mg/L. Fraktionen af retention pga. adsorption til luft-vand grænseflade blev bestemt for PFAS med antal af kulstof atomer $N = 4$ til $N = 10$, GenX and PFOS.

Udover det bliver koefficienter bestemt med hjælp af laboratorieforsøg (som fx kolonneforsøg), og Quantitative-structure/property-relationship (QSPR) modeller. QSPR modeller kan bruges for at estimere K_{ia} værdier ved hjælp af molekylstruktur, fx, den molære volumen (se bilag fra Rune Hjort). Den molære volumen kan blive beregnet som M_{mol}/ρ_c , med stofdensitet ρ_c , som kan findes fx i kemiske databaser (fx pubchem). En oversigt over en række K_{ia} værdier og andre stofegenskaber af PFAS findes i Rasmusson & Fagerlund (2024b).

K_{ia} oftest bestemt for en koncentration af 1 mg/L. Ved høje PFAS koncentrationer kan K_{ia} kan afhænge af PFAS koncentrationen, og de højeste K_{ia} værdier findes som regel for lave koncentrationer. Indflydelse af koncentrationen på K_{ia} er mest udpræget for koncentrationer > 1 mg/L. I litteraturen findes Under 1 mg/L blev der ingen eller kun begrænset koncentrationsafhængighed observeret for K_{ia} . Det tyder på at ved lave koncentrationer kan bruges en konstant værdi.

Afhængigheden af K_{ia} på koncentrationen og overfladespændingen kan beskrives med Szyzskowski ligningen (Lyu et al., 2022);

$$\gamma = \gamma_0 - b \ln \left(1 + \frac{C}{a} \right)$$

Gibbs adsorptionsligning relaterer overfladespænding til PFAS masse i luft-vand grænseflade (ved høje PFAS koncentrationer > 1 mg/L, hvor overfladeaktive egenskaber bliver relevant) som følger:

$$\Gamma = - \frac{1}{RT} \frac{\partial \sigma}{\partial \ln[C_T]}$$

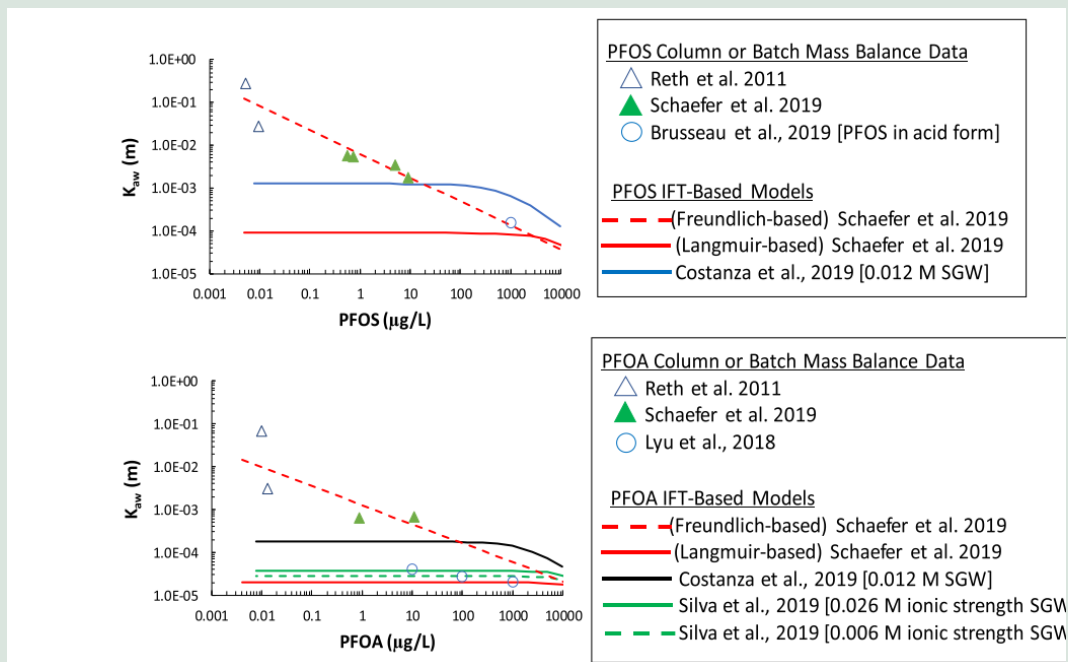
og dermed

$$K_{ia} = \frac{\Gamma}{C} = \frac{-1}{xR_gTC} \frac{\partial \gamma}{\partial \ln C}$$

En koncentrationsafhængighed af K_{ia} kan også beskrives med en Langmuir ligning. Silva et al. (2021) bruger en kombination af Langmuir og Freundlich ligning, for at inkludere koncentrationsafhængigheden af K_{ia} også ved lavere koncentrationer. Den kombinerede Langmuir-Szyzskowski (LS) ligningen er (Silva et al., 2021):

$$\gamma = \gamma_0 - \gamma_0 RT \Gamma_{max} \ln(1 + K_L C_w)$$

I review artiklen Sharifan et al. (2021) findes en oversigt over mange forskellige koncepter og transportprocesser. Forfattere finder at kurverne for PFOS og PFOA tyder på at koncentrationsafhængighed af K_{ia} er log-lineær og kan beskrives med en Freundlich-baseret ligning.

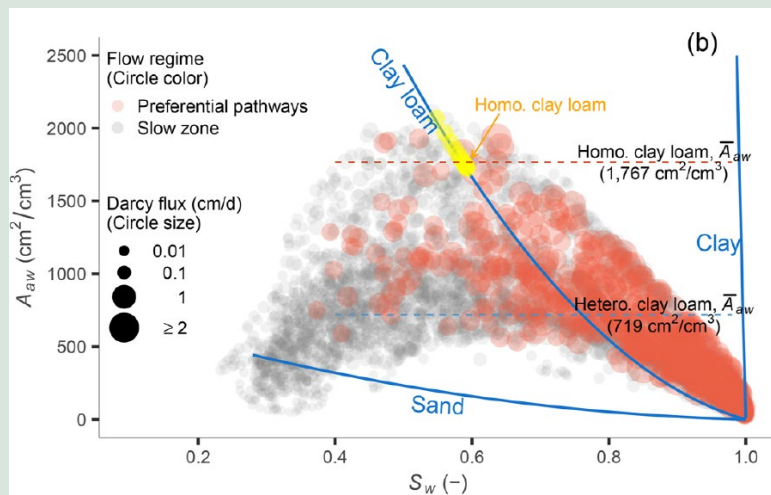


Figur 7: Koncentrationsafhængighed af K_{ia} for PFOS og PFOA. Figur 3 i Sharifan et al, (2021).

Når der er flere PFAS samtidig til stede kan der være konkurrence for sorptionen til luft-vand interface (Garza-Rubalcava et al., 2025; Guo et al., 2023; Huang et al., 2022; Silva et al., 2021; Umeh et al., 2023, 2024). Antagelsen er, at der findes ingen betydelige konkurrence mellem PFAS for lave, miljørelevante koncentrationer (Umeh et al., 2024). En model for at beskrive konkurrerede sorption til luft-vand interface findes fx i Arshadi et al. (2024).

2.2.6 Indflydelse af heterogeniteter og præferentielle strømning på PFAS transport

Heterogene opsætninger bliver undersøgt i Zeng & Guo (2021) og Zeng & Guo (2023). Zeng & Guo (2023) bruger modelkørsler med stokastisk genererede heterogene umættede zoner for at vise at kortkædede PFAS transporteres ligesom ikke-overfladeaktive stoffer, mens transporten af langkædede PFAS i et heterogent medie bliver 1.1 til 4.5 gange hurtigere end i en homogen opsætning pga. et reduceret luft-vand areal langs præferentielle strømningsveje. Forfattere konkluderer, at en god karakterisering af jordens heterogeniteter er vigtigt for at forudsige nedsivningen af langkædede PFAS igennem den umættede zone. Artiklen bruger en temporal moment analyse for at bestemme transporthastigheden af forureningens massemidtpunkt. Effekten af præferentiel strømning kan være endnu mere relevant, når der er makroporer, sprækker osv.



Figur 8: Grænsefladeareal A_{ia} over vandmætningen for sand, clay loam og ler som blev brugt i heterogene simulationer. Præferentielle strømning i høje mætningsområder. Langsom strømning mest i lav-mætnings områder. Figur 4b i Zeng & Guo (2023).

Brusseau (2020) definerer en multi-rate mass transfer model med advective og non-advective (stagnerende) områder, som er koblet igennem udvekslingsterme og inkluderer også sorption til luft-vand og luft-olie grænseflader, når olie er som separat fase til stedet.

2.2.7 Nedbrydning og biotransformation

Indtil nu (Oktober 2024), blev mikrobiel nedbrydning af PFAAs ikke tilstrækkeligt påvist, men det er ikke udelukket at det er muligt for nogle af stofferne, og mere forskning er påkrævet. Biotransformation af PFAS-precursorer, fx n:2 fluorotelomer alcohols (FTOHs) og FTS, kan være relevant som langtidskilde. Sharifan et al. (2021) og Regionernes Videncenter for Miljø og Ressourcer (VMR) (2022) giver et overblik over nogle mulige biotransformationsprocesser. Gefell et al. (2022) illustrerer, baseret på modellering, effekten af biotransformation af precursorer på udviklingen af en PFAA fane i et heterogent scenarie.

3. Hvilke modeller og software bliver brugt?

En række forskellige modeller bliver brugt i litteraturen til simulering af PFAS transport i jord og grundvand. Det inkluderer såvel gratis og open-source værktøj, og kommercielle modelleringsværktøj. Dokumentet er suppleret af en tabel (Excelfil) som giver en større oversigt over modeller og deres anvendelse til simulering af PFAS transport i jord og grundvand.

Modeller som findes hyppigst i litteraturen om modellering af PFAS transport i jord og grundvand er HYDRUS og MODFLOW + udvidelser (fx MT3DMS).

Tabel 23: Oversigt over en række modeller, som bliver brugt til modellering af PFAS transport i jord, umættet zone og grundvand.

Værktøj/software	Gratis/ open source?	Sorption til luft-vand grænseflade?	Dimension
HYDRUS 1D	Ja	Nej	1D
HYDRUS 2D/3D med PFAS	Nej	Ja	2D/3D
MODFLOW/MT3D(MS)	Ja	Muligt	1D-3D
MODFLOW-USG - Transport-PFAS	Ja	Ja	1D-3D
MODFLOW + RT3D	Nej	Ukendt	1D-3D
REMChlorMD (GSI) – bliver tilpasset for PFAS	Ja	Muligt	1D
GeoStudio (CTRAN & SEEP)	Nej	Muligt	2D/3D
LEACHM, Leaching, Estimation and Chemistry model	Ja	Nej	1D
PRZM (US-EPA)	Ja	Nej	1D
PELMO (Europæiske kommission) 1D (bucket) model, oprindelig for pesticider; skal tilpasses for PFAS	Ja	Nej	1D
iPHREEQC (geokemiske & elektrostatiske interaktioner) – kan kombineres med andre værktøj som COMSOL eller HYDRUS	Ja	Nej	0D/1D
MACROpore flow (MACRO), strømning igennem makroporer	Nej	Nej	1D
OpenFOAM	Ja	Muligt	1D-3D
HydroGeoSphere	Nej	Muligt	1D-3D
Daisy	Ja	Nej	1D
COMSOL Multiphysics	Nej	Muligt	1D-3D
OpenGeoSys	Ja	Muligt	1D-3D
FEFlow (DHI)	Nej	Muligt	1D-3D

Tabel 23 giver en overblik over en række modeller, som kunne findes anvendt i PFAS modelleringslitteratur indtil Oktober 2024. Der sker løbende nye udviklinger, og eksisterende modeller bliver løbende tilpasset og nye modeller bliver udviklet, så de kan beskrive PFAS transport i jord, grundvand, og den umættede zone. Fokus ligger i mange artikler på modellering af PFOS og PFOA transport, mens andre stoffer er mindre undersøgt.

Ikke alle modeller inkluderer muligheden for at simulere sorption til luft-vand grænseflade, som er især vigtigt for langkædede PFAS. Modeller som er udviklet til at beskrive PFAS transport

og sorption i den umættede zone inkluderer Hydrus 5 og Modflow USGS – Transport PFAS. Andre simulationsværktøjer kan manuelt tilpasses, så at den bliver taget højde for (bl.a. FE-FLOW, OpenGeoSys, COMSOL Multiphysics, OpenFOAM, HydroGeoSphere), mens det er indtil nu ikke muligt at inkludere denne sorptionsproces i nogle af værktøjerne, som ofte bliver anvendt til simulering af andre jord- og grundvandsforureninger som pesticider og chlorerede opløsningsmidler. Disse modeller kan dog bruges for at beskrive PFAS transport i den mættede zone med passende sorptionsparametre. Hvis værktøjet inkluderer en model for at beskrive strømning og transport i umættet zone kan det også bruges for kortkædede PFAS som viser kun begrænset sorption til luft-vand grænseflade. Nogle simulationsværktøjer er ved med at blive tilpasset, så at det kan anvendes for PFAS transport i den umættede zone (fx REMChlorMD).

Følgende artikler viser en oversigt over forskellige modeller.

Raschke et al. (2022) giver en begrænset oversigt over modeller som bruges for at simulere PFAS transport i umættet zone og i grundvand.

I artiklen beskrives følgende modeller for den PFAS transport i den umættede zone (2022):

- HYDRUS (Finite element model, 1D-3D, water, heat and solute). 1D version er gratis, mens 2D og 3D versionen og PFAS versionen er kommercielle.
- GeoStudio (kommerciel, GEO-SLOPE)
- PRZM (USEPA) og PELMO (European Commission pesticide leaching model) simulerer vand strømning og stoftransport (pesticides) i 1D, gratis, Finite-Difference modeller
- MACROpore flow (MACRO) for flow through soil macropores

Følgende grundvandsmodeller er nævnt:

- MODPATH, MT3DMS, PRZM and MODFLOW

Desuden giver rapporten Michigan Department of Environment (2020) en oversigt over en række modeller og deres evner for at simulere PFAS transport i umættet zone.

Vadose Zone Modeling Code	Method of Solving Groundwater Flow	Non Equilibrium Sorption	Freundlich (non linear) Sorption	Partitioning to the Air Water Interface	Root Uptake Function	Dual Permeability	Advanced Geochemical Modeling Capabilities	1D, 2D or 3D	Surfactant Induced Flow	Availability
HYDRUS	Richards Equation	Yes	Yes	Yes	Yes	Yes	PHREEQC Coupling, Colloid Transport	1D, 2D, and 3D	Customized Code	Free (1D), Commercial (2D & 3D)
PEARL	Richards Equation	Yes	Yes	No	Yes	Yes	pH Dependence, User-Defined Functions	1D	No	Free (current)
RZWQM	Richards Equation	Yes (limited)	No	No	Nitrogen Only	Yes	Limited Solute Transport, Cation Exchange, pH Considerations	1D	No	Free (current)
SVENVIRO	Richards Equation	No	Yes	No	Yes	No	No	2D and 3D	No	Commercial
CTRW with SEEP/W	Darcy's Law	No	User-Defined Function	No	Yes	No	No	1D and 2D	No	Commercial
PELMO	Capacity-based Approach	No	Yes	No	Yes	No	2 Sorption Sites	1D	No	Free (current)
SESOIL	Infiltration-based Approach	No	Yes	No	No	No	No	1D	No	Commercial
PRZM	Darcy's Law	No	No (Nitrogen only)	No	Solute Only	No	No	1D	No	Free (not current)
VLEACH	Darcy's Law	No	No	No	No	No	No	1D	No	Free (not current)

¹Green = Ideal; Yellow = Less than ideal; Red = Least suitable / not recommended.

Figur 9: Tabel 2 i Michigan Department of Environment (2020) med en oversigt over modeller og deres evner for at simulere PFAS transport i umættet zone.

Hort et al. (2024) giver en beskrivelse af USGT-PFAS (eller MODFLOW-USG-Transport PFAS) modellen, MODFLOW-USG for flow, hydraulisk head baserede formulering af Richards' ligningen for 3D flow i den umættede zone; en blanding af mættet og umættet strømning muligt.

Desuden findes der analytiske løsninger som regel til homogene 1-D systemer, fx

- PFAS-Leach (Guo et al., 2022), skal blive til en del af flere-trins simuleringsværktøj, forventet i forår 2025
- Smith et al. (2024b) præsenterer en tilpassede version af USEPA's 1D model for at bestemme soil-screening levels og til risikoevaluering af forurenede grunde. Modellen baserer på den analytiske løsning præsenteret i Guo et al. (2022) og anvendes på vertikal transport igennem den umættede zone og på transporten i akviferen til en indvindingsboring.
- STOMP, PNNL's Subsurface Transport Over Multiple Phases Simulator (STOMP) er et analytisk værktøj for at undersøge koblede processer som inkluderer fx multifluid strømning, varmetransport, geokemi og geomekanik. Indtil nu inkluderer STOMP ikke sorption til luft-vand grænseflade

3.1.1 Nogle åbne spørgsmål vedr. modellering af PFAS i jord og grundvand:

- Indflydelse af præferentielle strømningsveje, som fx makroporer, sprækker og andre heterogeniteter, og matriksdiffusion på PFAS transport?
- Hvordan vælges/bestemmes repræsentative parametre for fx ler og kalk jorde og hvor detaljeret skal parametre bestemmes for en heterogen jord? Repræsentative sorptionsparametre (både til jord og luft-vand grænseflade) for lavere koncentrationer?
- Hvornår er det vigtigt at inkludere kinetisk (de-)sorption og hvordan bestemmes parametre for det?
- Omdannelsesveje og -rater af PFAS (og precursorer)?

4. Referencer

- Ackerman Grunfeld, D., Gilbert, D., Hou, J., Jones, A. M., Lee, M. J., Kibbey, T. C. G., & O'Carroll, D. M. (2024). Underestimated burden of per- and polyfluoroalkyl substances in global surface waters and groundwaters. *Nature Geoscience*, 17(4), 340–346. <https://doi.org/10.1038/s41561-024-01402-8>
- Adamson, D. T., Nickerson, A., Kulkarni, P. R., Higgins, C. P., Popovic, J., Field, J., Rodowa, A., Newell, C., Deblanc, P., & Kornuc, J. J. (2020). Mass-Based, Field-Scale Demonstration of PFAS Retention within AFFF-Associated Source Areas. *Environmental Science and Technology*, 54(24), 15768–15777. <https://doi.org/10.1021/acs.est.0c04472>
- Albers, C. N. (2024). *Diffus grundvandsforurening med trifluoreddikesyre (TFA)*. Danmarks og Grønlands geologiske undersøgelser.
- Arshadi, M., Garza-Rubalcava, U., Guedes, A., Cápiro, N. L., Pennell, K. D., Christ, J., & Abriola, L. M. (2024). Modeling 1-D aqueous film forming foam transport through the vadose zone under realistic site and release conditions. *Science of the Total Environment*, 919. <https://doi.org/10.1016/J.SCITOTENV.2024.170566>
- Baun, A., Bjerg, P. L., Jensen, J., Jensen, T. K., Lyngberg, A., Strobel, B. W., Vinggaard, A. M., Vorkamp, K., & Trier, X. (2023). *Begrænsning af menneskers og miljøets eksponering for PFAS i Danmark – Del 1: Identifikation af videnshuller. Rapport fra Videnstaskforce for PFAS-forurening*. 1–90.
- Bierbaum, T., Hansen, S. K., Poudel, B., & Haslauer, C. (2023). Investigating rate-limited sorption, sorption to air-water interfaces, and colloid-facilitated transport during PFAS leaching. *Environmental Science and Pollution Research International*, 30(58), 121529–121547. <https://doi.org/10.1007/S11356-023-30811-2>
- Bigler, M. C., Brusseau, M. L., Guo, B., Jones, S. L., Pritchard, J. C., Higgins, C. P., & Hatton, J. (2024). High-Resolution Depth-Discrete Analysis of PFAS Distribution and Leaching for a Vadose-Zone Source at an AFFF-Impacted Site. *Environmental Science and Technology*, 58(22), 9863–9874. <https://doi.org/10.1021/acs.est.4c01615>
- Brusseau, M. L. (2020). Simulating PFAS transport influenced by rate-limited multi-process retention. *Water Research*, 168, 115179. <https://doi.org/10.1016/J.WATRES.2019.115179>
- Brusseau, M. L. (2023). Determining air-water interfacial areas for the retention and transport of PFAS and other interfacially active solutes in unsaturated porous media. *Science of the Total Environment*, 884. <https://doi.org/10.1016/J.SCITOTENV.2023.163730>
- Brusseau, M. L. (2024). Field versus laboratory measurements of PFAS sorption by soils and sediments. *Journal of Hazardous Materials Advances*, 16. <https://doi.org/10.1016/J.HAZADV.2024.100508>
- Buck, R. C., Franklin, J., Berger, U., Conder, J. M., Cousins, I. T., Voogt, P. De, Jensen, A. A., Kannan, K., Mabury, S. A., & van Leeuwen, S. P. J. (2011). Perfluoroalkyl and polyfluoroalkyl substances in the environment: Terminology, classification, and origins. *Integrated Environmental Assessment and Management*, 7(4), 513–541. <https://doi.org/10.1002/IEAM.258>
- Coffin, E. S., Reeves, D. M., & Cassidy, D. P. (2023). PFAS in municipal solid waste landfills: Sources, leachate composition, chemical transformations, and future challenges. *Current Opinion in Environmental Science and Health*, 31(Figure 1), 100418. <https://doi.org/10.1016/j.coesh.2022.100418>
- Cogorno, J., & Rolle, M. (2024). Impact of Variable Water Chemistry on PFOS-Goethite Interactions: Experimental Evidence and Surface Complexation Modeling. *Environmental Science & Technology*, 58(3), 1731–1740. <https://doi.org/10.1021/acs.est.3c09501>

- Costanza-Robinson, M. S., Harrold, K. H., & Lieb-Lappen, R. M. (2008). X-ray microtomography determination of air-water interfacial area-water saturation relationships in sandy porous media. *Environmental Science and Technology*, 42(8), 2949–2956. <https://doi.org/10.1021/ES072080D>
- Divine, C., Wadhawan, A., Pulikkal, V., Khambhammettu, P., & Erickson, J. (2023). Polyfluoroalkyl substances requiring a renewed focus on groundwater-surface water interactions. *Groundwater Monitoring and Remediation*, 43(1), 14–31. <https://doi.org/10.1111/gwmr.12569>
- DWI. (2021). *No Title*. <https://dwi-content.s3.eu-west-2.amazonaws.com/wp-content/uploads/2021/10/04203217/Information-Letter-PFAS-Monitoring.pdf>
- Garza-Rubalcava, U., Klevan, C., Pennell, K. D., & Abriola, L. M. (2025). Transport and competitive interfacial adsorption of PFOA and PFOS in unsaturated porous media: Experiments and modeling. *Water Research*, 268, 122728. <https://doi.org/10.1016/j.watres.2024.122728>
- Gefell, M. J., Huang, H., Opdyke, D., Gustafson, K., Vlassopoulos, D., McCray, J. E., Best, S., & Carey, M. (2022). Modeling <sc>PFAS</sc> Fate and Transport in Groundwater, with and Without Precursor Transformation. *Groundwater*, 60(1), 6–14. <https://doi.org/10.1111/gwat.13152>
- Guo, B., Saleem, H., & Brusseau, M. L. (2023). Predicting Interfacial Tension and Adsorption at Fluid-Fluid Interfaces for Mixtures of PFAS and/or Hydrocarbon Surfactants. *Environmental Science and Technology*, 57(21), 8044–8052. <https://doi.org/10.1021/acs.est.2c08601>
- Guo, B., Zeng, J., & Brusseau, M. L. (2020). A Mathematical Model for the Release, Transport, and Retention of Per- and Polyfluoroalkyl Substances (PFAS) in the Vadose Zone. *Water Resources Research*, 56(2), e2019WR026667. <https://doi.org/10.1029/2019WR026667>
- Guo, B., Zeng, J., Brusseau, M. L., & Zhang, Y. (2022). A screening model for quantifying PFAS leaching in the vadose zone and mass discharge to groundwater. *Advances in Water Resources*, 160, 104102. <https://doi.org/10.1016/J.ADVWATRES.2021.104102>
- Hort, H. M., Stockwell, E. B., Newell, C. J., Scalia, J., & Panday, S. (2024). Modeling and Evaluation of PFOS Retention in the Unsaturated Zone above the Water Table. *Groundwater Monitoring and Remediation*. <https://doi.org/10.1111/gwmr.12662>
- Houtz, E. F., Higgins, C. P., Field, J. A., & Sedlak, D. L. (2013). Persistence of perfluoroalkyl acid precursors in AFFF-impacted groundwater and soil. *Environmental Science and Technology*, 47(15), 8187–8195. <https://doi.org/10.1021/es4018877>
- Huang, D., Saleem, H., Guo, B., & Brusseau, M. L. (2022). The impact of multiple-component PFAS solutions on fluid-fluid interfacial adsorption and transport of PFOS in unsaturated porous media. *Science of the Total Environment*, 806. <https://doi.org/10.1016/J.SCI-TOTENV.2021.150595>
- ITRC. (2023a). *Per- and Polyfluoroalkyl Substances (PFAS)*.
- ITRC. (2023b). *Section 17-1 Occurences in soil, sediment, and biosolids*. 13(1), 104–116.
- Jensen, B. B., Tsiouonaki, K., & Larsen, T. (2024). *RETNINGSLINJER FOR RISIKOVURDERING AF PFAS FUND I VIDEREGÅENDE GRUNDVANDSUNDERSØGELSER*. Region Hovedstaden.
- Lasee, S., McDermett, K., Kumar, N., Guelfo, J., Payton, P., Yang, Z., & Anderson, T. A. (2022). Targeted analysis and Total Oxidizable Precursor assay of several insecticides for PFAS. *Journal of Hazardous Materials Letters*, 3(August), 100067. <https://doi.org/10.1016/j.hazl.2022.100067>
- Lassen, C., Maag, J., Krag, A., & Dau, M. S. (2024). *Substance flow analysis of PFASs in Denmark, Final report*.
- Lei, X., Lian, Q., Zhang, X., Karsili, T. K., Holmes, W., Chen, Y., Zappi, M. E., & Gang, D. D. (2023). A review of PFAS adsorption from aqueous solutions: Current approaches, engineering applications, challenges, and opportunities. *Environmental Pollution*, 321, 121138. <https://doi.org/10.1016/j.envpol.2023.121138>

- Liu, M., Munoz, G., Vo Duy, S., Sauvé, S., & Liu, J. (2022). Per- and Polyfluoroalkyl Substances in Contaminated Soil and Groundwater at Airports: A Canadian Case Study. *Environmental Science and Technology*, 56(2), 885–895. <https://doi.org/10.1021/acs.est.1c04798>
- Lyu, Y., Brusseau, M. L., Chen, W., Yan, N., Fu, X., & Lin, X. (2018). Adsorption of PFOA at the Air–Water Interface during Transport in Unsaturated Porous Media. *Environmental Science & Technology*, 52(14), 7745–7753. <https://doi.org/10.1021/acs.est.8b02348>
- Lyu, Y., Wang, B., Du, X., Guo, B., & Brusseau, M. L. (2022). Air-water interfacial adsorption of C4-C10 perfluorocarboxylic acids during transport in unsaturated porous media. *Science of the Total Environment*, 831. <https://doi.org/10.1016/J.SCITOTENV.2022.154905>
- Michigan Department of Environment, G. L. and E. (EGLE). (2020). *Review of Available Software for PFAS Modeling Within the Vadose Zone*.
- Miljøstyrelsen. (2023). *Miljøstyrelsens opgørelse af PFAS i sprøjtemidler*. 23, 1–4.
- Miljøstyrelsen. (2024). *Graensevaerdier for PFAS i miljøet*. november, 1–10. www.mst.dk
- Morsing, L., & Petersen, T. E. L. (2024). *Assessment of parameters for transport and distribution of PFAS in the unsaturated and saturated zone of a sandy aquifer*. Technical University of Denmark.
- Mualem, Y. (1976). A new model for predicting the hydraulic conductivity of unsaturated porous media. *Water Resources Research*, 12(3), 513–522. <https://doi.org/10.1029/WR012i003p00513>
- Nicolajsen, E. S., & Tsitsonaki, K. (2016). Kortlægning af brancher der anvender PFAS. In *Miljøstyrelsen, Miljøprojekt nr. 1905* (Issue 1905). Miljøstyrelsen.
- NIRAS. (2021). *Faktaark om PFAS i forchromningsindustrien*. 1–4.
- NIRAS. (2022). *Faktaark for PFAS i forskellige brancher*. Miljøstyrelsen.
- Olsen, J. K., Mortensen, P., & Olesen, M. R. (2024). *Udredningsprojekt vedr . analysemetoder til undersøgelse for PFAS-forbindelser i jord , grundvand og overfladevand* (Issue 2266). Miljøstyrelsen.
- Peng, S., & Brusseau, M. L. (2005). Impact of soil texture on air-water interfacial areas in unsaturated sandy porous media. *Water Resources Research*, 41(3), 1–8. <https://doi.org/10.1029/2004WR003233>
- Peters, A., Hohenbrink, T. L., Iden, S. C., & Durner, W. (2021). A Simple Model to Predict Hydraulic Conductivity in Medium to Dry Soil From the Water Retention Curve. *Water Resources Research*, 57(5), e2020WR029211. <https://doi.org/10.1029/2020WR029211>
- Quinnan, J., Rossi, M., Curry, P., Lupo, M., Miller, M., Korb, H., Orth, C., & Hasbrouck, K. (2021). Application of PFAS-mobile lab to support adaptive characterization and flux-based conceptual site models at AFFF releases. *Remediation*, 31(3), 7–26. <https://doi.org/10.1002/rem.21680>
- Raschke, A., Nejadhashemi, A. P., & Rafiei, V. (2022). Overview of Modeling, Applications, and Knowledge Gaps for Integrated Large-Scale PFAS Modeling. *Journal of Environmental Engineering*, 148(9). [https://doi.org/10.1061/\(asce\)ee.1943-7870.0002033](https://doi.org/10.1061/(asce)ee.1943-7870.0002033)
- Rasmusson, K., & Fagerlund, F. (2024a). Per- and polyfluoroalkyl substances (PFAS) as contaminants in groundwater resources – A comprehensive review of subsurface transport processes. In *Chemosphere* (Vol. 362). Elsevier Ltd. <https://doi.org/10.1016/j.chemosphere.2024.142663>
- Rasmusson, K., & Fagerlund, F. (2024b). Per- and polyfluoroalkyl substances (PFAS) as contaminants in groundwater resources – A comprehensive review of subsurface transport processes. *Chemosphere*, 362, 142663. <https://doi.org/10.1016/j.chemosphere.2024.142663>
- Regionernes Videncenter for Miljø og Ressourcer (VMR). (2022). *Håndbog om undersøgelse og afværgelse af forurening med PFAS-forbindelser*.
- Schaefer, C. E., Nguyen, D., Christie, E., Shea, S., Higgins, C. P., & Field, J. (2022). Desorption Isotherms for Poly- and Perfluoroalkyl Substances in Soil Collected from an Aqueous Film-Forming Foam Source Area. *Journal of Environmental Engineering*, 148(1). [https://doi.org/10.1061/\(ASCE\)EE.1943-7870.0001952](https://doi.org/10.1061/(ASCE)EE.1943-7870.0001952)

- Sharifan, H., Bagheri, M., Wang, D., Burken, J. G., Higgins, C. P., Liang, Y., Liu, J., Schaefer, C. E., & Blotvogel, J. (2021). Fate and transport of per- and polyfluoroalkyl substances (PFASs) in the vadose zone. *Science of The Total Environment*, 771, 145427. <https://doi.org/10.1016/J.SCITOTENV.2021.145427>
- Silva, J. A. K., Martin, W. A., Johnson, J. L., & McCray, J. E. (2019). Evaluating air-water and NAPL-water interfacial adsorption and retention of Perfluorocarboxylic acids within the Vadose zone. *Journal of Contaminant Hydrology*, 223, 103472. <https://doi.org/10.1016/j.jconhyd.2019.03.004>
- Silva, J. A. K., Martin, W. A., & McCray, J. E. (2021). Air-water interfacial adsorption coefficients for PFAS when present as a multi-component mixture. *Journal of Contaminant Hydrology*, 236. <https://doi.org/10.1016/J.JCONHYD.2020.103731>
- Silva, J. A. K., Šimůnek, J., & McCray, J. E. (2022). Comparison of methods to estimate air-water interfacial areas for evaluating PFAS transport in the vadose zone. *Journal of Contaminant Hydrology*, 247, 103984. <https://doi.org/10.1016/J.JCONHYD.2022.103984>
- Sima, M. W., & Jaffé, P. R. (2021). A critical review of modeling Poly- and Perfluoroalkyl Substances (PFAS) in the soil-water environment. *Science of The Total Environment*, 757, 143793. <https://doi.org/10.1016/J.SCITOTENV.2020.143793>
- Smith, J., Brusseau, M. L., & Guo, B. (2024a). An integrated analytical modeling framework for determining site-specific soil screening levels for PFAS. *Water Research*, 252(Febuary), 121236. <https://doi.org/10.1016/j.watres.2024.121236>
- Smith, J., Brusseau, M. L., & Guo, B. (2024b). An integrated analytical modeling framework for determining site-specific soil screening levels for PFAS. *Water Research*, 252, 121236. <https://doi.org/10.1016/j.watres.2024.121236>
- Stults, J. F., Schaefer, C. E., Fang, Y., Devon, J., Nguyen, D., Real, I., Hao, S., & Guelfo, J. L. (2024). Air-water interfacial collapse and rate-limited solid desorption control Perfluoroalkyl acid leaching from the vadose zone. *Journal of Contaminant Hydrology*, 265. <https://doi.org/10.1016/J.JCONHYD.2024.104382>
- Tsitonaki, K., Priess, S., & Roost, S. (2023). *OVERBLIK OVER VIDEN OM PFAS TIL VURDERING AF GRUNDVANDETS MU-LIGE PÅVIRKNING AF OVERFLADE-VAND DECEMBER 2023*. Miljøstyrelsen.
- Umeh, A. C., Hassan, M., Egbuatu, M., Zeng, Z., Al Amin, M., Samarasinghe, C., & Naidu, R. (2023). Multicomponent PFAS sorption and desorption in common commercial adsorbents: Kinetics, isotherm, adsorbent dose, pH, and index ion and ionic strength effects. *Science of the Total Environment*, 904. <https://doi.org/10.1016/j.scitotenv.2023.166568>
- Umeh, A. C., Naidu, R., Olisa, E., Liu, Y., Qi, F., & Bekele, D. (2024). A systematic investigation of single solute, binary and ternary PFAS transport in water-saturated soil using batch and 1-dimensional column studies: Focus on mixture effects. *Journal of Hazardous Materials*, 461. <https://doi.org/10.1016/J.JHAZMAT.2023.132688>
- USEPA. (2021). *Analysis of Per- and Polyfluoroalkyl Substances (PFAS) in Aqueous, Solid, Biosolids, and Tissue Samples by LC-MS/MS*. July.
- van Genuchten, M. Th. (1980). A Closed-form Equation for Predicting the Hydraulic Conductivity of Unsaturated Soils. *Soil Science Society of America Journal*, 44(5), 892–898. <https://doi.org/10.2136/sssaj1980.03615995004400050002x>
- Vanderborght, J., Fetzer, T., Mosthaf, K., Smits, K. M., & Helmig, R. (2017). Heat and water transport in soils and across the soil-atmosphere interface: 1. Theory and different model concepts. *Water Resources Research*, 53(2), 1057–1079. <https://doi.org/10.1002/2016WR019982>
- VMR. (2022). Håndbog om undersøgelse og afværgelse af forurening med PFAS-forbindelser. 1, 1, 7–154.
- Wallis, I., Hutson, J., Davis, G., Kookana, R., Rayner, J., & Prommer, H. (2022). Model-based identification of vadose zone controls on PFAS mobility under semi-arid climate conditions. *Water Research*, 225, 119096. <https://doi.org/10.1016/J.WATRES.2022.119096>
- Yan, P. F., Dong, S., Pennell, K. D., & Cápiro, N. L. (2024). A review of the occurrence and microbial transformation of per- and polyfluoroalkyl substances (PFAS) in aqueous film-

forming foam (AFFF)-impacted environments. *Science of the Total Environment*, 927(March). <https://doi.org/10.1016/j.scitotenv.2024.171883>

Zeng, J., & Guo, B. (2021). Multidimensional simulation of PFAS transport and leaching in the vadose zone: Impact of surfactant-induced flow and subsurface heterogeneities. *Advances in Water Resources*, 155, 104015. <https://doi.org/10.1016/j.advwatres.2021.104015>

Zeng, J., & Guo, B. (2023). Reduced Accessible Air–Water Interfacial Area Accelerates PFAS Leaching in Heterogeneous Vadose Zones. *Geophysical Research Letters*, 50(8). <https://doi.org/10.1029/2022GL102655>

Bilag 3: Overblik over tilgængelige estimeringsmodeller, som kan bestemme relevante fysisk- kemiske parametre for PFAS som input i transport-modeller

1. Introduktion

Nærværende bilag er udarbejdet af Rune Hjorth, DTU Sustain.

De fleste per- og polyfluoralkylforbindelser (PFAS) er overfladeaktive og fordeler sig derfor ikke i miljøet på samme vis, som man normalt antager for neutrale stoffer. Af samme grund kan deres skæbne sjældent forudsiges ved hjælp af oktanol-vand fordelingskoefficienten (K_{ow}). Fordelingskoefficienten mellem organisk carbon og vand (K_{oc}), der ikke er estimeret på baggrund af K_{ow} , beskriver bedre deres opførsel i miljøet, selvom mekanismerne bag PFAS sorption og retention endnu ikke er fuldt belyst. Særligt for denne stofgruppe er grænsefladen (interfacen) mellem luft og vand vigtigt i den umættede zone, hvor PFAS fordeler sig imellem porevandet og poreluften (Guelfo et al., 2021).

I det nedenstående gives der et overblik over mulighederne for at estimere relevante fysisk-kemiske egenskaber for PFAS generelt med fokus på K_{oc} og luft-vand fordelingskoefficienten (K_{aw}). Der findes et meget stort antal af modeller og estimeringsprogrammer, og nedenstående skal ikke ses som en komplet oversigt, men blot et udsnit af de vigtigste og mest anvendte modeller.

Parameterliste

Organisk kulstof-vand fordelingskoefficient	K_{oc}
Luft-vand fordelingskoefficient	K_{aw}
Adsorptionskoefficienten til luft-vand grænsefladen	K_{ia}

2. OECD (Q)SAR principper

Modeller til at estimere stofegenskaber omtales typisk som (quantitative) structure activity relationships ('(Q)SAR') modeller. I 2007 formulerede OECD fem principper for (Q)SAR validering til regulatorisk brug (OECD, 2007). OECD skriver:

'To facilitate the consideration of a (Q)SAR model for regulatory purposes, it should be associated with the following information:

1. a defined endpoint
2. an unambiguous algorithm
3. a defined domain of applicability
4. appropriate measures of goodness-of-fit, robustness and predictivity
5. a mechanistic interpretation, if possible."

Simplificeret kan man sige, at OECD principperne beskriver en veludviklet og vellykket (Q)SAR model som karakteriseret ved at være transparent i sin opbygning (og derved reproducerbar), udvise nøjagtighed i forudsigelser som er tæt på den eksperimentelle reproducerbarhed, være grundigt og korrekt valideret samt at have et veldefineret gyldighedsområde (applikationsdomæne). Det er vigtigt at huske at selv gode, veludviklede modeller med høj sandsynlighed vil give utroværdige forudsigelser for stoffer, der ikke er velrepræsenteret i det bagvedliggende træningssæt.

3. Estimeringsmodeller og sammenligning med eksperimentelle data

De mest anvendte modeller til estimering af fysisk-kemiske parametre stammer fra “Estimation Programs Interface Suite” (EpiSuite), der er delvist udviklet af de amerikanske miljømyndigheder (US EPA). Den danske (Q)SAR database på DTU (<https://gsar.food.dtu.dk>) anvender ligeledes EpiSuite modellerne til deres fysisk-kemiske estimationer.

EpiSuite indeholder en lang række estimeringsmodeller, herunder:

- KOWWIN (Kow)
- KOCWIN (Koc)
- WSKOWWIN og WATERNT (vandopløselighed)
- HENRYWIN (Henrys lov konstant)
- MPBPVP (smeltepunkt, kogepunkt, damptryk)
- KOAWIN (oktanol-air fordelingskoefficient, Koa)

Det britiske miljøagentur identificerede i 2023 en række perfluorerede kulbrinter (PFC) i træningssættene og valideringssættene til de fysisk-kemiske modeller i EpiSuite (Environment Agency, 2023) - se tabel 1. Få af modellerne indeholder PFCer i både trænings- og valideringssættene.

Tabel 1. Overblik over perfluorerede kulbrinter (PFC) i trænings- og valideringssættene til de fysisk-kemiske modeller i EpiSuite. Fra Environment Agency (2023).

EpiSuite model	Endpoint	Træningssæt	Valideringssæt
MPBPVP v 1.42	Smeltepunkt, Kogepunkt, Damptryk	tetrafluoromethane	Ikke tilgængeligt
		hexafluoroethane	
		tetrafluoroethylene	
		octafluoropropane	
		hexafluoropropene	
		decafluorobutane	
		perfluorocyclobutane	
		perfluoro-n-hexane perfluorocyclohexane	
		perfluoroheptane	
		perfluoromethylcyclohexane	
WSKOWWIN v 1.41	Vandopløselighed	Ingen	octafluoropropane
			octafluorocyclobutane
WATERNT 1.01	Vandopløselighed	trifluoromethane	tetrafluoromethane
			hexafluoroethane
			octafluoropropane
			perfluorocyclobutane
			tetrafluoroethylene

KOAWIN v 1.1	Koa	Bruger KOWWIN og HENRYWIN databaser	
KOCWIN v 1.66	Koc	Ingen	Ingen
KOWWIN v 1.67	Kow	tetrafluoromethane hexafluoroethane	perfluorocyclohexane
HENRYWIN v 3.1	Henrys lov konstant	tetrafluoromethane hexafluoroethane tetrafluoroethene	octafluoropropane perfluorocyclobutane

Udover EpiSuite, eksisterer der en lang række af model-systemer, der anvendes til at estimere fysisk-kemiske egenskaber herunder OPERA, EUSES, ClogP, ACD/Labs, T.E.S.T, NICEATM, SPARC og COSMOtherm. De varierer i deres tilgang til modelleringen – nogle modeller, som OPERA, anvender ikke lineær-regression, men laver i stedet forudsigelser på baggrund af stoffer med strukturelle ligheder (såkaldt 'k-nearest neighbors algorithm' (k-NN)). For andre modelsystemer, såsom det kommercielle ACD/Labs, er trænings- og valideringsstofferne ikke offentligt tilgængelige, men kræver at man tegner en licens (Environment Agency, 2023), og uden det kan det derfor være svært at vurdere brugbarheden af modellen, som beskrevet i OECD principperne jf. afsnit 2. Yderligere, er der også mere teoretiske modeller, som COSMOtherm, der ikke er bygget på et træningssæt og derfor har været anset som et vigtigt værktøj for PFAS, da mange andre værktøjer er undermineret af fraværet af PFAS i træningssættet. COSMOtherm estimerer i stedet fysisk-kemiske egenskaber på baggrund af termodynamiske og kvante-kemiske simuleringer af stoffers opførelse i et givent solvent/miljø.

I litteraturen er der lavet flere undersøgelser af de tilgængelige modeller ift. deres evne til at forudsige PFAS-egenskaber. Arp et al. (2006) sammenlignede fysisk-kemiske forudsigelser for EpiSuite (Kow, Kaw, Koa, damptryk), ClogP (Kow), SPARC (Kow, Kaw, Koa, damptryk) og COSMOtherm (Kow, Kaw, Koa, damptryk) med eksperimentelle data primært for fluortelomere som 6:2 FTS og enkelte perfluoralkylsyre (som PFOA). COSMOtherm og SPARC klarede sig generelt bedst og havde forudsigelser typisk inden for en faktor 10 i forhold til de eksperimentelle værdier. Arp et al. (2006) konkluderede, at EpiSuite og ClogP ikke bør bruges for PFAS grundet store afvigelser fra eksperimentelle data (eksempler på afvigelser over en faktor 10.000), og for at få en god forståelse for transport af PFAS i miljøet er troværdige eksperimentelle værdier nødvendige.

Tre år senere, rapporterede Rayne & Forest (2009), at forudsigelser fra EpiSuite og SPARC var blevet markant bedre for de fluortelomere og sulfonamider som N-MeFOSE og N-EtFOSE, der var med i Arp et al. (2006) analysen. Det er uklart, hvad forbedringen skyldes, men ifølge Rayne & Forest (2009) er der ikke tale om generelle forbedringer i programmerne, men i stedet en delvis 'reparametrisering' af modellerne til at tage højde for de enkelte stoffer, hvor der var påvist store afvigelser i forudsigelserne. Ligesom Arp et al. (2006) konstaterer Rayne & Forest (2009) også, at de nuværende computer-baserede estimeringsmetoder ikke er tilstrækkelige for troværdige multimedie modelling og risikovurdering.

I 2011 publicerede Wang et al. (2011) fysisk-kemiske COSMOtherm forudsigelser (damptryk, Kaw, Kow, Koa, vandopløselighed og opløselighed i oktanol) for 130 PFAS, hovedsageligt perfluoralkylsyre og deres precursors og intermediater. Wang et al. (2011) rapporterede også forbedringer i COSMOtherm for fluorerede stoffer, med bedre estimerer for Kow og Koa end i Arp et al. (2006), men deres analyse beror også på andet, og potentielt bedre, eksperimentelle data.

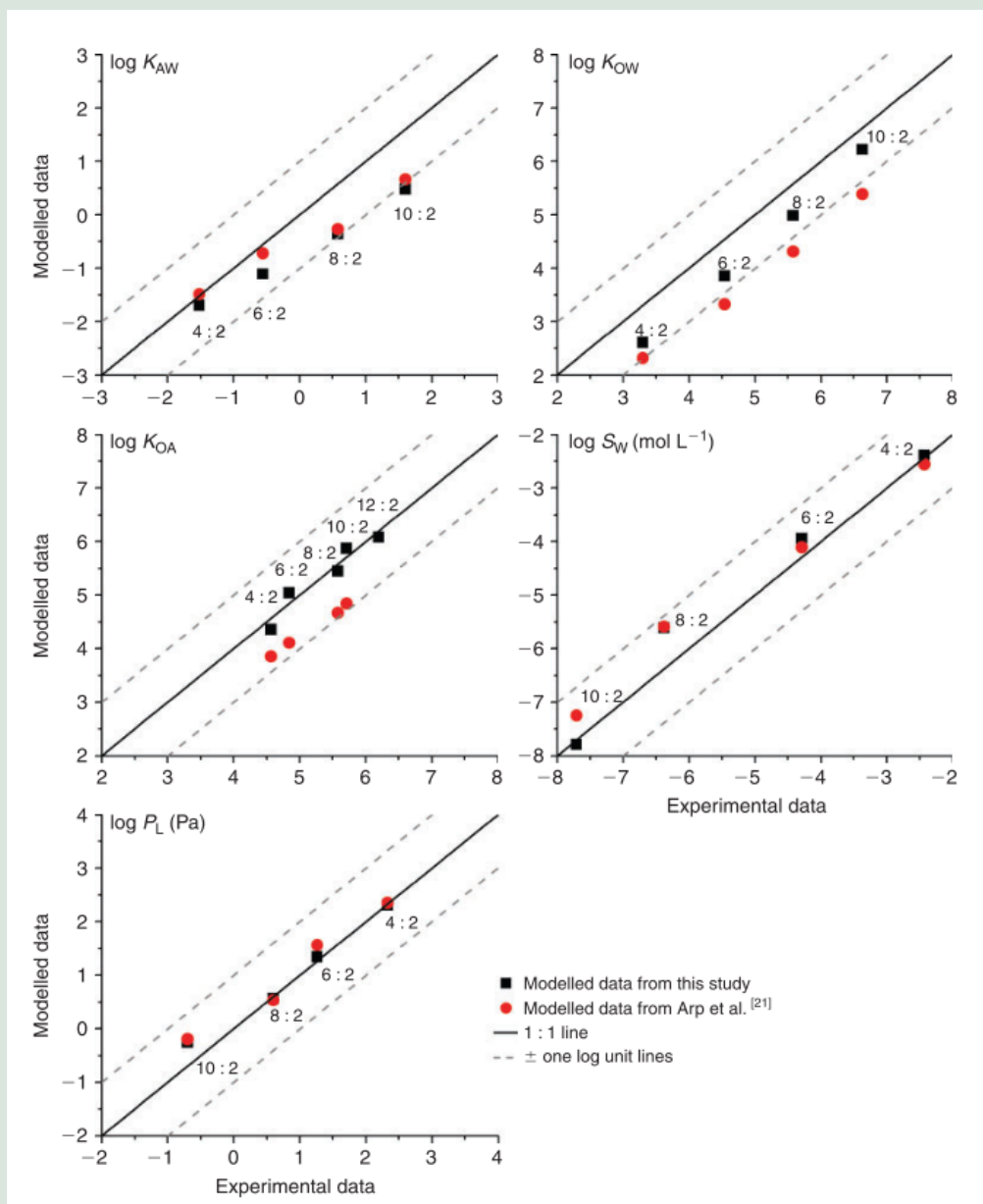
Modsat Rayne & Forest (2009), ser Wang et al. (2011) dog ikke en forbedring i EpiSuite modellerne og både bedre og dårligere forudsigelser i SPARC. De konkluderer derfor, at COSMOtherm er den bedste af modellerne, i hvert fald for de fluortelomere hvor man kan sammenligne med eksperimentelle data. Ligesom i den oprindelige Arp et al. (2006) analyse finder de

en 'tolerabel' afvigelse med under en faktor 10 mellem forudsigelserne og eksperimentelle data (se Figur 1).

En stor begrænsning i COSMOtherm er, at modellen kun kan estimere stofegenskaber for neutrale stoffer, hvilket er særligt relevant for perfluoralkylsyrerne, der under miljørelevante forhold ofte vil være ladet/deprotoneret. Man kan estimere graden af protonering ved hjælp af syrestyrkeeksponenten (pK_a), men der er usikkerhed om pK_a -værdier for PFAS, specielt perfluorcarboxylsyrerne (Gomis et al., 2015; Wang et al., 2011). Der findes dog også modeller til at estimere pK_a -værdier for PFAS, f.eks. beskrevet i Murillo-Gelvez et al. (2023).

Wang et al., (2011) fremhæver også, at COSMOtherm modellen anser stoffer som 'monomere', og at modellen ikke beskriver den overfladeaktivitet PFAS kan have i grænsefladen mellem f.eks. luft og vand, hvor der kan opstå aggregering. Denne begrænsning må dog antages at være universel, medmindre en model specifikt beskriver, at den er i stand til at dække denne type interaktion. I samme tråd som flere af de andre studier konkluderer Wang et al., (2011) at de fysisk-kemiske estimeringer fra dette studie, ikke er tilstrækkelige til at beskrive opførelsen af PFAS i transport modeller.

Fire år senere, publicerer forskere fra samme forskningsgruppe, fysisk-kemiske forudsigelser for 'emerging' PFAS-grupper som perfluoroether carboxylsyrere og perfluoroether sulfonsyrere med SPARC og COSMOtherm, med samme forbehold for usikkerhed i modellerne (Gomis et al., 2015).



Figur 1. Modelleret fysisk-kemisk data for fluortelomer alkoholerne 4:2, 6:2, 8:2 og 10:2 fra COSMOtherm i Wang et al., (2011) og Arp et al., (2006) sammenlignet med eksperimentelle data. Fra Wang et al., (2011).

I 2023 udviklede den Amerikanske Miljøstyrelse (US EPA) flere modeller i WebTEST2.0 til estimering af seks fysisk kemiske egenskaber for PFAS, herunder vandopløselighed, damptryk og $\log K_{OW}$. For alle endpoints udviklede de både modeller, der er globale (indeholdende al træningsdata) og lokale (kun trænet på PFAS data). De globale modeller performede bedre for PFAS end de lokale modeller, men begge modeller klarede sig markant bedre end en global model uden PFAS data (Martin et al., 2023). US EPA skriver, at de fremadrettet vil kvalitetssikre PFAS træningssættet og på sigt genkøre modellerne.

Sosnowska et al. (2023) identificerede i alt 38 in silico modeller udviklet til PFAS, hvor hovedkriteriet i deres søgning var, at der indgik PFAS i modellens træningssæt. 22 af modellerne estimerer fysisk-kemiske endpoints, herunder fire modeller for damptryk, smeltepunkt, og kogepunkt, tre for vandopløselighed, en for K_{AW} , en for K_{OA} , en for K_{OW} og en for K_{OA} . Baseret

på de fem OECD-principper omtalt på side 1, vurderede forfatterne om modellerne var 'videnskabelige valide'. For de fysisk-kemiske endpoints blev 13 af de 22 modeller vurderet valide, herunder modellerne for damptryk (3 af de 4 modeller), smeltepunkt (3 ud af 4), kogepunkt (3 ud af 4), vandopløselighed (2 ud af 3), Kow (0 ud af 1), Kaw (0 ud af 1), Kia (1 ud af 1) og Koa (0 ud af 1). Deres kriterier for validitet synes dog umiddelbart høje, og flere hyppigt anvendte kommercielle modeller kunne også have problemer med at leve op til de opstillede krav, specielt til transparens.

I alt var der kun én af modellerne for vandopløselighed og én af modellerne for damptryk, der beskrev fyldestgørende udviklingen af modellen grundigt nok til, at forfatterne kunne reproducere modellen samt anvende modellen til at forudsige værdier for nye stoffer. For de resterende 11 valide modeller, var der nok information til at reproducere modellerne, men de manglende andre informationer, hvilket resulterede i, at forfatterne konkluderede, at de nok ikke skal bruges til at forudsige egenskaber for nye stoffer (Sosnowska et al., 2023). Generelt overholder modellerne OECD Princip 1 og 2, ved tydeligt at beskrive hvilket endpoints der modelleres, samt hvilke ligninger og deskriptorer der benyttes. De største identificerede problemer var for OECD Princip 3 og 4, da kun halvdelen beskrev et anvendelsesdomæne og mange af modellerne ikke er blevet korrekt valideret. Meget relevant konkluderer Sosnowska et al. (2023) at de eksisterende modeller ikke bidrager væsentligt til at beskrive PFAS transport eller deres skæbne i miljøet samt at der stadig er et behov for at udvikle videnskabelige valide modeller for samtlige fordelingskoefficienter, nedbrydningsrater, økotoksicitet og bioakkumulering for hele gruppen af PFAS, så det er muligt at modellere deres skæbne og transport.

3.1 Organisk kulstof-vand fordelingskoefficient

Den umiddelbart mest anvendte model i relation til estimering af Koc er KOCWIN i EpiSuite. Modellen er ifølge informationen i EpiSuite programmet bygget op om lineær regression baseret på 674 stoffer med eksperimentelle Koc-værdier, hvoraf 516 af dem er brugt til at træne modellen og de resterende 158 er brugt til validering af modellens forudsigelser³.

For KOCWIN er der ingen PFC'er i hverken træning- eller valideringssættet (tabel 1). Der er dog flere fluorerede stoffer i træningssættet men ingen poly- eller perfluorerede stoffer som PFOS (ECHA, 2019). I forbindelse med arbejdet for SVHC-identifikationen af GenX (HFPO-DA) som PMT-stof (persistent, mobilt og toksisk) blev troværdigheden af både MCI og log Kow KOCWIN forudsigelserne omtalt som 'begrænset' (ECHA, 2019), grundet manglende repræsentation af PFAS i modellen. OPERAs Koc model er bygget op med eksperimentelle data fra EpiSuite, og det kan derfor forventes, at det er meget begrænset, hvad der er af stoffer i den model, der deler strukturel lighed med PFAS.

³KOCWIN blev udviklet med statistiske relationer til strukturelle fragmenter, i form af såkaldte molecular connectivity index (MCI), og består af to lineære regressionsligninger, en for polære stoffer og en for ikke-polære stoffer. KOCWIN fik to tilsvarende regressionsligninger baseret på samme trænings- og valideringssæt, dog baseret på eksperimentelle log Kow-værdier. I MCI-modellen ligger forudsigelserne for træningssættet tæt op ad de eksperimentelle værdier, med en korrelationskoefficient (R²) på 0,967 for de polære og 0,900 for de ikke-polære stoffer. Valideringssættet på 158 stoffer havde en R² på 0,850. Modellen baseret på log Kow har en R² på 0,877 for de polære stoffer og 0,855 for de ikke-polære stoffer. Valideringssættet har en R² på 0,778. KOCWIN forudsigelserne er mere troværdig for stoffer med en molekylmasse (MW) mellem 32,04 og 665,02, hvilket er spændet af molekylmasserne repræsenteret i træningssættet.

Det britiske miljøagentur lavede i 2023 miljøvurderinger af ni PFAS udvalgt som repræsentative for forskellige typer og anvendelser af PFAS i Storbritannien⁴ (Environment Agency, 2023b). I rapporten estimerer de udvalgte fysiske-kemiske egenskaber⁵, herunder Koc, samt troværdigheden af estimeringerne. For ingen af de ni PFAS, vurderer de, at KOCWIN eller OPERA forudsigelserne er troværdige, grundet manglende PFAS i træningssættene. For nogle af de ni stoffer, udregnes der Koc-værdier i EUSES med modellen 'predominantly hydrophobics' (regressionsligning: $\log Koc = 0.81 \log Kow + 0.10$). Ingen af de 81 stoffer i EUSES træningssættet indeholder dog fluor (Environment Agency, 2023b), og modellens troværdighed for PFAS må anses som værende tvivlsom.

Det er også værd at bemærke at tilgangen med lineære regression, som er den mest anvendte, bliver udfordret i litteraturen. Coppola et al. (2022) fandt for eksempel, at eksperimentelle Koc-værdier er uafhængige af kædelængde for PFCAer med under seks CF₂-grupper, hvorefter Koc er lineært korreleret ved længere kædelængde. Brusseau (2023a) fandt samme mønster med højere Koc værdier for kortkædede PFAS i forhold til det forventede ved et lineært forhold mellem længde/masse og sorption. Han konkluderer, at de forhøjede værdier skyldes 'additional soil components and associated sorption mechanisms'. Og tilføjer: 'In such cases, the Koc becomes an apparent, lumped parameter that represents the combined contributions of all sorption mechanisms and soil components.'

Et af de ni vurderede stoffer i rapporten fra Environmental Agency, er F-53B, en perfluoroether sulfonsyre hvis egenskaber blev estimeret i COSMOtherm af Gomis et al., (2015) som omtalt ovenfor. Environmental Agency kunne ikke vurdere troværdigheden af forudsigelserne fra COSMOtherm (eller EpiSuite og OPERA modellerne som de også anvender) og giver alle forudsigelserne en klimisch score⁶ på 4 (not assignable) (Environment Agency, 2023a).

Lampic & Parnis (2020) sammenlignede en længere række af modeller (COSMOtherm, EpiSuite, NICEATM, ACD/labs, OPERA, TEST, LSER) for udvalgte PFAS for flere af de samme fysiske-kemiske egenskaber som i tidligere analyser, dog også med Koc data i fire modeller (COSMOtherm, EpiSuite, OPERA og LSER). Det var dog en begrænset analyse med tre fluorotelomer alkoholer (6:2, 8:2, 10:2), hvor afvigelserne generelt var en faktor 10 fra de eksperimentelle data. Resultaterne i Lampic og Parnis (2020) bekræfter også tidligere studiers resultater, herunder at COSMOtherm generelt performer udmærket ('well') og at EpiSuite modellerne generelt klarer sig dårligt i sammenligning med andre modeller.

Der findes Koc modeller udviklet specifikt for PFAS, som Jiang et al., (2022), som satte sig for at udvikle en Koc model for PFAS, der ville leve op til OECD principperne. Modellen er baseret på 18 PFAS (fra 8 forskellige stofgrupper) og består af 4 deskriptorer. De 18 stoffer er primært perfluorcarboxylsyrer samt et par perfluoralkylsulfonsyrer, og modellen er kun valideret med 4 stoffer (2 perfluorcarboxylsyrer, 1 perfluoralkylsulfonsyre og 1 klorineret polyfluorineret ether sulfonate). Da modellen kun er valideret med 4 stoffer, er det begrænset, hvor generelt

⁴Perfluoropropane (PFP), hexafluoropropene (HFP), perfluorodecalin (PFD), perfluoroisohexane (PFiHx), 1H-perfluorohexane, perfluoro(propyl vinyl ether) (PPVE), perfluorobutylethylene (PFBE), perfluoros[(2-ethoxy-2-fluoroethoxy)acetic acid], ammonium salt (EEA-NH₄), 6:2 Chlorinated polyfluorinated ether sulfonate, 6:2 Cl-PFESA (F-53B).

⁵Af relevans for vand-luft grænsefladen, kiggede Environmental Agency også på modeller fra T.E.S.T. og ACD/Labs der kan forudsige stoffernes overfladespænding. De valgte dog ikke at anvende dem, da de mener at modellerne forudsiger stoffets egen overfladespænding, og ikke overfladespændingen i en vandig opløsning (Environment Agency, 2023a).

⁶Klimischscore er en metode udviklet af BASF i 1997 der bruges til at vurdere troværdigheden af en lang række studier, primært studier i toksikologi, økotoksikologi samt kemikaliers skæbne og transport. Troværdighedsvurderinger laves i dag med forskellige værktøjer og kan også bruges til at vurdere troværdigheden af f.eks en (Q)SAR forudsigelse.

anvendeligt den er, særligt når den samtidig er forholdsvis kompliceret (kræver input fra 4 deskriptorer).

Manglen på gode modeller for Koc er dog vejet op af, at der findes en del eksperimentelle sorptionsdata for de mest gængse PFAS. Rapporten fra Miljøstyrelsen, der fastlægger kvalitetskriterier for vandmiljøet for de 24 PFAS (MST, 2023), indeholder for eksempel en datasamling fra Europa-Kommissionens Fælles Forskningscenter (JRC) med eksperimentelle Koc og Kd data for de fleste af stofferne. Der eksisterer også databaser med eksperimentelle sorptionsdata for PFAS, som f.eks. ITRC databasen.

3.2 Luft-vand fordelingskoefficient og luft-vand grænseflade

Modellen for adsorptionskoefficienten til luft-vand grænsefladen (Kia) der blev vurderet valid af Sosnowska et al. (2023), er fra (Brusseau, 2019). Modellen har et træningssæt på 10 perfluorcarboxylsyre og 5 perfluoralkylsulfonsyre og et eksternt valideringssæt på 39 stoffer, som udviser langt større strukturel diversitet end træningssættet, herunder ikke-ioniske PFAS, fluorotelomer alkoholer og overflade aktive kulhydrater. For nogle stoffer i valideringssættet valideres modellen også med stoffer repræsenteret med adsorptionskoefficienter for olie-vand grænsefladen i stedet for Kia, hvilket normalt ikke er tilrådeligt. Modellen er en lineær regression udtrykt ved $\log Kia = 0.021 (\pm 0.002) \times V_m - 8.56 (\pm 0.42)$, hvor V_m er den molare volumen. Modellen repræsenterer træningssættet godt med en korrelationskoefficient (R^2) på 0,98. Brusseau (2019) rapporterede valideringen som en regression på hele trænings- og valideringssættene med en R^2 på 0,94 og en mean squared error (MSE) på 0,17. Han konstaterer selv tre signifikante fejl i forudsigelserne med MSE-værdier over 1. Det er for begge alkoholer i valideringssættet (8:1 fluorotelomer alkohol og perfluorooktan-1,8-diol) samt Na-undecafluorooktan-sulfonat. Han spekulerer i, at fejlkilden for alkoholerne er tilstedeværelsen af en OH-gruppe, der kan lave hydrogenbindinger og derfor vil opføre sig anderledes i opløsning og i grænsefladen. Det er uklart, hvorfor polyfluoroalkylen forudsiges dårligt, da de andre polyfluoroalkyler forudsiges 'udmærket' (Brusseau 2019). I evalueringen af modellen i Sosnowska et al., (2023) kritiseres den også primært for ikke at have et defineret applikationsdomæne, samt valideringen af modellen.

Senere samme år beskriver Brusseau & Van Glubt (2019), at modellen giver 'rimelige' estimater for zwitterioner og andre overfladeaktive PFAS. Dog overvurderer modellen Kia for neutrale stoffer med store 'headgroups'. De viser også, at ionstyrken kan påvirke værdierne for PFAS med en faktor 10 eller mere. De reviderer derfor modellen ved at tilføje data med højere ionstyrke og de laver tilsvarende en ny regressionslinje. I 2021, opdaterer Brusseau & Van Glubt (2021) modellen igen og resultaterne fra modellen er sammenlignet med overfladespænding målinger og vurderes at være repræsentativ for en lang række PFAS med en korrelationskoefficient (r^2) på 0,965.

Endnu en revision bliver publiceret i 2023, for at forbedre modellen for PFAS med store, ikke fluorerede kæder (Brusseau, 2023b). Udover deskriptoren for molare volume, indeholder den en headgroup-to-tail molare volume ratio. Han anbefaler, at man stadig bruger en-deskriptor modellen fra Brusseau & Van Glubt (2021) til de fleste PFAS og kun anvender den reviderede til PFAS med store headgroups. I Lyu et al. (2022), hvor Brusseau er medforfatter, påvises det, at en-deskriptor modellen er retvisende for C4-C10 perfluorcarboxylsyre (bl.a. PFOA). De viser også, at antallet af fluorerede kulstofsatomer er en god deskriptor for Kaw for denne homogene gruppe som også påvist i Lyu et al. (2018), men anbefaler modellen baseret på molare volume som en mere robust model, der er gyldig for større spænd af PFAS strukturer.

For PFAS 22, er både de korte og lange perfluorcarboxylsyre og perfluoralkylsulfonsyre godt repræsenteret i Brusseau modellerne, men de to precursorer (PFOSA og 6:2 FTS) er umiddelbart ikke evalueret i deres modeller.

Fra de generelle sammenligninger af estimeringsmodeller for Kaw (afsnit 3), er den overordnede konklusion, at COSMOtherm klarer sig bedst, med de nævnte forbehold. I 2023, bestemte Endo et al. (2023) eksperimentelt 21 Kaw-værdier for PFAS og sammenlignede dem med forudsigelser fra COSMOtherm, EpiSuite, OPERA og LSER. Igen klarede den teoretiske model, COSMOtherm, sig bedre end de andre empiriske modeller. Endo et al. (2023) publicerede også Kaw COSMOtherm forudsigelser for 222 PFAS, som de benævner de p.t. bedste estimater for praktisk og regulatorisk brug. Samme år publicerede Endo (2023) yderligere COSMOtherm forudsigelser for de 222 PFAS herunder Kow og Koa. I samme publikation viser Endo (2023) at LSER og COSMOtherm forudsigelserne for Kaw, Kow, Koa generelt stemmer overens, hvilket øger troværdigheden af begge modeller da deres tilgang til estimeringerne er forskellig og modellerne er udviklet baseret på forskellige principper.

4. Konklusion

For fysisk-kemiske egenskaber for PFAS er det tydeligt, at estimeringsmodeller har haft en ret begrænset anvendelse grundet nogle af de udfordringer, der nævnes i ovenstående. Den største udfordring er, at PFAS er dårligt repræsenteret i det underliggende data, der har trænet og/eller valideret modellerne. Dette er ikke kun et problem for fysisk-kemiske modeller, men for langt størstedelen af miljøkemiske og (øko)toksikologiske endpoints.

Litteraturen viser at klassiske empiriske modeller, performer dårligt for PFAS. Særligt EpiSuite, hvilket er problematisk, da EpiSuite modellerne er hyppigt anvendt til at estimere fysisk-kemiske egenskaber, herunder også i PFAS-håndbogen. MST modellen Jord, Afdampning, Gas, Grundvand (JAGG), anvender også fysisk-kemiske data herfra, men det er uklart om det også gælder estimerer fra EpiSuite, da det ikke er opgjort i PFAS-håndbogen hvilke estimerer der stammer fra EpiSuite.

Det kommercielle og teoretiske program COSMOtherm fremhæves ofte i litteraturen som den bedste model, men det kan være svært at vurdere troværdigheden (reliability) af forudsigelserne. De senere år er der kommet flere empiriske modeller udviklet specifikt for PFAS, men de har sjældent tydelige applikationsdomæner, og de kunne også være valideret bedre. Mange publikationer konkluderer, at (Q)SAR modeller (endnu) ikke er gode nok til at blive brugt som input i modeller til at bestemme PFAS transport og skæbne, og at man bør benytte troværdige eksperimentelle data i stedet.

Der er dog efterhånden også en del eksperimentelle data for mange typer af PFAS. Rapporten fra Miljøstyrelsen, der fastlægger kvalitetskriterier for vandmiljøet for de 24 PFAS (MST, 2023), indeholder for eksempel en datasamling fra JRC med eksperimentelle data for de fleste af stofferne. SVHC-identifikationerne af GenX (HFPO-DA), PFBS og PFHpA kan også nævnes som gode opsummeringer af eksperimentelle data, og det er tydeligt, at der regulatorisk lægges stor vægt på read across til at estimere fysisk-kemiske egenskaber, i stedet for estimeringsmodeller, i fraværet af eksperimentelle data.

Da der løbende kommer ny viden, bør man i dokumenter og programmer som PFAS-håndbogen og JAGG, hvor man anvender estimerer for PFAS-egenskaber, undersøge om der i dag er bedre eksperimentelle data, og hvis ikke, om man benytter de bedste estimerer.

5. Referencer

- Arp, H. P. H., Niederer, C., & Goss, K. U. (2006). Predicting the partitioning behavior of various highly fluorinated compounds. *Environmental Science and Technology*, 40(23), 7298–7304. <https://doi.org/10.1021/es060744y>
- Brusseau, M. L. (2019). The influence of molecular structure on the adsorption of PFAS to fluid-fluid interfaces: Using QSPR to predict interfacial adsorption coefficients. *Water Research*, 152, 148–158. <https://doi.org/10.1016/j.watres.2018.12.057>
- Brusseau, M. L. (2023a). Differential Sorption of Short-Chain versus Long-Chain Anionic Per- and Poly-Fluoroalkyl Substances by Soils. *Environments - MDPI*, 10(10). <https://doi.org/10.3390/environments10100175>
- Brusseau, M. L. (2023b). QSPR-based prediction of air-water interfacial adsorption coefficients for nonionic PFAS with large headgroups. *Chemosphere*, 340. <https://doi.org/10.1016/j.chemosphere.2023.139960>
- Brusseau, M. L., & Van Glubt, S. (2019). The influence of surfactant and solution composition on PFAS adsorption at fluid-fluid interfaces. *Water Research*, 161, 17–26. <https://doi.org/10.1016/j.watres.2019.05.095>
- Brusseau, M. L., & Van Glubt, S. (2021). The influence of molecular structure on PFAS adsorption at air-water interfaces in electrolyte solutions. *Chemosphere*, 281. <https://doi.org/10.1016/j.chemosphere.2021.130829>
- Coppola, G., Polesello, S., Ferrario, C., Peruzzo, M., Lava, R., & Mazzola, M. (2022). Does the partitioning of perfluoroalkyl acids to soil depend on their chain length? In *Integrated Environmental Assessment and Management* (Vol. 18, Issue 6, p. 1747). John Wiley and Sons Inc. <https://doi.org/10.1002/ieam.4692>
- ECHA. (2019). SVHC identification of 2,3,3,3-tetrafluoro-2-(heptafluoropropoxy)propanoic acid, its salts and its acyl halides (covering any of their individual isomers and combinations thereof). Annex XV report. . Available at: <https://www.Echa.Europa.Eu/Documents/10162/Ef1b1606-B234-2ce5-E159-2ab89d61bffc>.
- Endo, S. (2023). Intermolecular Interactions, Solute Descriptors, and Partition Properties of Neutral Per- and Polyfluoroalkyl Substances (PFAS). *Environmental Science and Technology*, 57(45), 17534–17541. <https://doi.org/10.1021/acs.est.3c07503>
- Endo, S., Hammer, J., & Matsuzawa, S. (2023). Experimental Determination of Air/Water Partition Coefficients for 21 Per- and Polyfluoroalkyl Substances Reveals Variable Performance of Property Prediction Models. *Environmental Science and Technology*, 57(22), 8406–8413. <https://doi.org/10.1021/acs.est.3c02545>
- Environment Agency. (2023a). *Environmental risk evaluation report: Potassium 9-chlorohexadecafluoro-3-oxanonane-1-sulfonate [F-53B]* (CAS no. 73606-19-6). www.gov.uk/environment-agency

Environment Agency. (2023b). Environmental risk evaluation reports: Per- and polyfluoroalkyl substances (PFAS). . Available at <https://www.gov.uk/government/publications/environmental-risk-evaluation-reports-per-and-polyfluoroalkyl-substances-pfas>.

Gomis, M. I., Wang, Z., Scheringer, M., & Cousins, I. T. (2015). A modeling assessment of the physicochemical properties and environmental fate of emerging and novel per- and polyfluoroalkyl substances. *Science of the Total Environment*, 505, 981–991. <https://doi.org/10.1016/j.scitotenv.2014.10.062>

Guelfo, J. L., Korzeniowski, S., Mills, M. A., Anderson, J., Anderson, R. H., Arblaster, J. A., Conder, J. M., Cousins, I. T., Dasu, K., Henry, B. J., Lee, L. S., Liu, J., McKenzie, E. R., & Willey, J. (2021). Environmental Sources, Chemistry, Fate, and Transport of Per- and Polyfluoroalkyl Substances: State of the Science, Key Knowledge Gaps, and Recommendations Presented at the August 2019 SETAC Focus Topic Meeting. In *Environmental Toxicology and Chemistry* (Vol. 40, Issue 12, pp. 3234–3260). John Wiley and Sons Inc. <https://doi.org/10.1002/etc.5182>

Lampic, A., & Parnis, J. M. (2020). Property Estimation of Per- and Polyfluoroalkyl Substances: A Comparative Assessment of Estimation Methods. *Environmental Toxicology and Chemistry*, 39(4), 775–786. <https://doi.org/10.1002/etc.4681>

Lyu, Y., Brusseau, M. L., Chen, W., Yan, N., Fu, X., & Lin, X. (2018). Adsorption of PFOA at the Air-Water Interface during Transport in Unsaturated Porous Media. *Environmental Science and Technology*, 52(14), 7745–7753. <https://doi.org/10.1021/acs.est.8b02348>

Lyu, Y., Wang, B., Du, X., Guo, B., & Brusseau, M. L. (2022). Air-water interfacial adsorption of C4-C10 perfluorocarboxylic acids during transport in unsaturated porous media. *Science of the Total Environment*, 831. <https://doi.org/10.1016/j.scitotenv.2022.154905>

Martin, T., Ramsland, C., Charest, N., Lowe, C., & Williams, A. (2023). Estimation of physicochemical properties for PFAS (Per- and Polyfluoroalkyl substances) using WebTEST 2.0. *20th International Workshop on (Q)SAR in Environmental and Health Sciences*.

Murillo-Gelvez, J., Dmitrenko, O., Torralba-Sanchez, T. L., Tratnyek, P. G., & Di Toro, D. M. (2023). pKa prediction of per- and polyfluoroalkyl acids in water using in silico gas phase stretching vibrational frequencies and infrared intensities. *Physical Chemistry Chemical Physics*, 25(36), 24745–24760. <https://doi.org/10.1039/d3cp01390a>

OECD. (2007). *ENV/JM/MONO(2007)2 2 OECD Environment Health and Safety Publications Series on Testing and Assessment No. 69 GUIDANCE DOCUMENT ON THE VALIDATION OF (QUANTITATIVE) STRUCTURE-ACTIVITY RELATIONSHIP [(Q)SAR] MODELS*.

Rayne, S., & Forest, K. (2009). Perfluoroalkyl sulfonic and carboxylic acids: A critical review of physicochemical properties, levels and patterns in waters and wastewaters, and treatment methods. In *Journal of Environmental Science and Health - Part A Toxic/Hazardous Substances and Environmental Engineering* (Vol. 44, Issue 12, pp. 1145–1199). <https://doi.org/10.1080/10934520903139811>

Sosnowska, A., Bulawska, N., Kowalska, D., & Puzyn, T. (2023). Towards higher scientific validity and regulatory acceptance of predictive models for PFAS. In *Green Chemistry* (Vol. 25, Issue 4, pp. 1261–1275). Royal Society of Chemistry. <https://doi.org/10.1039/d2gc04341f>

Wang, Z., MacLeod, M., Cousins, I. T., Scheringer, M., & Hungerbühler, K. (2011). Using COSMOtherm to predict physicochemical properties of poly- and perfluorinated alkyl substances (PFASs). *Environmental Chemistry*, 8(4), 389–398. <https://doi.org/10.1071/EN10143>

Bilag 4: Parameterliste

TABEL 1. Oversigt over de anvendte parametre i nærværende rapport.

Parameterbetegnelse	Beskrivelse	Enhed
K_{ia}	Adsorptionskoefficient til luft-vand grænsefladen	cm
A_{ia}	Luft-vand grænsefladearealet	cm ⁻¹
K_d	Sorptionskoefficient til jord	l/kg
K_{oc}	Fordelingskoefficient mellem organisk kulstof og vand	l/kg
f_{oc}	Fraktion af organisk stof	-
K_{ow}	Fordelingskoefficient mellem oktanol og vand	-
K_{aw}	Fordelingskoefficient mellem luft og vand	-
K	Hydraulisk konduktivitet	m/s
θ_t	Total porøsitet	-
θ_w	Vandindhold (vandmættet porøstet på volumen basis)	-
θ_r	Residualt vandindhold	-
S_w	Vandmætning	-
I	Infiltrationsrate	Typisk mm/år
P_c	Kappilartryk	Pa
α	van Genuchten parameter	cm ⁻¹
n	van Genuchten parameter	-
ρ_b	Bulk densitet	kg/l
ρ_s	Partikeldensiteten (2,65 kg/l)	kg/l
dh	Hydraulisk gradient	m/m
C_s	Koncentration sorberet	µg/kg
C_w	Koncentration opløst i vand	µg/l
C_{ia}	Koncentration bundet til luft-vand grænsefladen	µg/l
V_m	Molære volumen	cm ³ /mol
d_{50}	Median kornstørrelsen	Typisk mm eller cm
U	Uensformighedstallet (d_{60}/d_{10})	-
$NBET$	Nitrogen-Brunauer-Emmett-Teller	m ² /g
$NBSSA$	NBET Solid Surface Area	cm ⁻¹
v_p	Porevandshastigheden	m/år
D	Dispersiontensor	cm ² /s
C_0	Inletkoncentration	Typisk µg/l eller ng/l
α_L	Longitudinal dispersivitet	cm
R	Retardationsfaktor	-

Bilag 5: Modelparametre

Nærværende bilag giver et overblik over de anvendte parametre og parameterværdier, der er anvendt i modelsimuleringerne i rapporten.

Figur 26: van Genuchten model simuleringer

Parameter	Enhed	1: Sand	2: Smeltevandssand	3: Smeltevandssand
I	mm/år	200	200	200
θ_t	-	0,43	0,426	0,427
θ_r	-	0,045	0,044	0,14
α	cm ⁻¹	0,145	0,012	0,008
n	-	2,68	2,8	2,2
d_{50}	cm	0,0194	0,0194	0,0194
K	m/s	8,25e-5	8,93e-5	1,63e-5
D_0	cm ² /s	5,4e-6	5,4e-6	5,4e-6
α_L	cm	0,1	0,1	0,1

Figur 27: Infiltration og residualt vandindhold

Parameter	Enhed	2: Smeltevandssand, varierende I	2: Smeltevandssand, varierende θ_r
I	mm/år	1-100-200-500	200
θ_t	-	0,426	0,426
θ_r	-	0,044	0,02 – 0,044 – 0,06 – 0,08
α	cm ⁻¹	0,012	0,012
n	-	2,8	2,8
d_{50}	cm	0,0194	0,0194
K	m/s	8,93e-5	8,93e-5
D_0	cm ² /s	5,4e-6	5,4e-6
α_L	cm	0,1	0,1

Figur 28: Variation af det residuale vandindhold

Parametrene for smeltevandssand 2 anvendes.
 θ_r varieres: 0,04 - 0,06 - 0,08.

Parameter	Enhed	Br	PFBA	PFOA
K_d	l/kg	0	0,06	0,1
K_{ia}	cm	0	1,7e-6	5e-3

Figur 29: Varierende infiltrationsrate

Parametrene for smeltevandssand 2 anvendes.

Infiltrationsraten varieres: 100 – 200 mm/år.

Parameter	Enhed	PFBA	PFOA
K_d	l/kg	0,06	0,1
K_{ia}	cm	1,7e-6	5e-3

Figur 30: Varierende K_d for fokusstofferne

Parametrene for smeltevandssand 2 anvendes.

Parameter	Enhed	PFBA	PFHxA	PFOA	PFHxS	PFOS	6:2 FTS
K_d	l/kg	0	0	0	0	0	0
		0,01	0,01	0,01	0,1	1	0,1
		0,1	0,1	0,1	1	10	1
				1			
K_{ia}	cm	1,7e-6	2,2e-5	5e-3	9,7e-5	2e-2	1e-4

Figur 32: Varierende K_{ia} for fokusstofferne

Parametrene for smeltevandssand 2 anvendes.

Parameter	Enhed	PFBA	PFHxA	PFOA	PFHxS	PFOS	6:2 FTS
K_d	l/kg	0,06	0,08	0,1	0,3	1	1
K_{ia}	cm	0	0	0	0	0	0
		1e-6	1e-5	1e-4	1e-4	1e-2	1e-5
		1e-5	1e-4	1e-3	1e-3	1e-1	1e-4
		1e-4	1e-3	1e-2	1e-2		

Figur 34: Parameterværdier til modelopsætning med moræneler og sand

Parameter	Enhed	2: Smeltevandssand	Moræneler
I	mm/år	200	100
θ_t	-	0,426	0,303
θ_r	-	0,044	0,01
α	cm ⁻¹	0,012	0,0037
n	-	2,8	1,224
d_{50}	cm	0,0194	0,0015
K	m/s	8,93e-5	3e-7
D_0	cm ² /s	5,4e-6	5,4e-6
α_L	cm	0,1	0,1



Miljøstyrelsen
Tolderlundsvej 5
5000 Odense C

www.mst.dk