

PFAS: Per- & Polyfluor-Alkyl-Substanzen: Management von Umweltkontaminationen und Gesundheitsrisiken



Dr. Frank KARG / CEO (PDG) HPC INTERNATIONAL SAS / Frankreich

Scientific Director of HPC-Group International

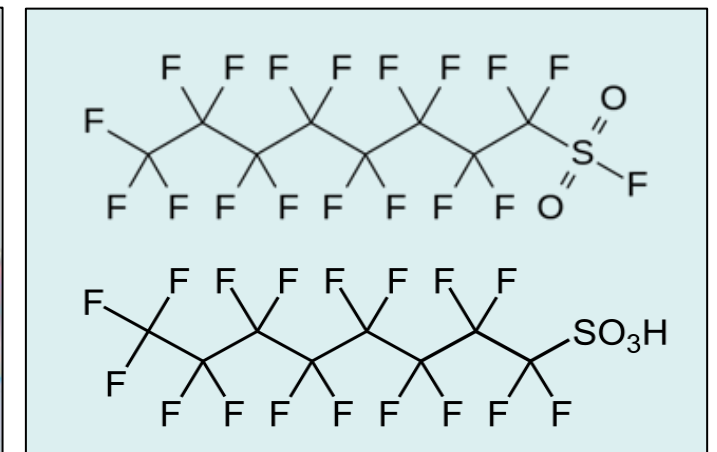
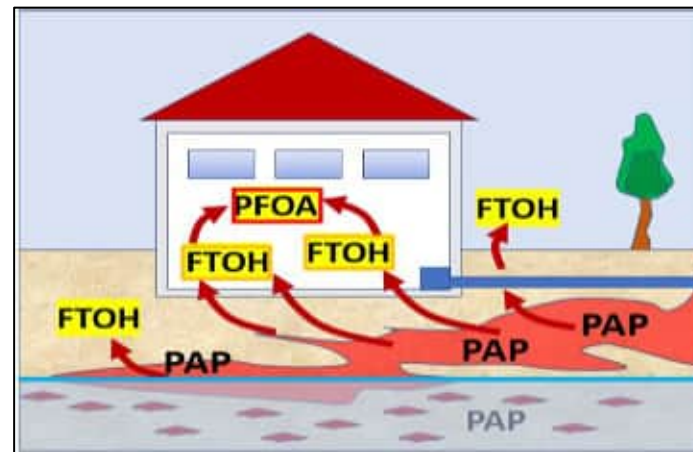
Tel: +33 (0) 607 346 916, E-Mail: frank.karg@hpc-international.com

Internationale Erfahrungen der PFAS-Quellendifferenzierung sowie Einzelbewertung per TERQ* der Vielstoffbelastungen gemäß BBodSchV § 15.4. für verhältnismäßige Sanierungen unter Berücksichtigung der flüchtigen Fluortelomeralkohole (FTOH).

(* Toxikologische Expositions-Risiko-Quantifizierung)

Dr. rer. Nat. Frank Karg: Wissenschaftlicher Direktor der HPC-Gruppe (INOGEN JV) und CEO der HPC INTERNATIONAL / Duisburg – Frankreich – Schweiz - Ungarn – Balkan etc.

E-Mail: frank.karg@hpc-international.com / Tel: 0033 607 346 916



PFAS (PFC, PFT):

1. Was sind PFAS?: Schadstoffbeschreibung
2. PFAS-Kontaminationsquellen
3. Umweltchemie
4. Toxikologie
5. Vorschriften & Grenzwerte
6. Untersuchungen & Risikobewertung
7. Behandlungen & Sanierung



PFAS (PFC, PFT):

- 1. Was sind PFAS?: Schadstoffbeschreibung**
- 2. PFAS-Kontaminationsquellen**
- 3. Umweltchemie**
- 4. Toxikologie**
- 5. Vorschriften & Grenzwerte**
- 6. Untersuchungen & Risikobewertung**
- 7. Behandlungen & Sanierung**

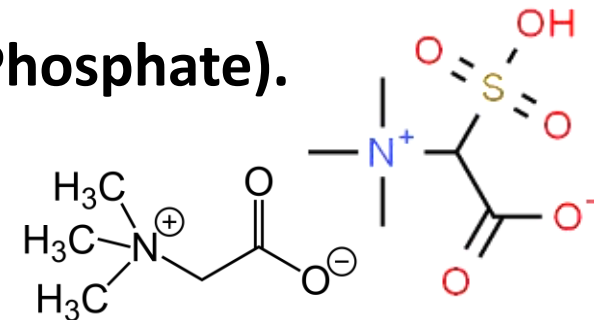


PFAS 1st Classification:

Characteristics	PFAS Polymers	PFAS Monomers
Chemical Reactivity:	none	important
Environmental Mobility:	none	Soluble and some volatile (FTOHs, etc.)
Solubility & Bio-disponibility:	none	Strong
Environmental Chemistry:	Strongly inert	Biotransformation of poly-fluorinated to per-fluorinated PFAS, pH & Eh dependent
Bioaccumulation:	none	Yes; compound dependent
Toxicity / Ecotoxicity:	Strongly inert	Multiple: hepato-, repro-, immuno-, neuro-, hemato-toxicity, etc.
Chemical analogues:	PVC	Vinyl chloride
Societal & Technological Importance:	<u>Very strong:</u> Medicine equipment, Electronics, Sealings, Confinement of chemicals, Climatization equipment & fridges, Car-industry, Aeronautic & Space Industry, Paints, Papers, Cartridges, etc.	Less strong: AFFF (Anti Fire Fighting Foams), Galvanization Additives, etc.

PFAS / PFC (PFT: Fluorinated Tensioactifs) enthalten hydrophile Gruppen (starke Löslichkeit):

- **Nichtionisch** (z. B. Polyethylenglykole, Acrylamidoligomere).
- **Anionisch** (z. B. Sulfonate, Sulfate, Sulfonyle, Carboxylate, Phosphate).
- **Kationisch** (z. B. Quartäres Ammonium).
- **Amphoterisch** (z. B. Betaine & Sulfobetaine): Base + Säure



- **Kommerzielle Produkte** enthalten hauptsächlich Gemische.
- **Die langkettigen Fluortelomere** (> C₈), die als Ersatz für PFOS & PFOA (verboten) verwendet werden, **werden im Untergrund u.a. in PFOA etc. umgewandelt.**
- **Kurzkettige PFAS** (< C₆) können nicht in PFOA oder PFOS umgewandelt werden.

PFAS: Per- & Polyfluor-Alkyl-Substanzen: Management von Umweltkontaminationen und Gesundheitsrisiken

**Minimum
33
Kategorien**

1. Perfluoralkan-sulfonsäure (PFASs),
2. Perfluoralkan-sulfonate (Salze),
3. Perfluoralkan-sulfinsäure /Sulfonate,
4. Perfluor-cycloalkan-sulfonsäure und Derivate,
5. Perfluoralkan-sulfonamide (FASAs),
6. Perfluoralkan-sulfonamide, und Salze des quaternären Ammoniums,
7. Perfluoralkan-sulfonamid-Acrylate (MeFASACs),
8. Methacrylate der Perfluoralkan-sulfonamide,
9. Perfluoralkan-sulfonamid-phosphate,
10. Halogenurate des Perfluoralkan-sulfonyls,
11. Polyfluoralkyl-Schwefelverbindungen,
12. Perfluoralkylcarboxylsäuren (PFCA),
13. Perfluoralkylcarboxylsäure-Salze,
14. Perfluoralkyl-Alkohole und -Ketone,
15. Halogenurate der Perfluoralkylcarboxylsäuren,
16. Perfluoroalkyl-halogenurate (Harnstoffe),
17. Perfluoroalkyl-alkyl-ether,
18. Perfluoralkyl-amine,
19. Perfluoralkyl-aminosäuren/-Salze/-Ester,
20. Perfluoralkyl-phosphate,
21. Perfluoralkyl-acrylate,
22. Perfluoralkyl-methacrylate,
23. Perfluoralkyl-carboxylsäure-Ester,
24. Perfluoralkyl-Heterocyclen,
25. Perfluoralkyl-silane,
26. Fluortelomer-Alkohole (FTOH),
27. Fluortelomer-halogenide,
28. Fluortelomer-sulfonate, -Sulfonylchloride und -Sulfonamide,
29. Fluortelomer-Acrylate,
30. Fluortelomer-Methylacrylate,
31. Weitere Fluortelomer-Acrylate,
32. Fluortelome-phosphate,
33. Weitere fluorotelomere.

Es existieren über 9 000 PFAS !

PFAS (PFC, PFT):

1. Was sind PFAS?: Schadstoffbeschreibung
2. PFAS-Kontaminationsquellen
3. Umweltchemie
4. Toxikologie
5. Vorschriften & Grenzwerte
6. Untersuchungen & Risikobewertung
7. Behandlungen & Sanierung

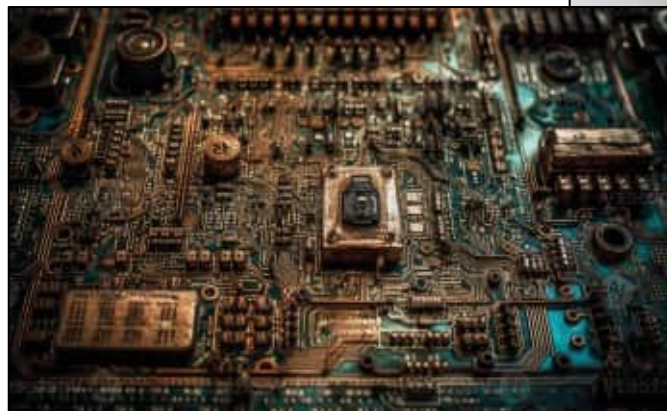
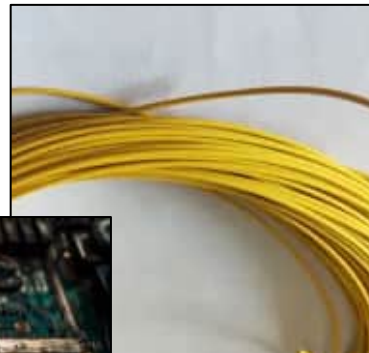


Produktion & Verwendung
seit 1960

- Galvanisierung
- Herstellung von Textilien
- Lebensmittelverpackung (Polymere)
- Oberflächenbehandelte Papiere & Kartons usw.
- Raffinerien, Fotoindustrie
- Baumaterial (Beton): zum Beispiel. C8-C20-Gamma-Omega-Perfluor Thiole)
- Elektronikmodule & Halbleiter
- Hydrauliköle
- Herstellung von Teflon (Fluorpolymeren)
- Feuerlöschschäume (AFFF)

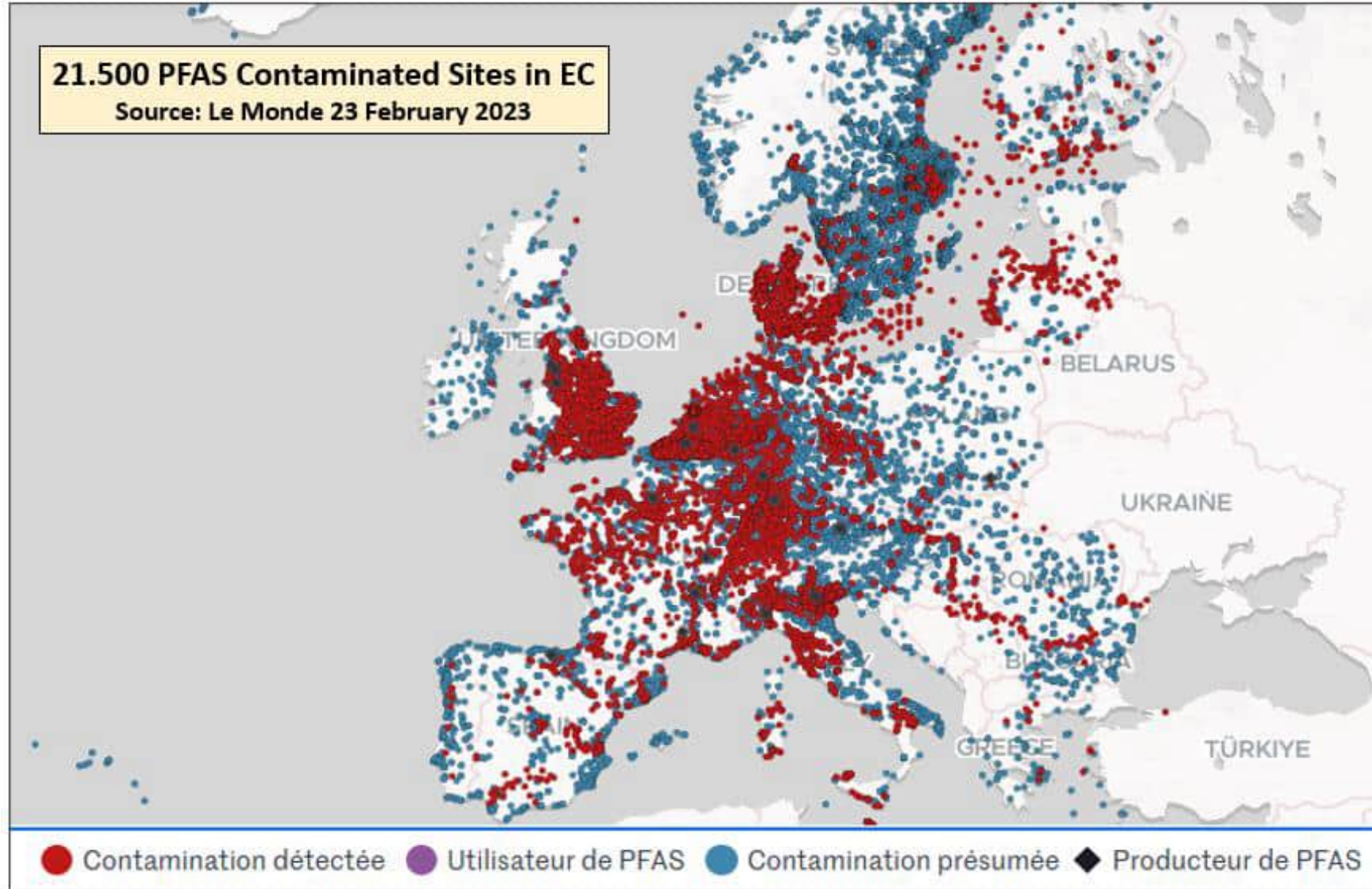


Löschschaumanwendungen
Airport Fire Fighting Foams
(AFFF): Air Base BA 103 (700 ha)



PFAS: Per- & Polyfluor-Alkyl-Substanzen: Management von Umweltkontaminationen und Gesundheitsrisiken

**PFAS:
Situation
Anfang
2023**

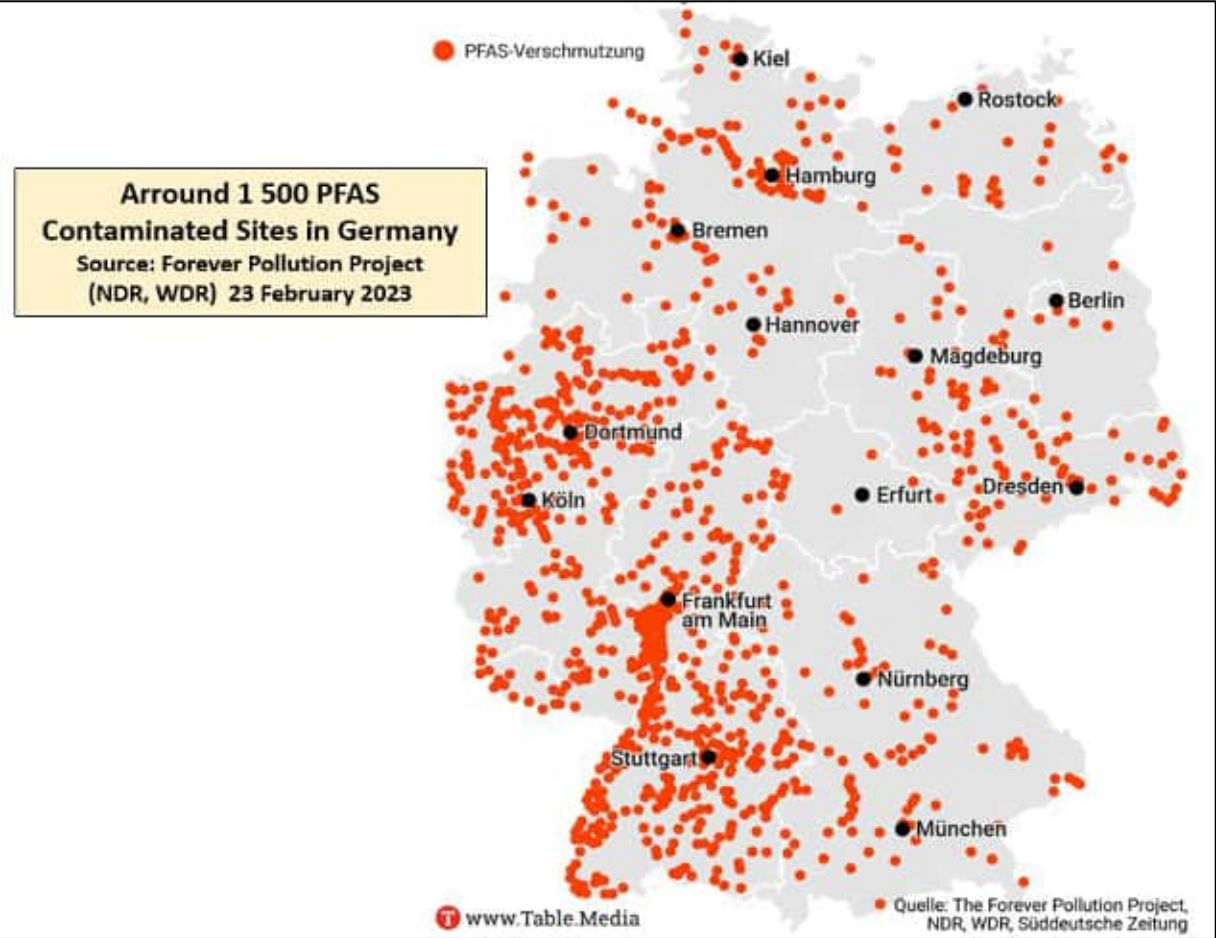
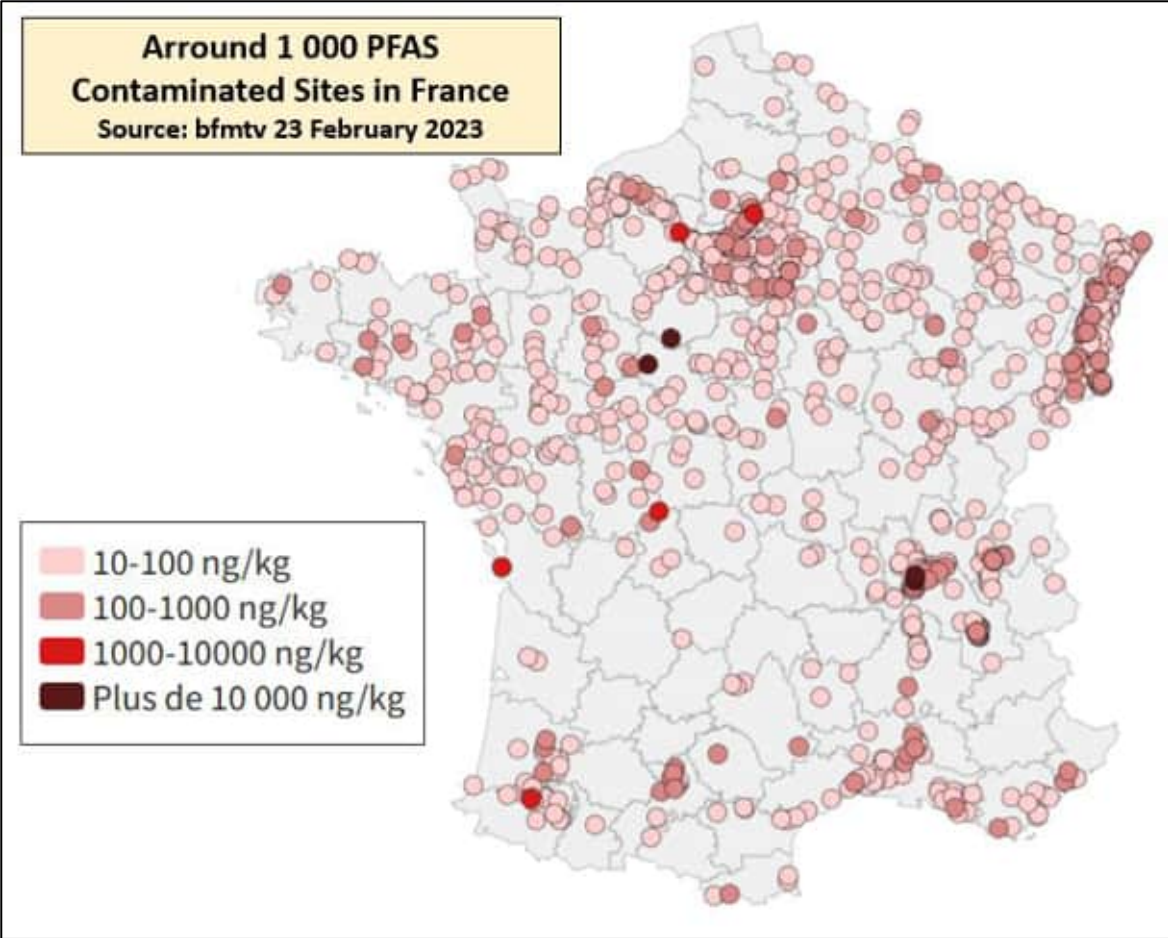


PFAS: Per- & Polyfluor-Alkyl-Substanzen: Management von Umweltkontaminationen und Gesundheitsrisiken

PFAS: Situation Anfang 2023

About 1 000 Sites
in France

About 1 500 Sites
in Germany



PFAS (PFC, PFT):

1. Was sind PFAS?: Schadstoffbeschreibung
2. PFAS-Kontaminationsquellen
3. **Umweltchemie**
4. Toxikologie
5. Vorschriften & Grenzwerte
6. Untersuchungen & Risikobewertung
7. Behandlungen & Sanierung



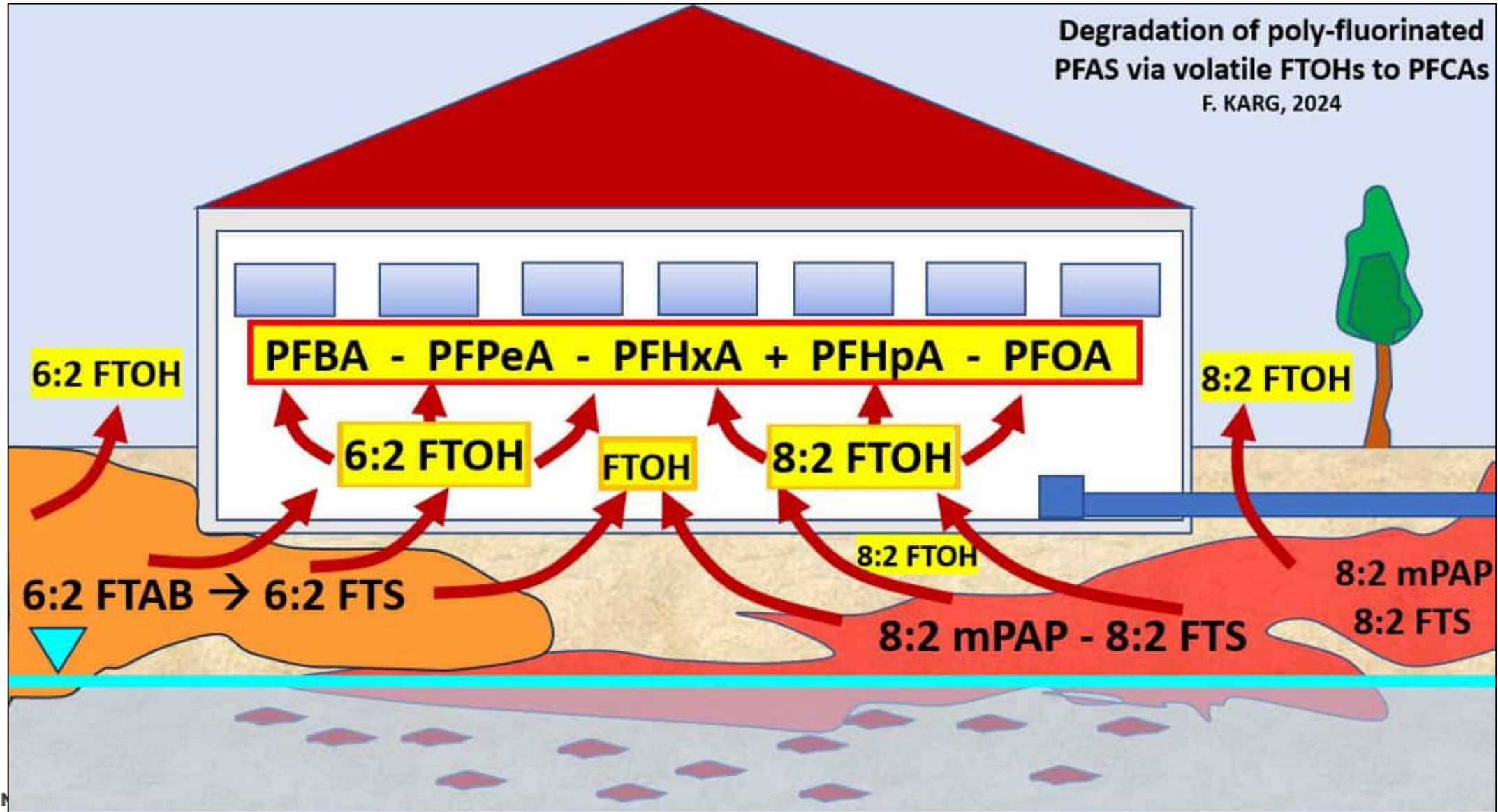
PFAS: Umweltchemie

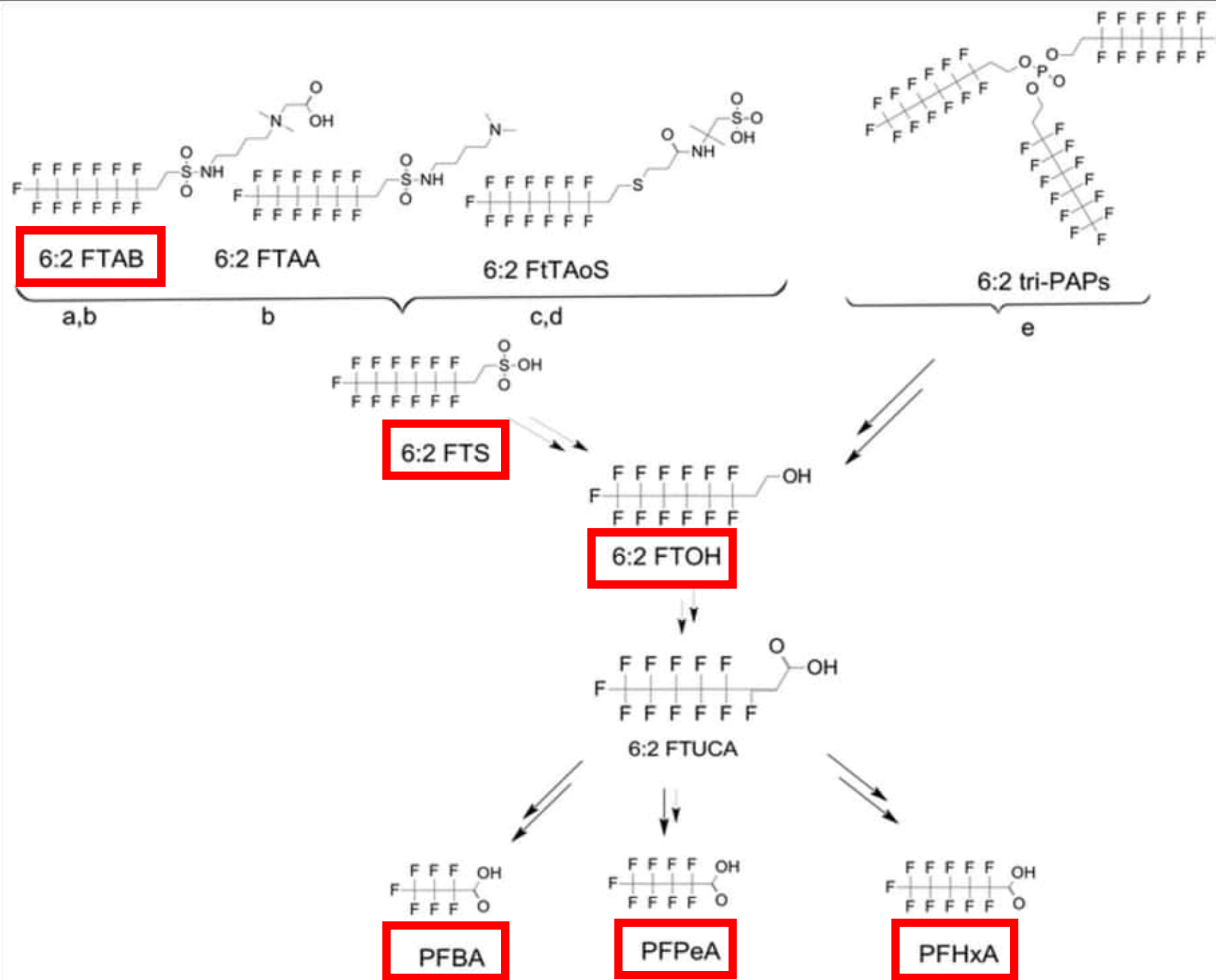
- **Nicht vollständig fluorierte (polyfluorierte Chemikalien)** können mikrobiell als „Vorstufe“ = “Precursors“ in stabile & persistente, vollständig fluorierte (perfluorierte) PFAS umgewandelt werden.
- **Ein vollständiger mikrobiologischer Abbau von PFAS ist noch nicht nachgewiesen.**
- **Es wird unterschieden** zwischen lokalen punktuellen Kontaminationsquellen (Galvanik, Feuerlöschanlagen etc.) und flächenbezogenen PFAS-Kontaminationen (Düngung, Klärschlamm etc.).



PFAS: Per- & Polyfluor-Alkyl-Substanzen: Management von Umweltkontaminationen und Gesundheitsrisiken

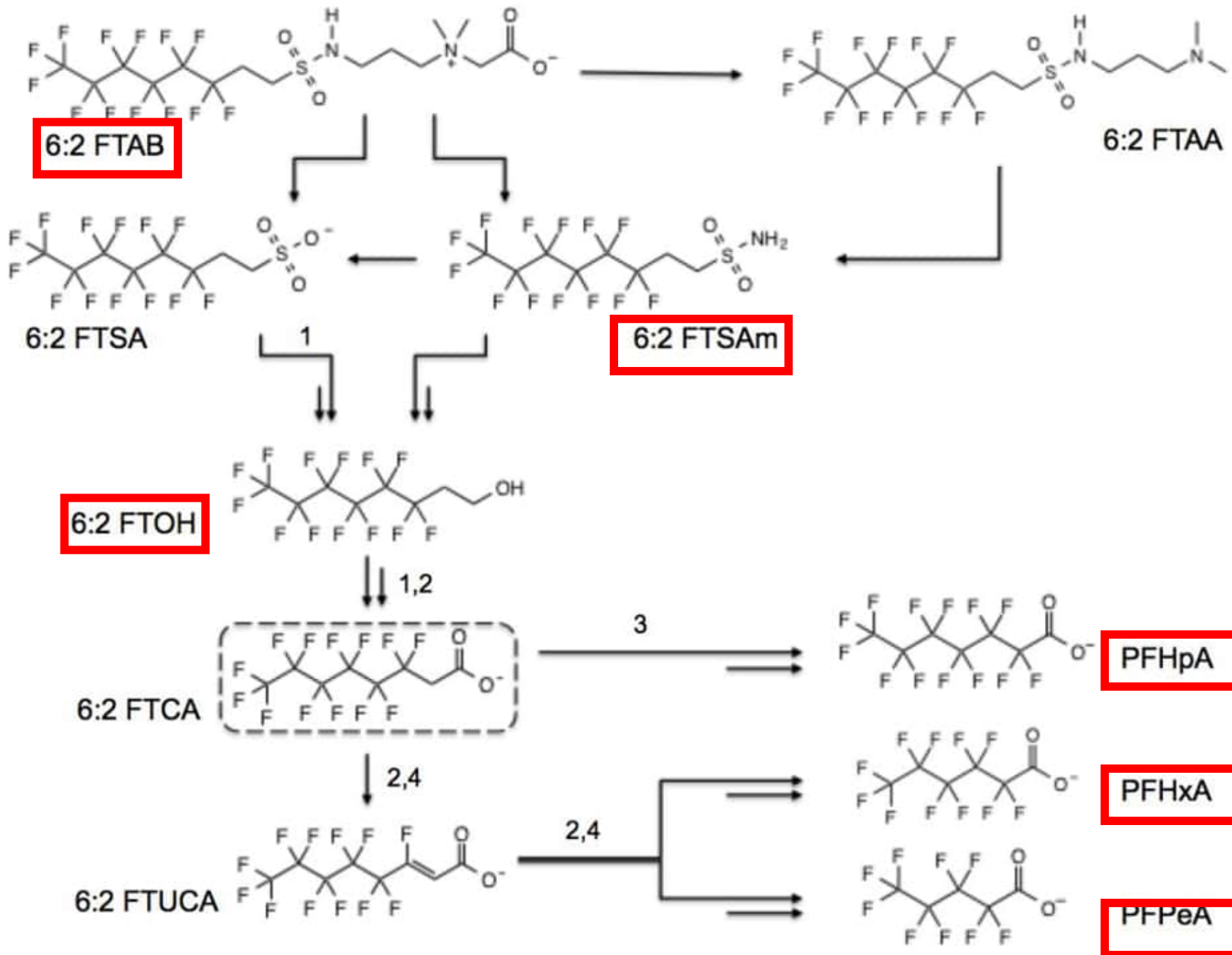
Degradation of poly-fluorinated
PFAS via volatile FTOHs to PFCAs
F. KARG, 2024





6 :2 FTAB:
Transformation
über 6 :2 FTS und 6 :2
FTOH zu per-
fluorierten PFBA,
PFPeA & PFHxA

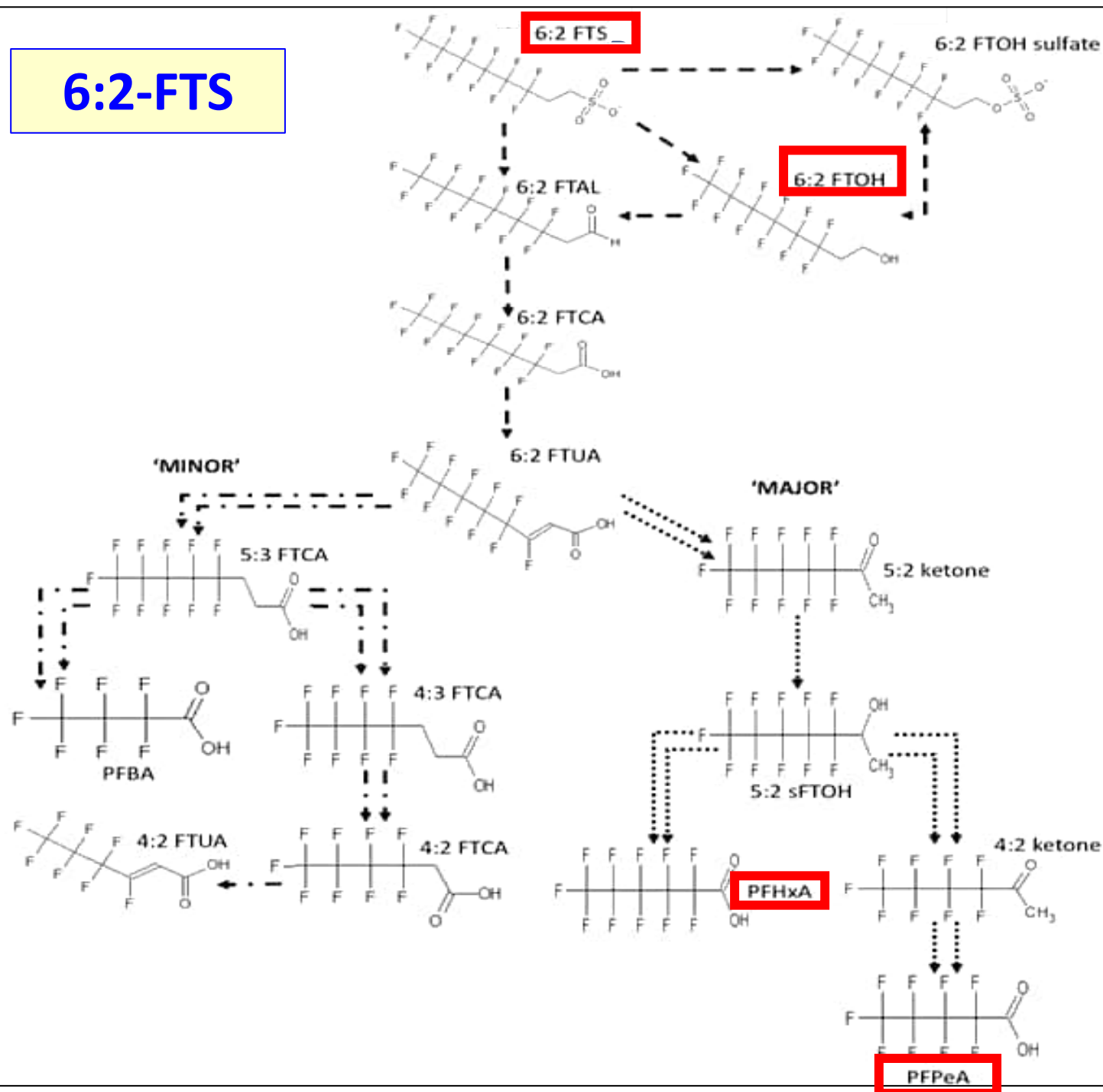
(LaFond et al. 2023, D.M.J. Shaw et al. 2019 ,Ying Shi, 2018 und V. Mendez et. al. 2022)



6 :2 FTAB:
Photolyse
über 6 :2 FTSA und
6 :2 FTOH zu per-
fluorierten PFBA,
PFPeA et PFHxA

(Lennard John Trouborst:
2016)

6:2-FTS



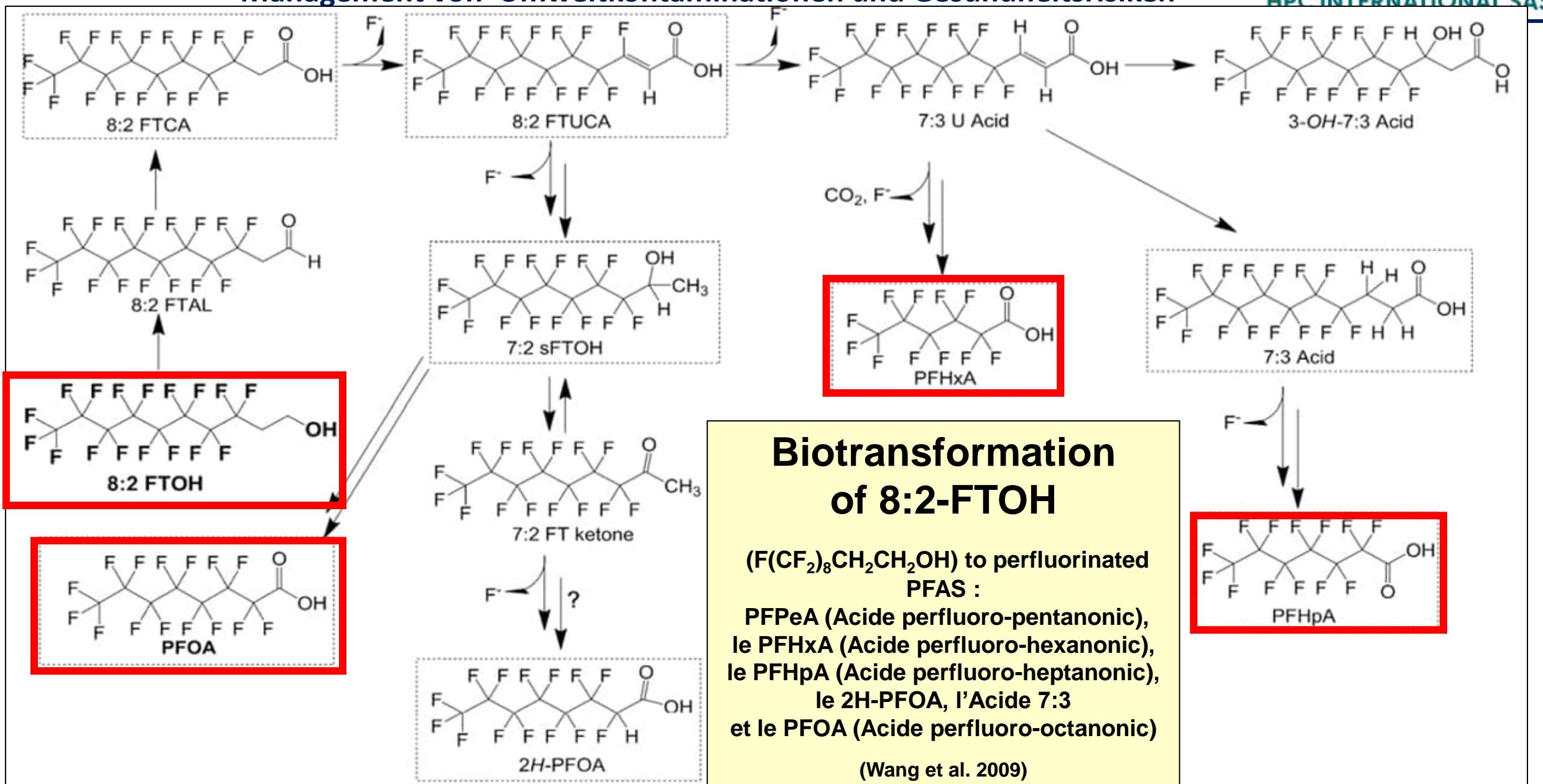
Biotransformation von 6:2-FTS

zu perfluorierten PFAS :
PFBA (Perfluorbutansäure),
PFPeA (Perfluorpentansäure),
PFHxA (Perfluorhexansäure)

(D.M.J. Shaw et al. 2019 ,Ying Shi,
2018 et V. Mendez et. al. 2022)

PFAS: Per- & Polyfluor-Alkyl-Substanzen:

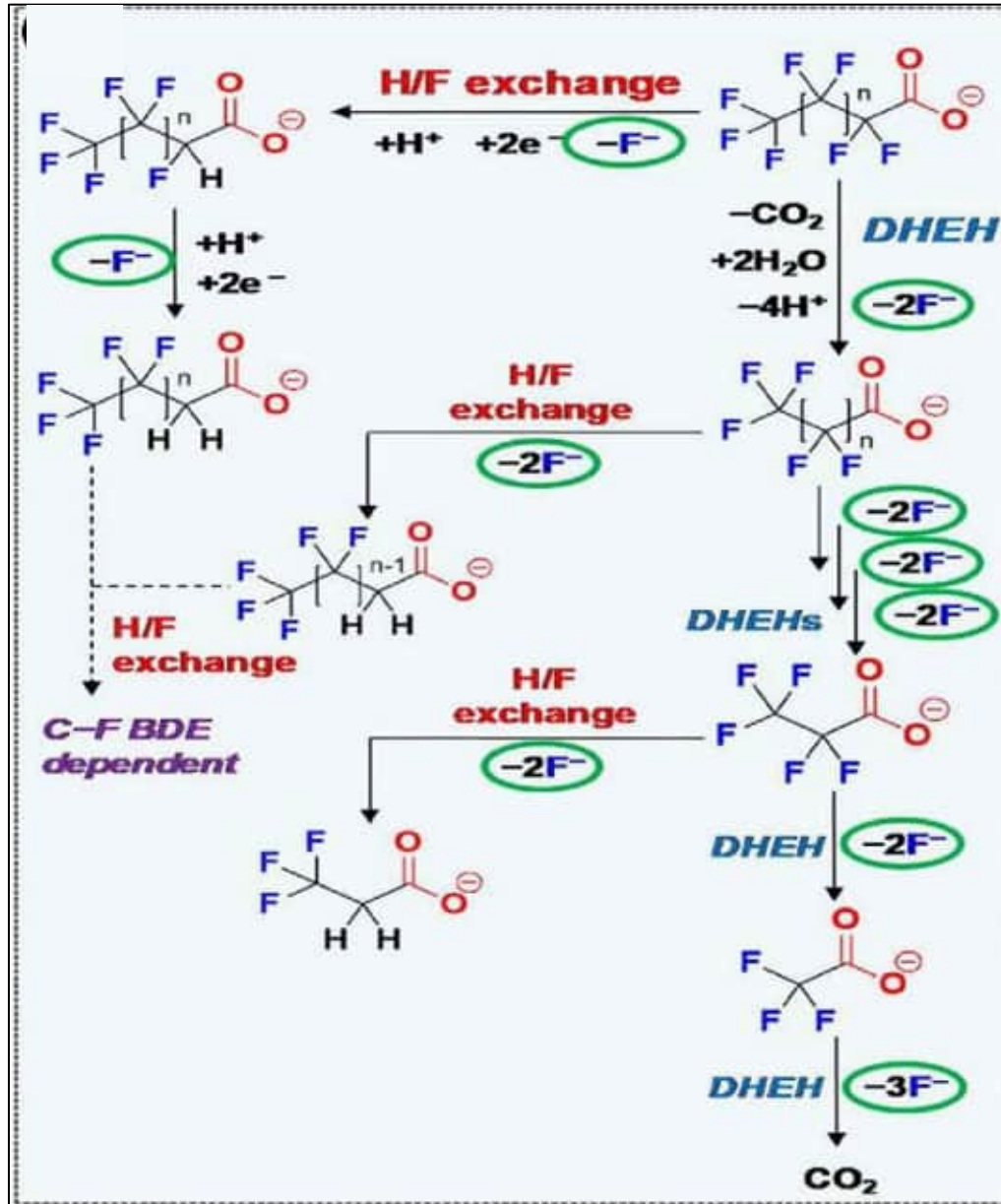
Management von Umweltkontaminationen und Gesundheitsrisiken



PFAS: Umweltchemie

Photochemische Defluorierung von PFBA zu TFA

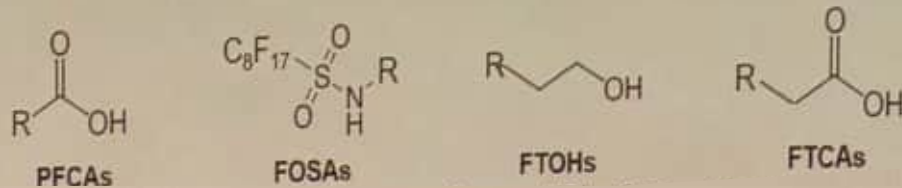
Bentel et al. 2019 & Masruck, A. et al. 2020)



PFAS : Umweltchemie

Flüchtige PFAS


- **FTOH:** Fluorotelomer-alkohole (4:2-FTOH, 4:3-FTOH, 6:2-FTOH, 6:3-FTOH, 8:2-FTOH, 10:2-FTOH, etc.),
- **FASE:** Per-fluoroalkan-sulfamid-ethanole (z.B. N-MeFOSE, N-EtFOSE),
- **FTI:** Fluorotelomer-jodite (par ex.. 6:2-FTI, 8:2-FTI, 10:2-FTI),
- **FTAC:** Fluorotelomer-acrylate (par ex. 4:2-FTAC, 6:2-FTAC, 8:2-FTAC, 10:2-FTAC),
- **FTMACS:** 6:2-Fluorotelomer-methylacrylate (par ex. 4:2-FTMAC, 6:2-FTMAC, 8:2-FTMAC, 10:2-FTMAC),
- **PFADiI:** Perfluoroalkyl-di-jodite (par ex. PFBuDiI, PFH_xDiI, PFODiI),
- **TFMB:** Trifluormethylbenzole (z.B. BTFMBB: 1-Brom-3,5-bis(trifluoro-methyl)benzol).



PFAS: Per- & Polyfluor-Alkyl-Substanzen: Management von Umweltkontaminationen und Gesundheitsrisiken

Increasing or Reduction of Solubility and Extractability of some PFAS-Fluorotelomers

Erhöhung bzw. Erniedrigung der Polarität & Löslichkeit einiger PFAS-Fluortelomere

Example: Sea water Impact to Groundwater (HH): Analyses by DIN 38407-42 (solid-liquid extraction) F. KARG 

Acid

pH 6,7

→ to →

pH 7,3

Basic

6:2-FT(S)AB = Capstone B (Fire Fighting Foam)

6:2 Fluorotelomer sulfonamido propyl betaine

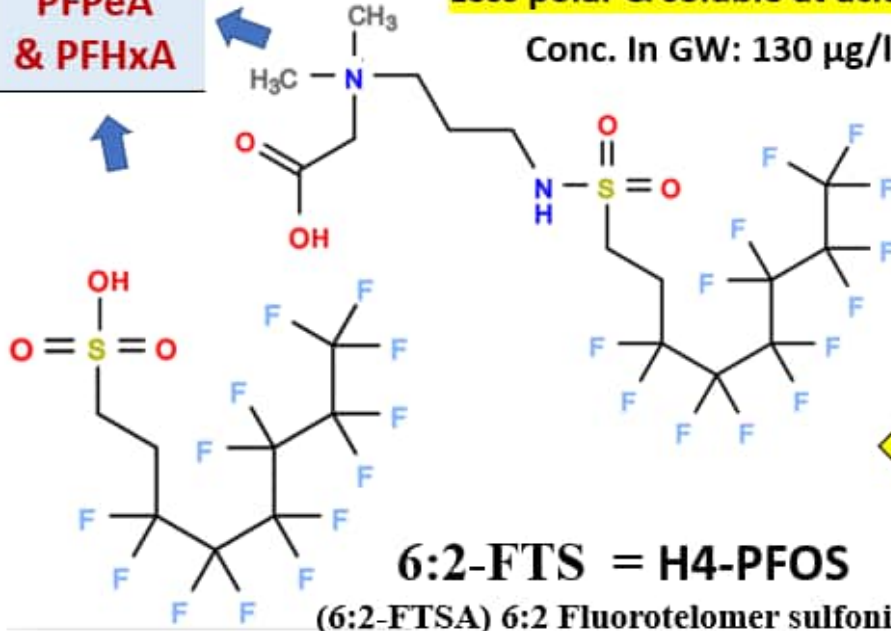
1-Propanaminium, N-(carboxymethyl)-N,N-dimethyl-3-[[[3,3,4,4,5,5,6,6,7,7,8,8,8-tridecafluorooctyl)sulfonyl]amino] and inert salt

N-(Carboxymethyl)-N,N-dimethyl-3-[[[3,3,4,4,5,5,6,6,7,7,8,8,8-tridecafluorooctyl)sulfonyl]amino]-1-propanaminium and inert salt

**PFPeA
& PFHxA**

Less polar & soluble at acid pH

Conc. In GW: 130 µg/l



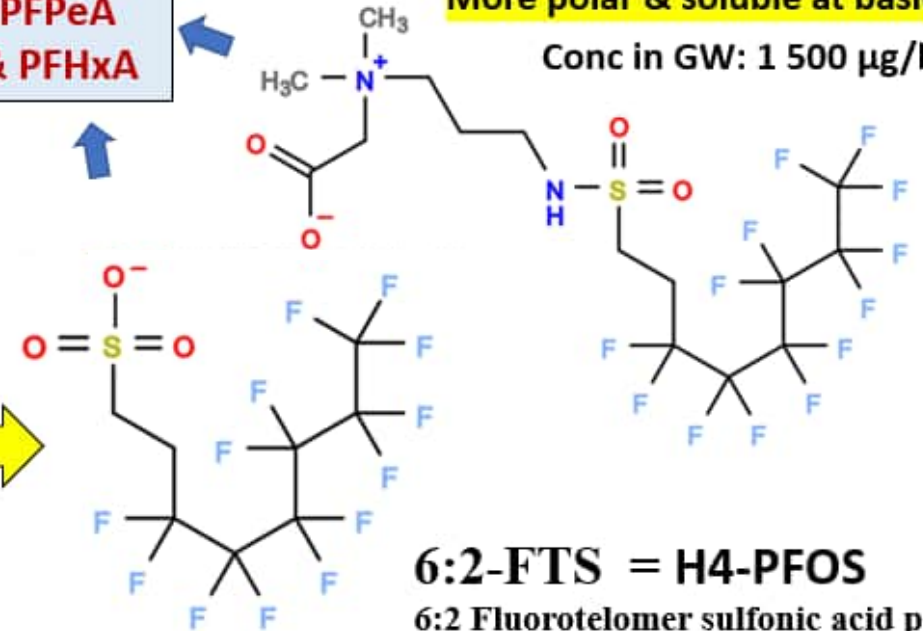
6:2-FT(S)AB = Capstone B (Fire Fighting Foam)

6:2 Fluorotelomer sulfonamido propyl betaine inert salt

More polar & soluble at basic pH

Conc in GW: 1 500 µg/l

**PFPeA
& PFHxA**



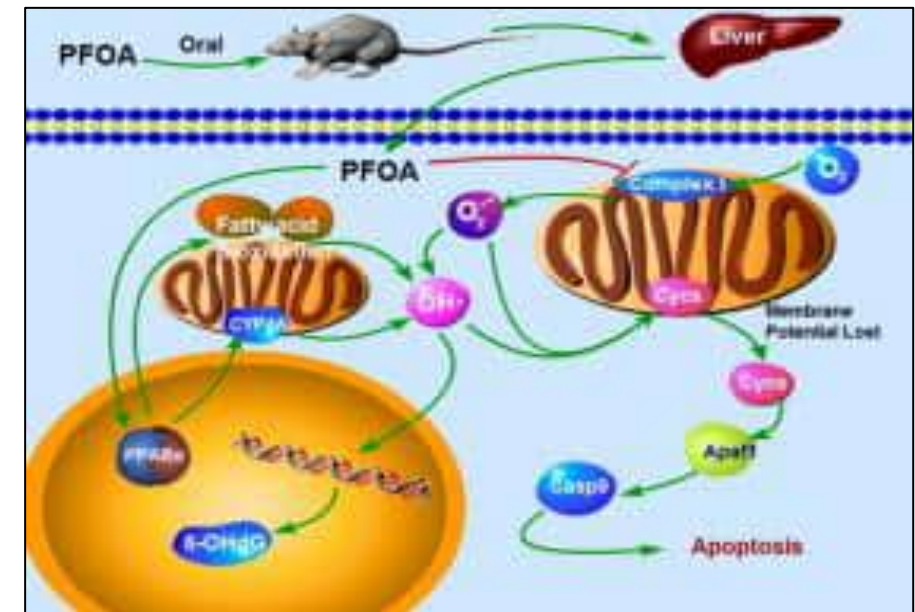
PFAS (PFC, PFT):

1. Was sind PFAS?: Schadstoffbeschreibung
2. PFAS-Kontaminationsquellen
3. Umweltchemie
4. **Toxikologie**
5. Vorschriften & Grenzwerte
6. Untersuchungen & Risikobewertung
7. Behandlungen & Sanierung



Toxikologie: z.B. PFOA et PFOS:

- **Endokrine Disruptoren** (hormonaktive Substanzen: aktiv bei der Produktion von Steroidhormonen die den Testosteronspiegel reduzieren usw.): PFOS + FTOH (Fluortelomeralkohole), Schilddrüsenwirksam...
- **Karzinogenität:** Brust- und Hodenkrebsentwicklungen (PFOA),
- **Teratogenität** (z. B. Androgenspiegel oder abnormale Schilddrüsenhormone usw.),
- **Immuntoxizität** (über Schilddrüseneffekte und auf das Immunsystem),
- **Neurotoxizität** (Hyperaktivitätsstörungen usw.).
Ebenso können andere neurologische Störungen auftreten.



Biochemische Mechanismen der PFOA-Toxizität

Toxikologische Effekte von PFAS:

Pregnant women, unborn fetus, and infants are most susceptible to adverse health effects once exposed to PFAS.

Perfluorooctanoic acid (PFOA) and perfluorooctanesulfonic acid (PFOS), two common forms of long-chain PFAS, have been associated with the following

- Low Birth Weight
- Delayed Puberty
- Attention deficit/hyperactivity disorder (ADHD)
- Immune Response Suppression
- Preterm Birth
- Pregnancy-induced hypertension/ Pre-eclampsia

UNIVERSITY OF MICHIGAN

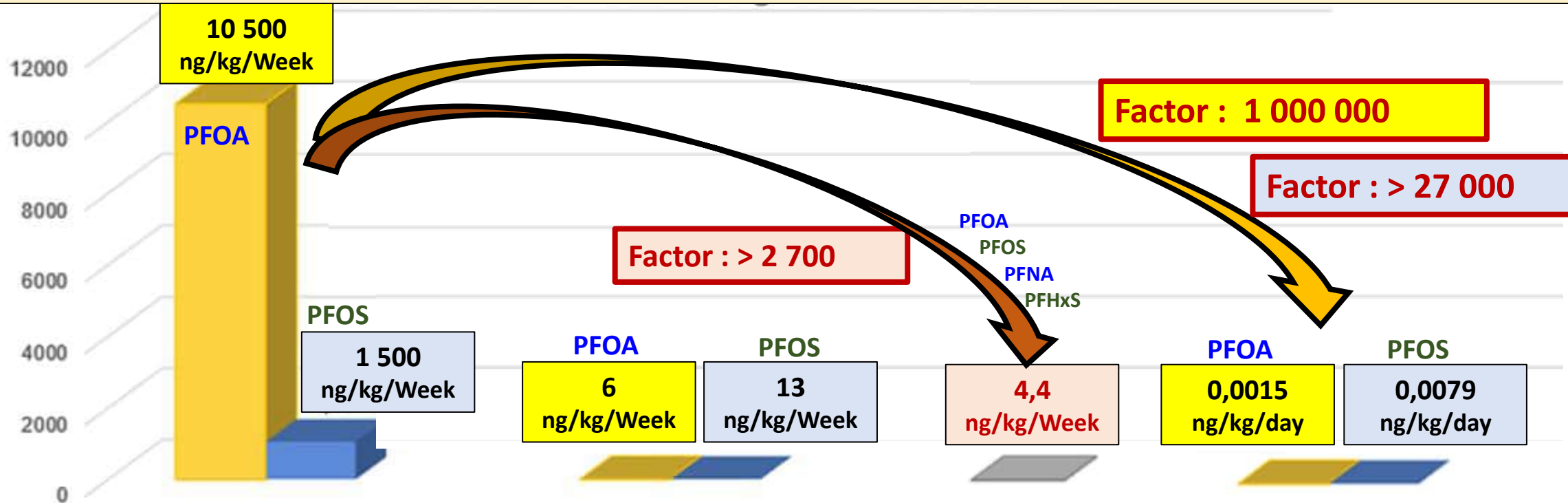
Toxikologische Effekte von PFAS: Résumé

PFAS	Hepato- toxisch	Fötus- Entwick- lung	Repro- toxisch	Immuno- toxisch	Hämato- toxisch	Hormon- wirksam (Thyroide)	Neuro- toxisch	Tumor-bildend (karzinogen)
Perfluorcarboxylsäuren								
PFBA								
PFPeA								
PFHxA								
PFHpA								
PFOA								
PFNA								
PFDA								
PFUnA								
PFDoA								
Perfluorsulfonsäuren								
PFBS								
PFHxS								
PFOS								
Ethersulfonate								
ADONA								
HFPO-DAGenx								

In mehreren Labor-Tier- tests bestätigt	Extrapolierte Effekte	Negativ getestet
--	-----------------------	------------------

VTR: EFSA & US-EPA : PFOA & PFOS : Consideration of Higher Toxicity

TWI & TDI: Tolerable Weekly & Daily Intake: 2008 – 2020 & 2022



EFSA: 17/09/2020

<https://www.efsa.europa.eu/fr/news/pfas-food-efsa-assesses-risks-and-sets-tolerable-intake>

EFSA 2008

EFSA 2018

EFSA 2020

US-EPA (RfD) 2022

Factor : 1 750

Factor : 115

■ PFOA

■ PFOS

□ Summe (PFOA, PFOS, PFNA, PFHxS)

Hessisches Landeslabor

© LHL

PFAS: Per- & Polyfluor-Alkyl-Substanzen: Management von Umweltkontaminationen und Gesundheitsrisiken

Toxikologische Dosis-Beziehungs-Werte

(ATD: Akzeptable Tägliche Dosis: TRD, RfD, etc., UKR: Unitäres Krebsrisiko)

ANSES: Agence nationale de sécurité sanitaire de l'alimentation, de l'environnement et du travail (2017)

ATSDR: Agency for Toxic Substances and Disease Registry

EFSA: European Food and Safety Authority

IRIS: Integrated Risk Information of Substances (U.S. - EPA)

UBA: Umweltbundesamt (Germany) & **BfR:** Bundesinstitut für Risikobewertung

OEHHA: Office of Environmental Health Hazard Assessment

WHO: World Health Organization

RIVM: Netherlands Environmental & Health Institute

MDHHS: Michigan Department of Health and Human Services, Division of Environmental Health

TCEQ: Texas Commission on Environmental Quality

NJ-DWQIHES: New Jersey Drinking Water Quality Institute Health Effects Subcommittee

Bil W. et al. 2020: Toxicological Equivalence factors on PFOA RfD

Substance	Cancerogene / not cancerogene	Chronic toxicological value			Species	Sigle	Security Factor	Organization
		Exposure path	Target organ	Value				
PFBA	NC	oral	Hepatic	1 µg/kg/d	Rate	RFD	NOAEL / 2400	TCEQ 2023
		inhalation	Hepatic	3,5 µg/m ³	Rate	RFC	From oral value	TCEQ 2023
PFPeA	NC	oral	Hepatic	0,5 µg/kg/d	Rate	RFD	Same than PFHxS LOAEL/(263*300)	TCEQ 2023
PFHxA	NC	oral	Hepatic	0,5 µg/kg/d	Rate	RFD	Same than PFHxS LOAEL/(263*300)	TCEQ 2023
PFHpA	NC	oral	Hepatic	25 ng/kg/d	Rate	DJT	Extrapolation of DJT of Health Canada	ANSES 2017
PFOA	NC	oral	Hematologic	0,86 ng/kg/d	Rate	TDI	BMDL 5	UBA 2020 BFR & EFSA 2018
		inhalation	Hepatic, Mammar, Hematologic	12 ng/kg/d	Mice	RFD	LOAEL (81*100)	TCEQ 2016
	C	oral	Hepatic	4,1 ng/m ³	Rate	RFC	NOAEL / (81*3000)	TCEQ 2016
PFNA	NC	oral	Testicular tumors	2,52 (mg/kg/d) ⁻¹	Epidemiology	SF	-	New Jersey 2017
		oral	Hematologic	2,5 ng/kg/d	Mouse	RFD	NOAEL / 300	EPA IRIS 2019 New Hampshire DES 2019
PFDA	NC	inhalation	Lung, respiratory system	28 ng/m ³	Rate	RFC	NOAEL / (81*30 000)	EPA IRIS 2019 TCEQ 2023
		oral	Hematologic	15 ng/kg/d	Rate	RFD	NOAEL / (81*1000)	TCEQ 2016
PFBS	NC	inhalation	Hematologic and renal	53 ng/m ³	Rate	RFC	From oral value	TCEQ 2016
		oral	Hematologic and renal	1,4 µg/kg/d	Rate	RFD	NOAEL / (142*300)	TCEQ 2016
PFHxS	NC	inhalation	Hematologic and thyroidale	4,9 µg/m ³	Rate	RFC	From oral value	TCEQ 2016
		oral	Hematologic and thyroidale	3,8 µg/kg/d	Rate	RFD	LOAEL / (263*300)	TCEQ 2016
PFHpS	NC	inhalation	Hematologic and thyroidale	13 ng/m ³	Rate	RFC	From oral value	TCEQ 2016
		oral	Hepatic	0,43 ng/kg/d	Rate	TDI	Potency Factor : 0,6-2	UBA 2020, EFSA 2018, BFR 2018
PFOS	NC	oral	Thyroidale, neurological and foetal development	1,86 ng/kg/d	Monkey	TDI	NOAEL	UBA 2020, EFSA 2018, BFR 2018
		inhalation	Thyroidale, neurological and foetal development	81 ng/m ³	Rate	RFC	From oral value (23 ng/kg/d)	TCEQ 2016
PFOSA	NC	oral	Mammary glands	12 ng/kg/d	Mice	RFD	Same than PFOA NOAEL/(81*300)	TCEQ 2016
		inhalation	Mammary glands	4,1 ng/m ³	Rate	RFC	Same than PFOA NOAEL(81*300)	TCEQ 2016

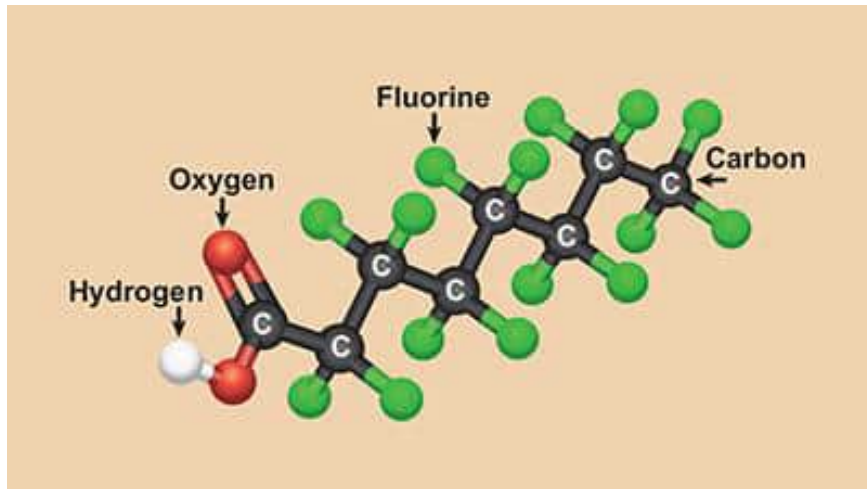
FTOH: Toxikologische Dosis-Beziehungs-Werte

Compound	Inhalation Systemic	Ingestion Systemic	Considered Effect	Tests	Uncertainty (Security) Factor	Reference
6:2 FTOH: Fluorotelomer alcohol	Transposition from RfD to RfC for ex. by 20 m3/d Inhalation	RfD (based on PFOA TDI: 6 ng/kg/week: 0,86 ng/kg/d / RPF 0,02): 43 ng/kg/d	Hepato-toxic	Rat	Relative Potency Factor: RPF = 0,02	Bil et al. 2020: (RfD based on PFOA TDI: UBA 2020, EFSA 2018 & BfR 2018)
8 : 2 FTOH: Fluorotelomer alcohol	Transposition from RfD to RfC for ex. by 20 m3/d Inhalation	RfD (based on PFOA TDI: 6 ng/kg/week: 0,86 ng/kg/d / RPF 0,04): 21,5 ng/kg/d	Hepato-toxic	Rat	Relative Potency Factor: RPF = 0,04	Bil et al. 2020: (RfD based on PFOA TDI: UBA 2020, EFSA 2018 & BfR 2018)
8 : 2 FTOH: Fluorotelomer Alcohol	RfC : 1,5 x 10⁶ pg/kg/d	RfD assimilated to PFOA as biotransformation end-product: 1,5 µg/kg/d	Hepato-toxic	Rat		SLU 2017 (Ingestion based on EFSA 2018)

PFAS: Per- & Polyfluor-Alkyl-Substanzen: Management von Umweltkontaminationen und Gesundheitsrisiken

Toxikologische Dosis-Beziehungs- Werte: Bil et al. (2020 - 21):

**RPF: Relative Potency Factors,
als Toxizitätsäquivalenz-
Faktoren auf PFOA-Basis.**



Per- and polyfluorinated congeners	RPF
Sulfonic acids	
PFBS	0.001
PFPeS*	$0.001 \leq RPF \leq 0.6$
PFHxS	0.6
PFHpS*	$0.6 \leq RPF \leq 2$
PFOS	2
PFDS*	2
Carboxylic acids	
PFBA	0.05
PFPeA*	$0.01 \leq RPF \leq 0.05$
PFHxA	0.01
PFHpA*	$0.01 \leq RPF \leq 1$
PFOA	1
PFNA	10
PFDA*	$4 \leq RPF \leq 10$
PFUnDA	4
PFDoDA	3
PFTriDA*	$0.3 \leq RPF \leq 3$
PFTeDA	0.3
PFHxDA	0.02
PFODA	0.02
Ether carboxylic acids	
HFPO-DA	0.06
ADONA	0.03
Telomer alcohols	
6:2 FTOH	0.02
8:2 FTOH	0.04

^a RPF values using relative liver weight increase as input. RPFs are presented for 14 perfluoroalkyl acids (PFAAs) and two PFAA precursors (the telomer alcohols).

*RPF based on read-across.

PFAS: Per- & Polyfluor-Alkyl-Substanzen: Management von Umweltkontaminationen und Gesundheitsrisiken

No	<u>TRD: Toxicological Reference Dose</u> <u>Choice Criteria</u>	Appreciation			
		Favorable	Correct	Not favorable	Exclusion
1	Variability of indicated TRD	(+/- 0 %)	≤ (+/- 30 %)	> (+/- 30 %)	
2	Class (potential) Carcinogenic: EC: Class 3/ US-EPA: Class B2, C / IARC: Group 1	3 Organisms : CE, US-EPA, IARC, etc.	2 Organisms	1 Organisms	
3	Several Organisms shows similar TRD (+/- 50 %)	> 3 Organisms	2 Organisms	1 Organism	
4	Age of base Study	≤ 15 a	15 – 25 a	< 25 a	
5	Mechanistic toxicological basement Study (for ex. Genotoxicity):	Epidemiology	Mammal	In-Vitro / In-silico	
6	Basement Study : Klimisch Quality Criteria	Class 1	Class 2	Class 3	Class 3
7	Verified Purity of Compound	Yes	< 95 %	No	
8	Excipient potentially toxic	No		Yes	
9	Presence of population without exposure (test witness)	Yes		No	
10	General Quality Criteria (Klimisch) of toxicological effect studies	Standardized Study (OCDE, UE, US EPA, FDA, etc.)	Standardized Study without Details, but correctly documented	Document insufficient for evaluation, systematic deficiencies	
11	POD : Point of Departure	Quantified Epidemiological Data, BMLD, etc. (PBPK)	NOAEL sensitive NOAEL	LOAEL sensitive, LOAEL, Other	
12	Uncertainty (or Assessment) Factors	1 – 100	> 100 – 1000	> 1 000 – 10 000	> 10 000
13a	Transpositions: Between Exposure Pathways	No		Yes	
13b	Transposition: Animal to Human	No	Yes		
13c	Transpositions : From in-Vitro	N		Yes	
13d	Transpositions : From in-Silico	No		Yes	
14	Study time-representatively	≥ chronic (> 180 d)	sub-chronic (90 d) to c hronic (180 d)	< sub-chronic (< 90 d)	
15	Integration of bio-disponibility / Bio-resorption capacity (ex.: DIN 19 738)	Yes	Not known (100 %)	Known, but not considered	

PFAS (PFC, PFT):

1. Was sind PFAS?: Schadstoffbeschreibung
2. PFAS-Kontaminationsquellen
3. Umweltchemie
4. Toxikologie
5. **Vorschriften & Grenzwerte**
6. Untersuchungen & Risikobewertung
7. Behandlungen & Sanierung



Regularien: PFAS-Überwachung und Grenzwerte:



- EU-Schwellenwerte für Oberflächenwasser (Direktive 2013/39/UE Umwelt-Qualitätsstandards (NQE-MA) für PFOS: 0,65 ng/l für Oberflächengewässer 0,13 ng/l Für maritime Gewässer.
- Ein Tolerable Weekly Intake (TWI): 4,4 ng/kg/week (oder TDI: Tolerable Daily Intake für die orale Aufnahme von 0,63 ng/kg/d wurden für die PFAS : PFOA, PFOS, PFNA & PFHxS) von der EFSA am 17.09.2020 vorgegeben <https://www.efsa.europa.eu/fr/news/pfas-food-efsa-assesses-risks-and-sets-tolerable-intake>
- Die Direktive 2020/2184/UE vom 21.12.2020 zu Trinkwasser verlangt ab 2026 die Überwachung von Grenzwerte für 20 PFAS (0,1 µg/l per PFAS & 0,5 µg/l gesamt) sowie 4 PFAS in Oberflächenewässern.
- Trinkwasser US-EPA (10/04/24): MCLs (Maximum Contaminant Levels): PFOA & PFOS: 4 ng/l, PFHxS, PFNA & HFPO-DA (Gen-X): 10 ng/l.
- PFAS-Grenzwerte in Lebensmitteln: EU-Richtlinie 2022/2388 gültig ab dem 01.01.2023.
- In Deutschland verlangen Länder-spezifische Regelungen zunehmend systematische PFAS-Untersuchungen und Sanierungen von Altlasten: Grundwasser: GFS-Werte, Bodeneleuate: z.B. die Bayrischen Stufe-1 & 2-Werte, TW-Werte, etc..

Regularien: EU-Grenzwerte in Lebensmitteln (Fleisch & Fisch)

- **EU-Richtlinie EU 2022/2388 vom 07.12.2022, zu PFAS-Grenzwerten in Nahrungsmitteln, gültig ab dem 01.01.2023. In [µg/kg] (Tabelle vereinfacht)**

Nahrungsmittel		PFOS	PFOA	PFNA	PFHxS	Total PFOS, PFOA, PFNA & PFHxS
10.1	Eier	1,0	0,30	0,70	0,30	1,7
10.2.1.1	Fischfleisch	2,0	0,20	0,50	0,20	2,0
10.2.1.2	Fischfleisch (weitere Arten)	7,0	1,0	2,5	0,20	8,0
10.2.1.3	Fischfleisch (weitere Arten, wie Aal, etc.)	35	8,0	8,0	1,5	45
10.2.2	Krustentiere & Weichtiere (Muscheln, etc.)	3,0	0,70	1,0	1,5	5,0
10.3.1	Fleisch: Rind, Schwein, Geflügel	0,30	0,80	0,20	0,20	1,3
10.3.2	Schafs- & Hammelfleisch	1,0	0,20	0,20	0,20	1,6
10.3.3	Innereien vom Rind, Schwein, Schaf- Hammel und Geflügel	6,0	0,70	0,40	0,50	8,0
10.3.4	Wildfleisch (ausser Bär)	5,0	3,5	1,5	0,60	9,0
10.3.5	Innereien vom Wild (ausser vom Bär)	50	25	45		

PFAS (PFC, PFT):

1. Was sind PFAS?: Schadstoffbeschreibung
2. PFAS-Kontaminationsquellen
3. Umweltchemie
4. Toxikologie
5. Vorschriften & Grenzwerte
6. **Untersuchungen** & Risikobewertung
7. Behandlungen & Sanierung



Untersuchungen und Risikoabschätzungen:

- **Zu vermeiden, dass bestimmte Probenahmegeräte und Laborutensilien PFAS den Proben hinzufügen können**, insbesondere Objekte aus Poly-tetrafluor-ethylen (PTFE),
- **Die potenzielle Biotransformation von PFAS in der Umwelt** muss berücksichtigt werden, um persistenterer PFAS die insbesondere perfluorierte Carboxylsäuren wie PFOA erzeugen können zu vermeiden.
- **Analysen sollten durch Flüssigchromatographie-Massenspektrometrie (LC-MS) durchgeführt werden: DIN 38407-42, ASTM 7979, ISO 21675, Top Assay.**
- **Transfer und toxikologische Daten** stehen für noch nicht für alle PFAS zur Verfügung.
- **Bei FTOH-Anwesenheit in der Bodenluft** wird auch eventuell die Analytik von **Raumluft** empfohlen.



Empfohlene PFAS-Parameter (min.)

PFAS	BG Eaux	CAS	TDW Werte	Dir. CE EP2020/ 2184	AM 20/06/23 France
PFBA (perfluorobutanonic acid)	ng/l	1	375-22-4		
PFPeA (perfluoropentanonic acid)	ng/l	5	2706-90-3		
PFHxA (perfluorohexanonic acid)	ng/l	1	307-24-4		
PFHpA (perfluoroheptanonic acid)	ng/l	1	375-85-9		
PFOA lineare (perfluorooctanonic acid)	ng/l	1	335-67-1		
PFOA ramified (perfluorooctanonic acid)	ng/l	1	335-67-1		
PFOA total (perfluorooctanonic acid)	ng/l	1	335-67-1		
PFNA (perfluorononanonic acid)	ng/l	1	375-95-1		
PFDA (perfluorodecanonic acid)	ng/l	1	335-76-2		
PFUnDA (perfluoroundecanonic acid)	ng/l	1	2058-94-8		
PFDoDA (perfluorododecanonic acid)	ng/l	2	307-55-1		
PFTTrDA (perfluorotridecanonic acid)	ng/l	1	72629-94-8		
PFTeDA (perfluorotetradecanonic acid)	ng/l	1	376-06-7		
PFHxDA (perfluorohexadecanonic acid)	ng/l	2	67905-19-5		
PFODA (perfluorooctadecanonic acid)	ng/l	1	16517-11-6		
PFBS (perfluorobutane sulfonic acid)	ng/l	1	375-73-5		
PFPeS (perfluoropentane sulfonic acid)	ng/l	1	2706-91-4		
PFHxS linear (perfluorohexane sulfonic acid)	ng/l	1	355-46-4		
PFHxS ramified (perfluorohexane sulfonic acid)	ng/l	1	355-46-4		
PFHxS total	ng/l	1	355-46-4		
PFHpS (perfluoroheptane sulfonic acid)	ng/l	1	375-92-8		
PFOS linear (perfluorooctane sulfonic acid)	ng/l	1	1763-23-1		
PFOS ramified (perfluorooctane sulfonic acid)	ng/l	1	1763-23-1		
PFOS total (acide perfluorooctane sulfonic acid)	ng/l	1	1763-23-1		
PFDS (perfluorododecane sulfonic acid)	ng/l	1	335-77-3		
4:2 FTS (4:2 fluorotelomer sulfonic acid) H4-PFOS	ng/l	1	757124-72-4		
6:2 FTS (6:2 fluorotelomer sulfonic acid)	ng/l	1	27619-97-2		
8:2 FTS (8:2 fluorotelomer sulfonic acid)	ng/l	1	39108-34-4		
10:2 FTS (acide 10:2 fluorotelomer sulfonique)	ng/l	1	120226-60-0		
MePFOSAA (N-methylperfluorooctane sulfonamide acetic)	ng/l	1	2355-31-9		
EtFOSAA (acide N-ethylperfluorooctane sulfonamide aceticue)	ng/l	1	2991-50-6		
PFOSA (perfluoro-n-octanesulfonamide)	ng/l	2	754-91-6		
PFOSA ramified (perfluoro-n-octanesulfonamide)	ng/l	2	754-91-6		
PFOSA total (perfluoro-n-octanesulfonamide)	ng/l	2	754-91-6		
MeFOSA linear (N-méthylperfluorooctanesulfonamide) (MePFOSA)	ng/l	1	31506-32-8		

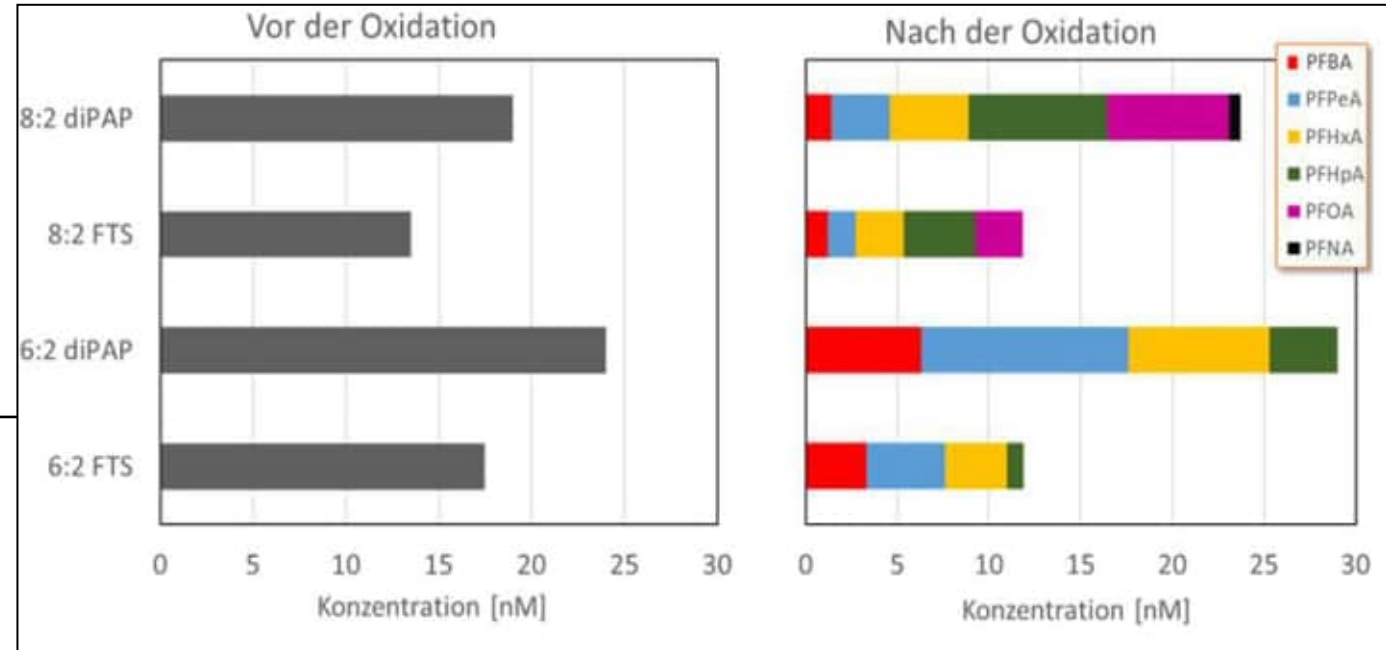
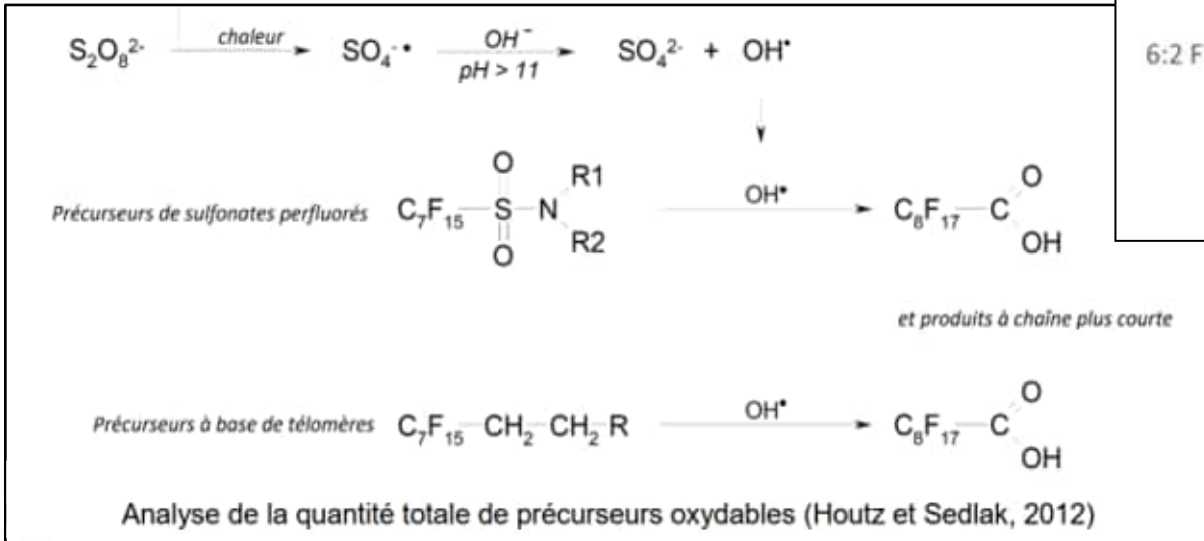
PFAS	BG Eaux	CAS	TDW Werte	Dir. CE EP2020/ 2184	AM 20/06/23 France
MeFOSA ramified (N-méthylperfluoro-n-octanesulfonamide) (MePFOSA)	ng/l	1	31506-32-8		
MeFOSA total (N-méthylperfluoro-n-octanesulfonamide) (MePFOSA)	ng/l	1	31506-32-8		
8:2 DiPAP (8:2 polyfluoroalkyl phosphate diester)	ng/l	1	678-41-1		
HFPO-DA (hexafluoropropyleneoxide dimer acid) / Gen X	ng/l	1	13252-13-6		
EtFOSA linear (N-ethylperfluorooctanesulfonamide) (EtPFOSA)	ng/l	1	4151-50-2		
EtFOSA ramified (N-ethylperfluorooctanesulfonamide) (EtPFOSA)	ng/l	1	4151-50-2		
EtFOSA totale (N-ethylperfluorooctanesulfonamide) (EtPFOSA)	ng/l	1	4151-50-2		
MeFBSAA (perfluorobutanesulfonamide (N-méthyl) acetate)	ng/l	5	159381-10-9		
9Cl-PF3ONS (9-chlorohexadecafluoro-3-oxanonane-1-sulfonic acid)	ng/l	1	73606-19-6		
4H-PFUnDa (2H,2H,3H,3H,-perfluoro undecanonic acid)	ng/l	5	34598-33-9		
8:2 FTUCA (2H-perfluoro-2-decenoique acid)	ng/l	1	70887-84-2		
DONA (4,8-dioxa-3H-perfluorononanonic acid) ADONA	ng/l	1	919005-14-4		
MeFBSA (n-methylperfluorobutanesulfonamide)	ng/l	1	68298-12-4		
PFBSA (perfluorobutanesulfonamide)	ng/l	1	30334-69-1		
PFECHS (perfluoro-4-éthylcyclohexanesulfonic acid)	ng/l	1	646-83-3		
PFNS (perfluorononane sulfonic acid)	ng/l	1	68259-12-1		
PFDoDS (perfluorododecane sulfonic acid)	ng/l	1	79780-39-5		
6:2 phosphate fluorotelomeric diester. 6:2 diPAP	ng/l	10	57677-95-9		
6:2 8:2 phosphate fluorotelomeric diester 6:2 8:2 diPAP	ng/l	10	943913-15-3		
PFHxSA (perfluorohexanesulfonamide)	ng/l	1	41997-13-1		
PFUnDS (perfluoroundecane sulfonic acid)	ng/l	2	749786-16-1		
PFTTrDS (perfluorotridecane sulfonic acid)	ng/l	2	791563-89-8		
EtFOSE (2-(N-ethylperfluoro-1-octanesulfonamido)-ethanol)	ng/l	5	1691-99-2		
MeFOSE (2-(N-methylperfluoro-1-octanesulfonamido)-ethanol)	ng/l	5	24448-09-7		
NFDHpA (Nonafluoro-3,6-dioxaheptanoic acid)	ng/l	1	151772-58-6		
PFMPA (Perfluoro-3-methoxypropanoic acid)	ng/l	1	377-73-1		
PFMBA (perfluoro-4-methoxybutanoic acid)	ng/l	1	863090-89-5		
C6O4 (Perfluoro([5-methoxy-1,3-dioxolan-4-yl]oxy)acetic acid)	ng/l	10	1190931-41-9		
6:2-FTOH (6:2 fluorotelemer alcohol) FHET	ng/l	20	647-42-7		
8:2-FTOH (8:2 fluorotelemer alcohol) FOET	ng/l	10	678-39-7		
6:2-FTAB (6 :2 fluorotelomer sulfonamido propyl betaine) Capstone B	ng/l	10	34455-29-3		

Parameters for PFAS Source Identification per AI-MVA (Artificial Intelligence Multivector Analysis)

Ermittlung der poly-fluorierten PFAS transformierbar in per-fluorierte PFAS:

TOP-Assay: Total Oxidizable Precursor

(Houtz and Sedlak: 2012, Glöckner et al.: 2021)



Ermittlung von poly-fluorierten PFAS transformierbar in perfluorierte Carboxylsäuren (PFCA)

PFAS-Source Identification and Identification Tools by use of PFAS Data Bank on Commercial Products and AI-MVA-Tool (Artificial Intelligence Multi-Vector-Analysis)

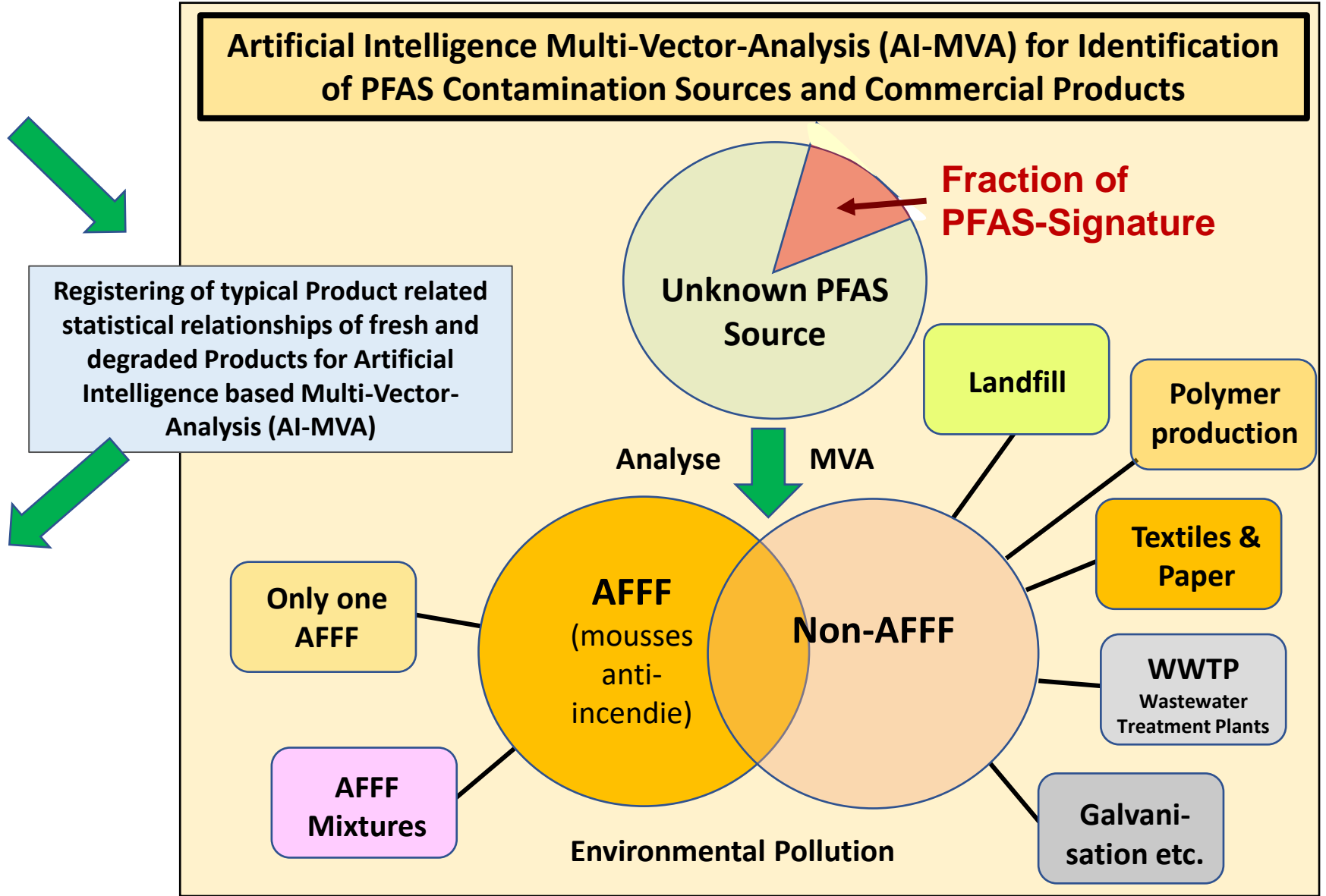
F. Karg, 2023

Databank Registering of Commercial PFAS Products and their degraded individual PFAS Molecules, based on more than 800 000 Analysis experiences.

Registering of individual PFAS Product Spectrums and statistical Relationships of Commercial Product by non-Target Analysis (400–500 Compounds) on fresh Products and degraded Products, after 3 months Lysimeter Tests with bio-transforming Bacteria.

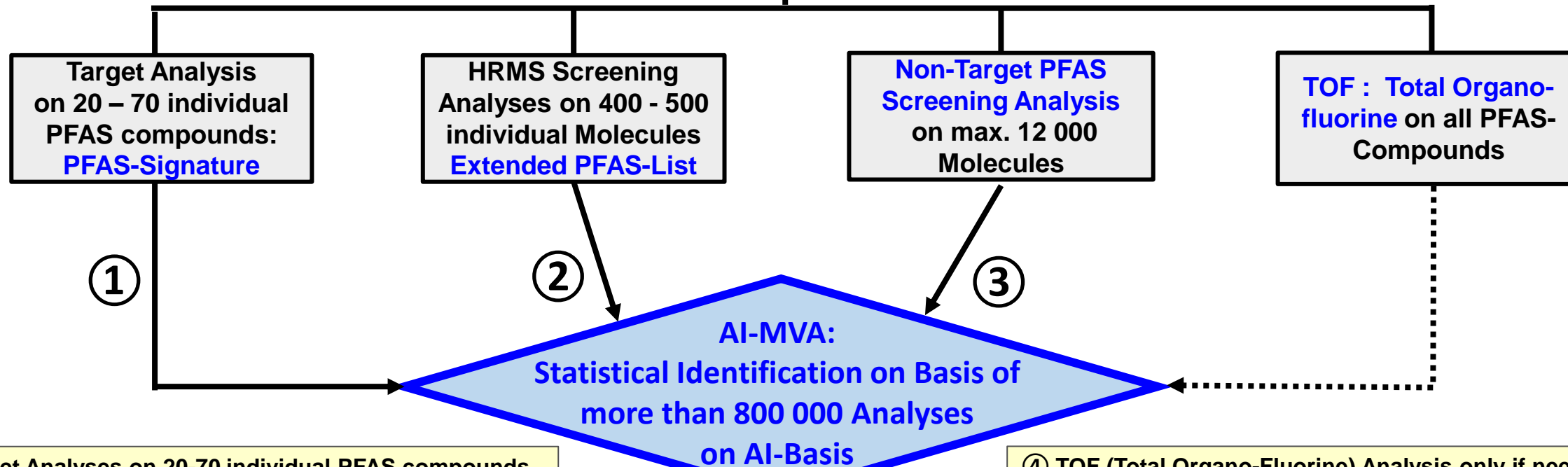
Identification of statistical Indicators per commercial Product via Standard Analyses (min. 20–70 Molecules in environmental soil and water samples)

AI-MVA-Identification of PFAS Contamination Sources and Commercial Products in Environmental Samples with Standard Analyses.



PFAS-Quellen-Identifizierung und Differenzierung durch KI-basierte MVA: AI-MVA-Tool (Artificial Intelligence Multi-Vector-Analysis)

Analytik von Umweltproben: Boden, Grundwasser, Oberflächengewässer, Sedimente, etc.



① Target Analyses on 20-70 individual PFAS compounds (standard PFAS-Signature Analysis) for AI-MVA-Procedure

② Extended PFAS List Analysis for AI-MVA – Data Bank.

③ Registering of individual PFAS Compounds Spectrums from Commercial PFAS Products and degraded Commercial Products after long term Lysimeter & Percolation Tests with Bacteria for bio-transformation of poly-fluorinated PFAS to per-fluorinated PFAS

④ TOF (Total Organo-Fluorine) Analysis only if needed. No Detail concerning individual PFAS Molecules is obtained.

⑤ Identification of commercial PFAS Products based on the Extended PFAS-List Spectrums of HPC INTERNATIONAL's Data Bank.

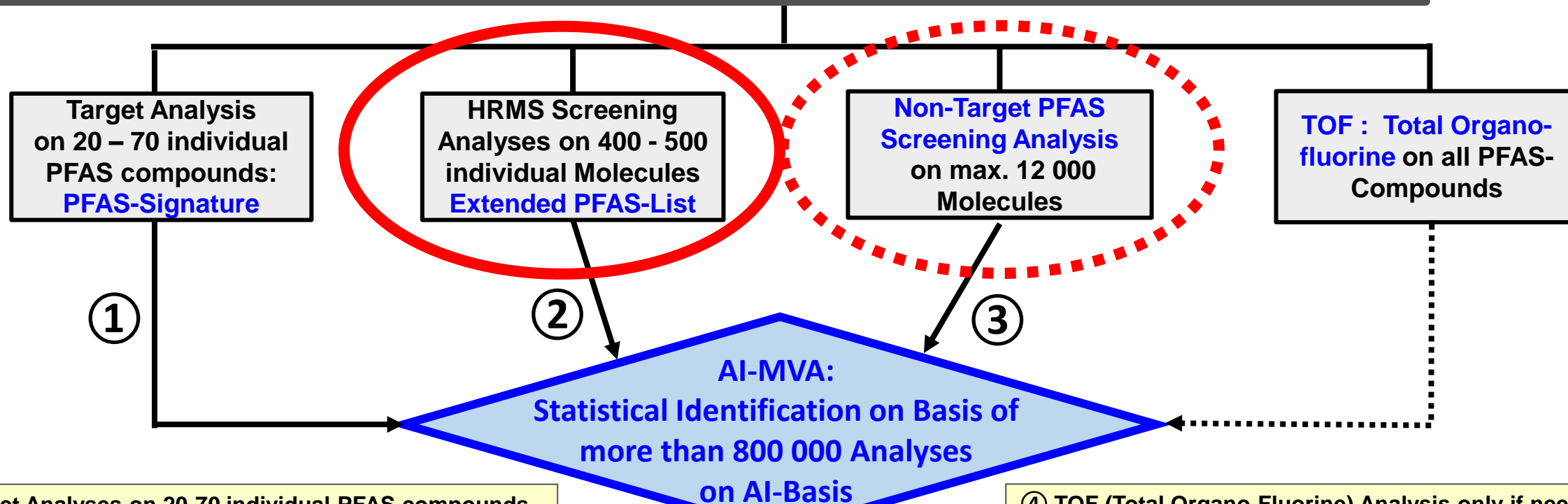
⑥ Identification on Experiences Basis on more than 800 000 PFAS Analyses and registered statistical Polytopic PFAS Parameters.

Identification of commercial PFAS-Products and Pollution Sources de pollution in Standard Environmental Soil and Water Analyses via polytopic AI-MVA

PFAS-Quellen-Identifizierung und Differenzierung durch KI-basierte MVA: AI-MVA-Tool (Artificial Intelligence Multi-Vector-Analysis)

Environmental Samplings (soil, groundwater, surface waters) / **Registering of Standards**

F. Karg, 2023



① Target Analyses on 20-70 individual PFAS compounds (standard PFAS-Signature Analysis) for AI-MVA-Procedure

② Extended PFAS List Analysis for AI-MVA – Data Bank.

③ Registering of individual PFAS Compounds Spectrums from Commercial PFAS Products and degraded Commercial Products after long term Lysimeter & Percolation Tests with Bacteria for bio-transformation of poly-fluorinated PFAS to per-fluorinated PFAS

⑤ Identification of commercial PFAS-Products and Pollution Sources de pollution in Standard Environmental Soil and Water Analyses via polytopic AI-MVA

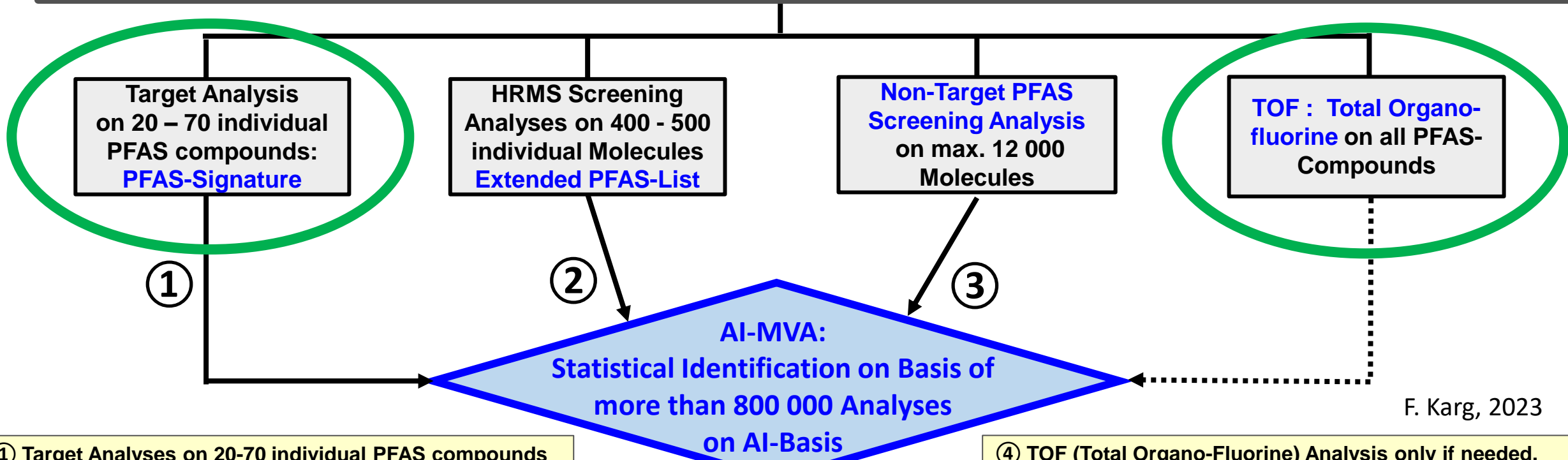
④ TOF (Total Organo-Fluorine) Analysis only if needed. No Detail concerning individual PFAS Molecules is obtained.

⑤ Identification of commercial PFAS Products based on the Extended PFAS-List Spectrums of HPC INTERNATIONAL's Data Bank.

⑥ Identification on Experiences Basis on more than 800,000 PFAS Analyses and registered statistical Polytopic PFAS Parameters.

PFAS-Quellen-Identifizierung und Differenzierung durch KI-basierte MVA: AI-MVA-Tool (Artificial Intelligence Multi-Vector-Analysis)

Environmental Samplings (soil, groundwater, surface waters): **Routine Analysis (+ Top Assay)**



F. Karg, 2023

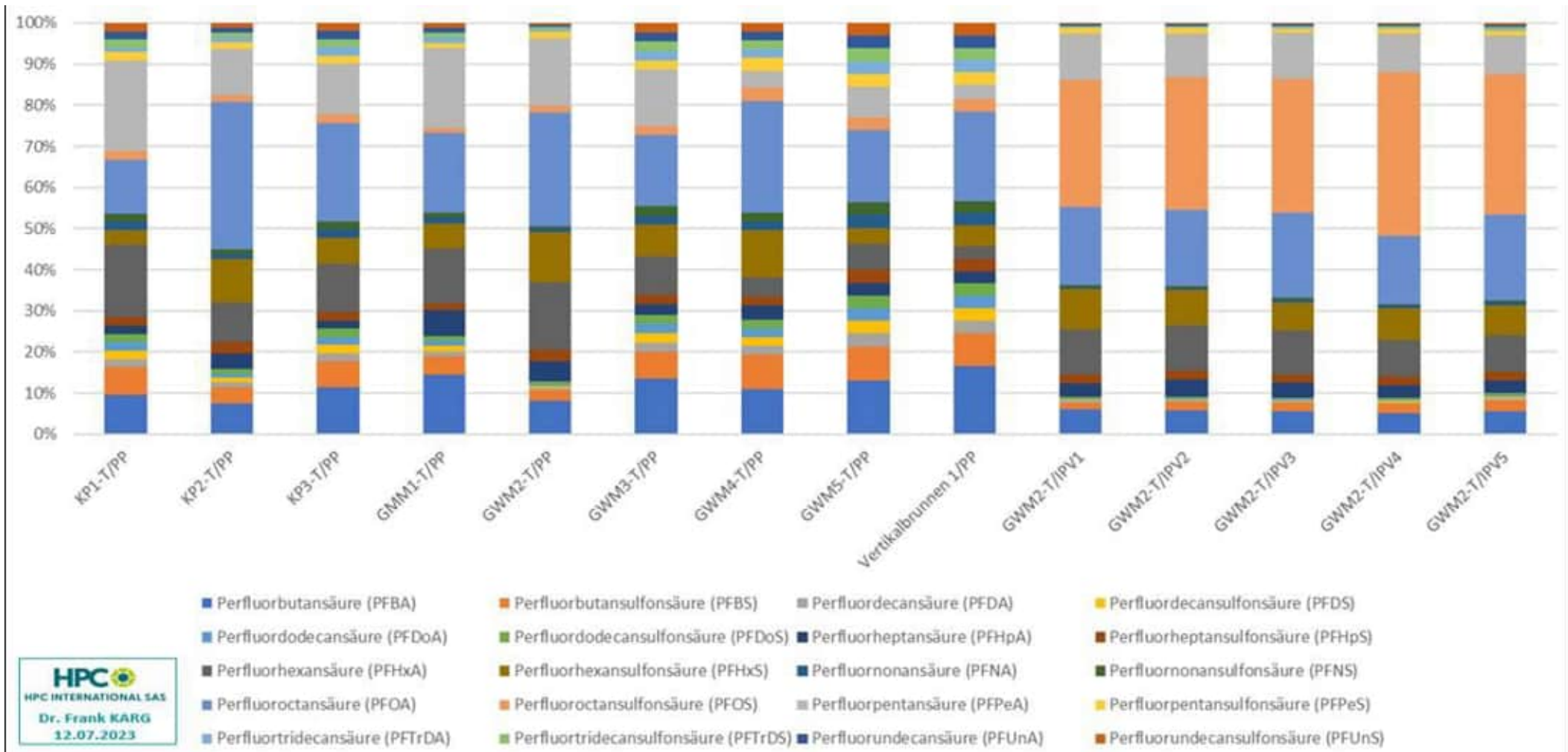
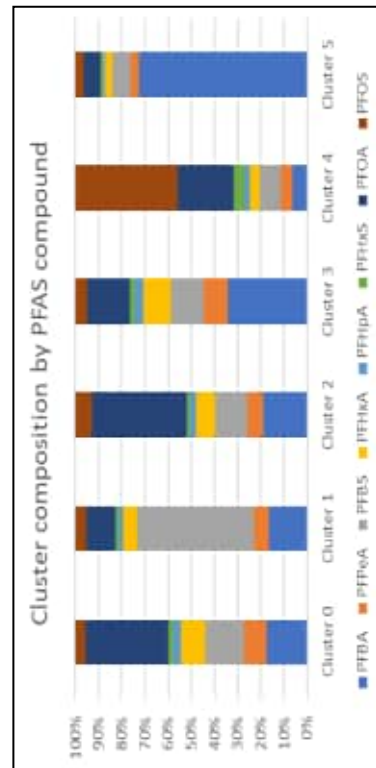
- ① Target Analyses on 20-70 individual PFAS compounds (standard PFAS-Signature Analysis) for AI-MVA-Procedure
- ② Extended PFAS List Analysis for AI-MVA – Data Bank.
- ③ Registering of individual PFAS Compounds Spectrums from Commercial PFAS Products and degraded Commercial Products after long term Lysimeter & Percolation Tests with Bacteria for bio-transformation of poly-fluorinated PFAS to per-fluorinated PFAS

⑤ Identification of commercial PFAS-Products and Pollution Sources de pollution in Standard Environmental Soil and Water Analyses via polytopic AI-MVA

- ④ TOF (Total Organo-Fluorine) Analysis only if needed. No Detail concerning individual PFAS Molecules is obtained.
- ⑥ Identification on Experiences Basis on more than 800 000 PFAS Analyses and registered statistical Polytopic PFAS Parameters.

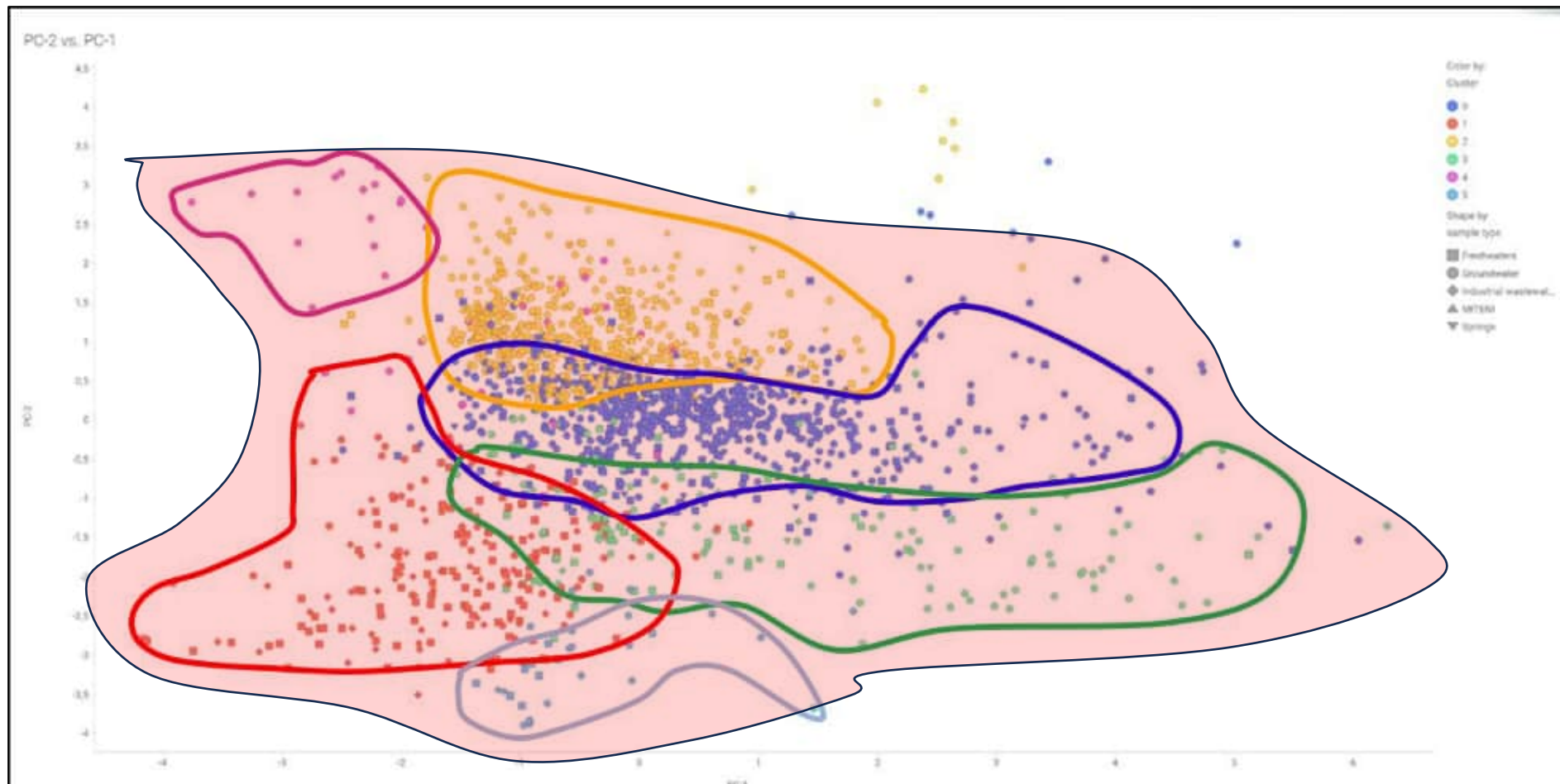
PFAS-Quellen-Identifizierung / Cluster-Untersuchungen:

PFAS-Cluster-Analysen können industrielle bzw. Produkt-Herkünfte identifizieren

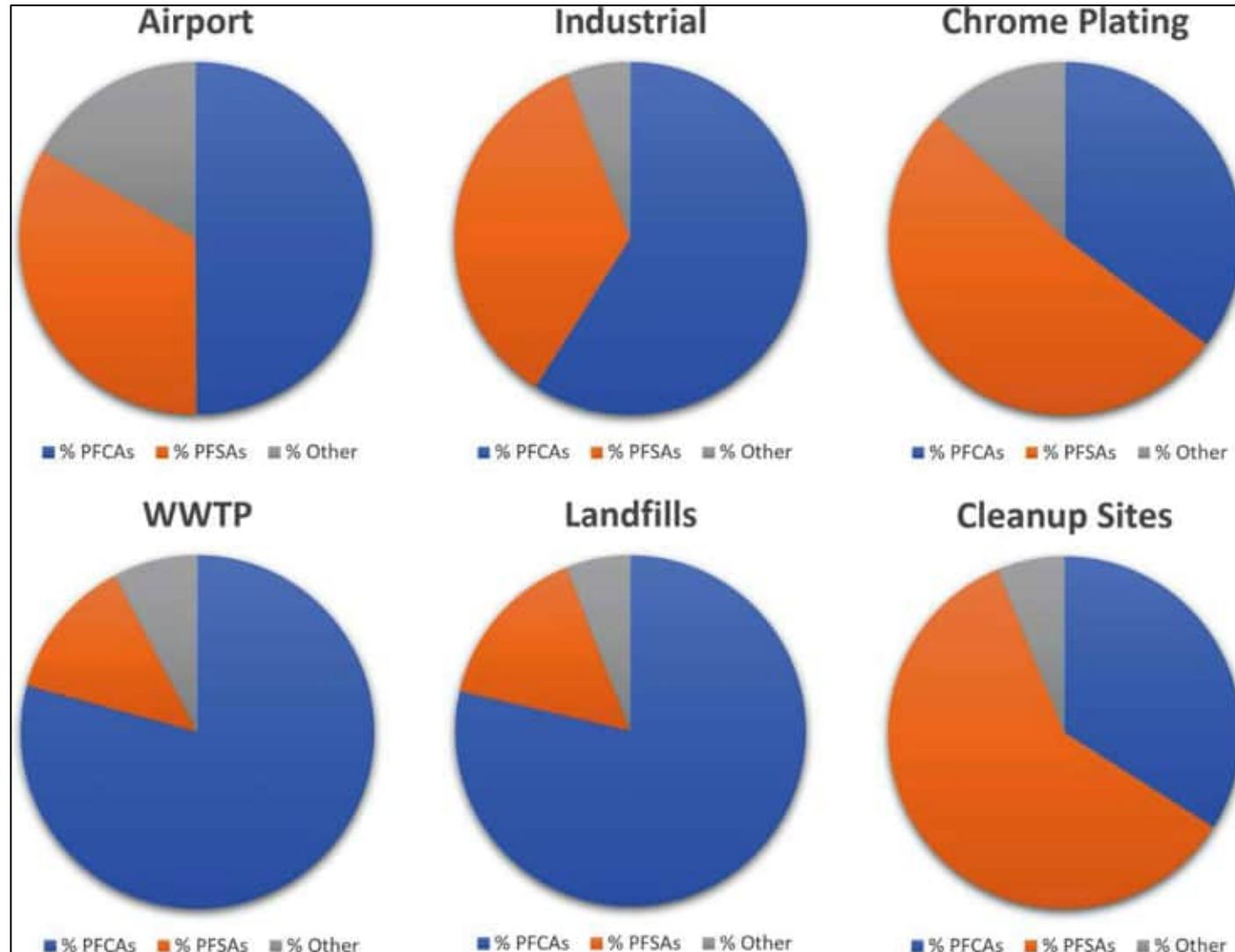


PFAS-Quellen-Identifizierung & Differenzierungen/ Cluster-Untersuchungen:

Identifizierung von 6 Kontaminationsquellen in Grundwasser und Oberflächengewässer auf Basis von 472 Analysen in einer 761 ha-Zone sowie durch die AI-MVA-Analyse (KI) in Nord-Ost-Italien.

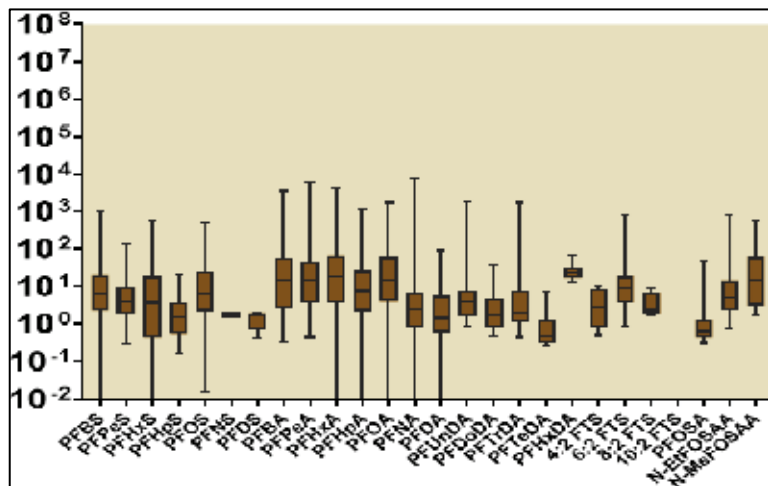


PFAS Verteilungen:

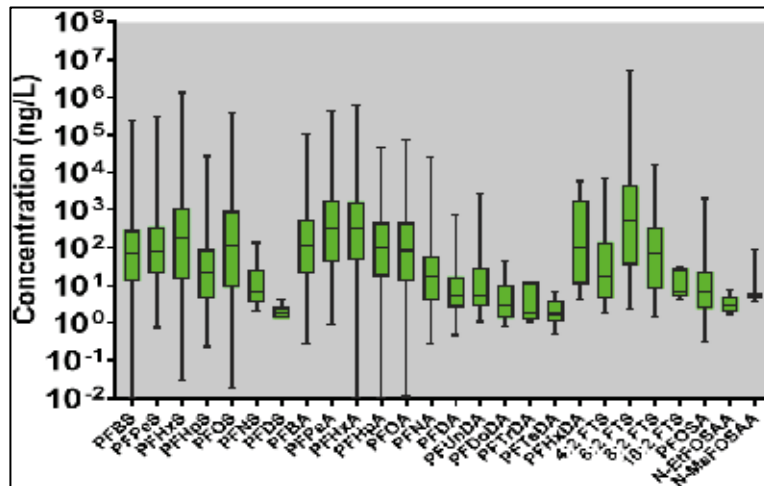


PFAS-Source Identification by Identification Tools by use of PFAS Data Bank on Commercial Products and AI-MVA-Tool (Artificial Intelligence Multi-Vector-Analysis)

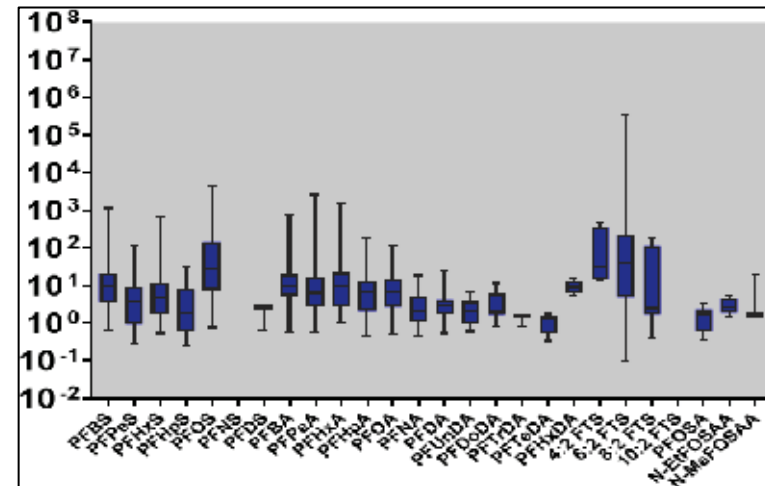
Statistical examples based on more than 800 000 Environmental Analysis (NAS, 2023)



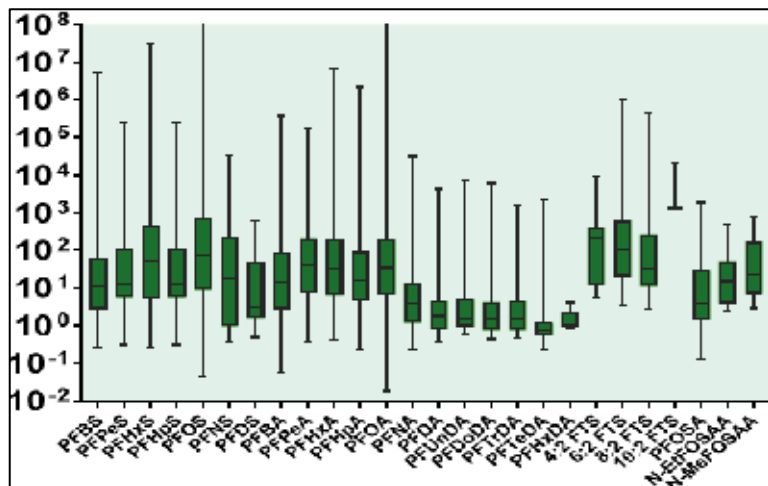
Household Landfills



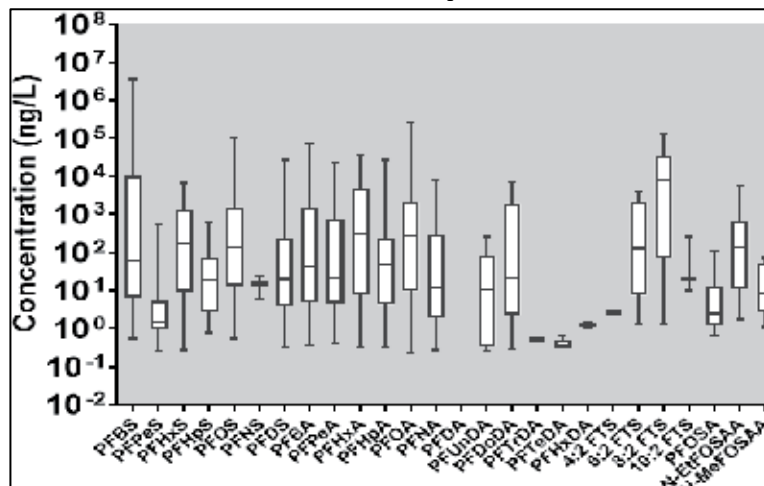
Civil Airports



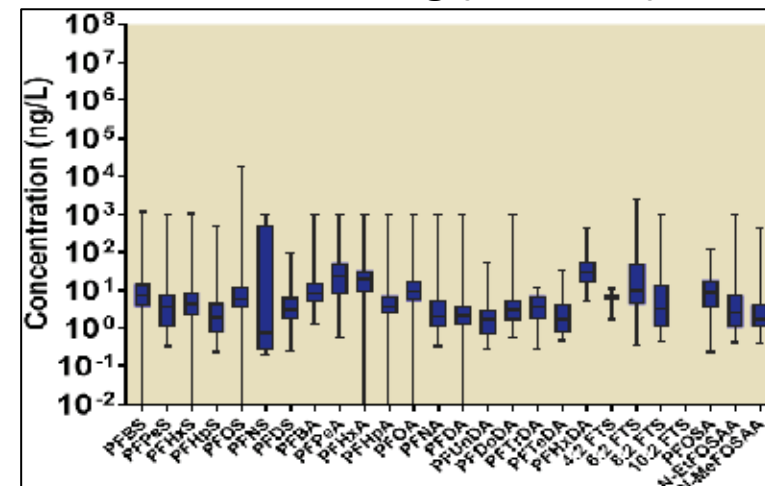
Chrome Plating (Galvanic)



Military Airports



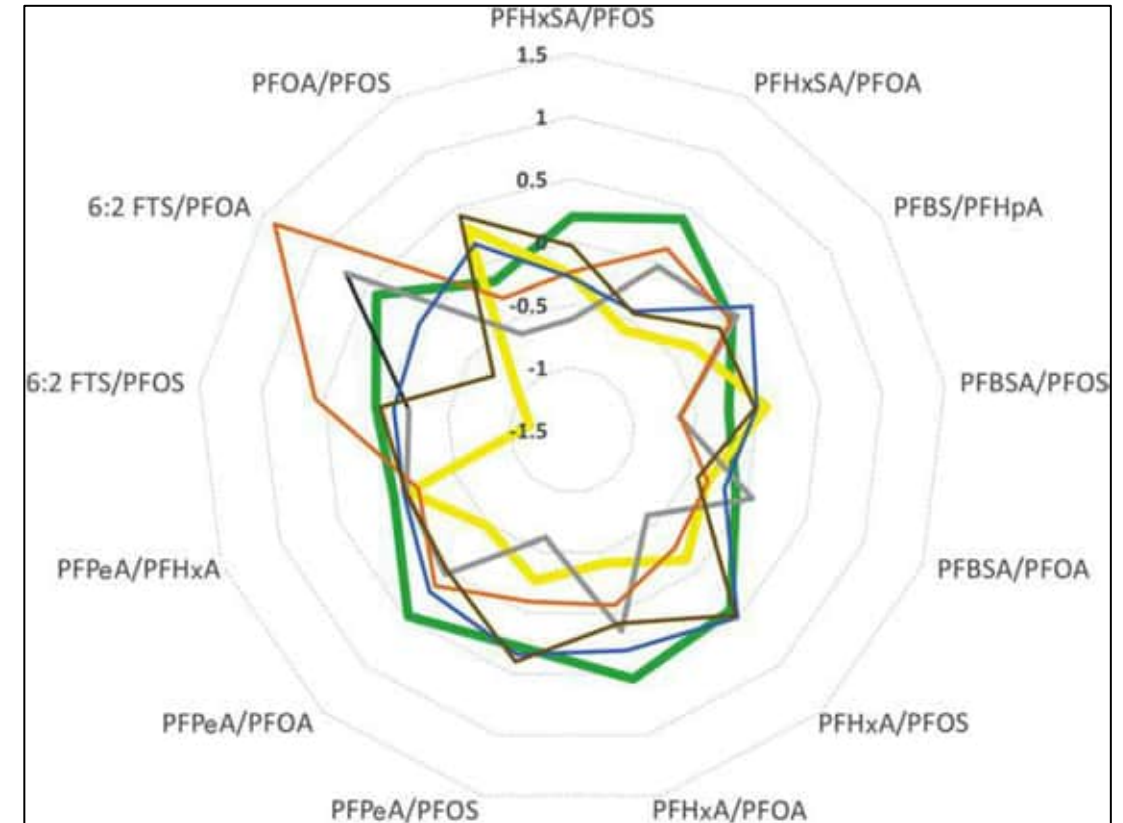
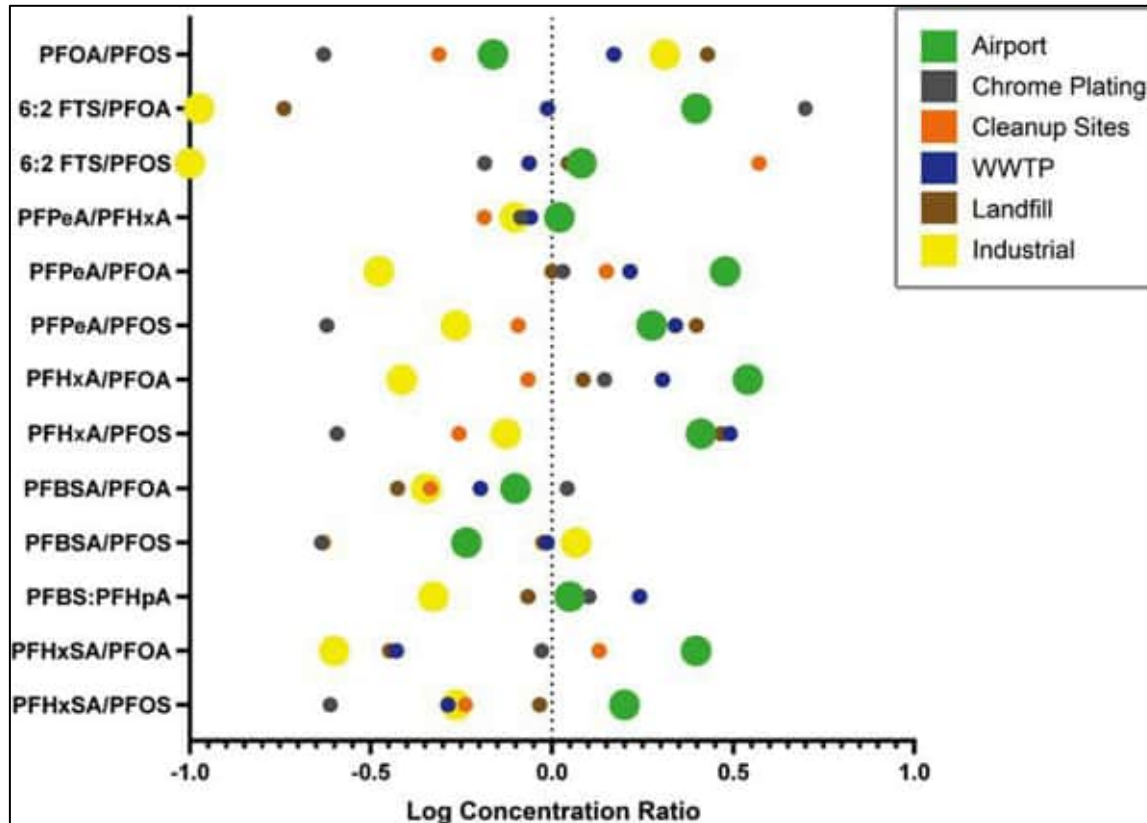
Industrial Sites (Polymers etc.)



WWTPs (Wastewater & WWTP Sludge)

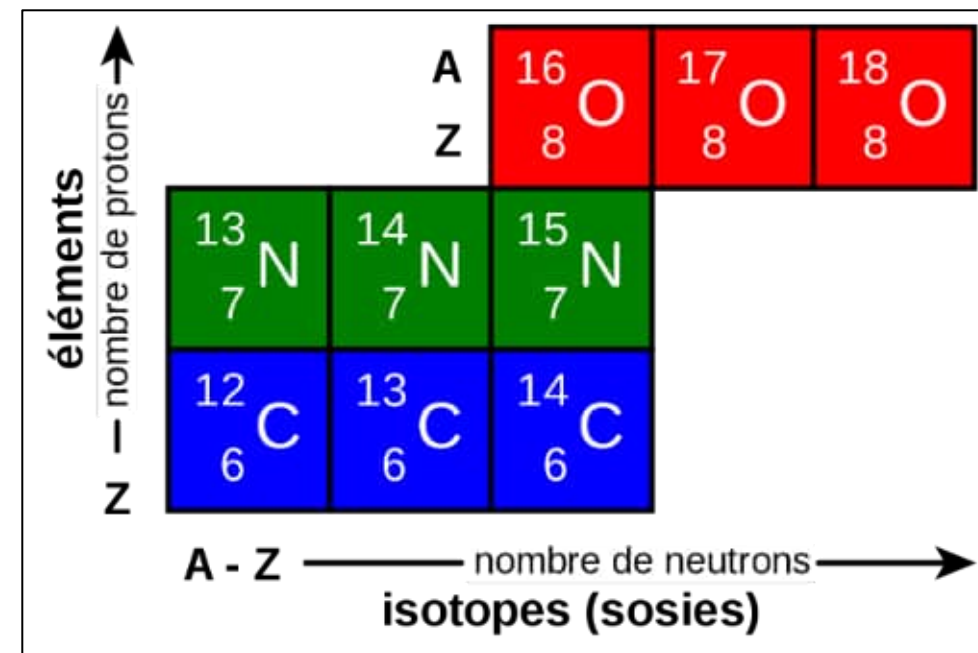
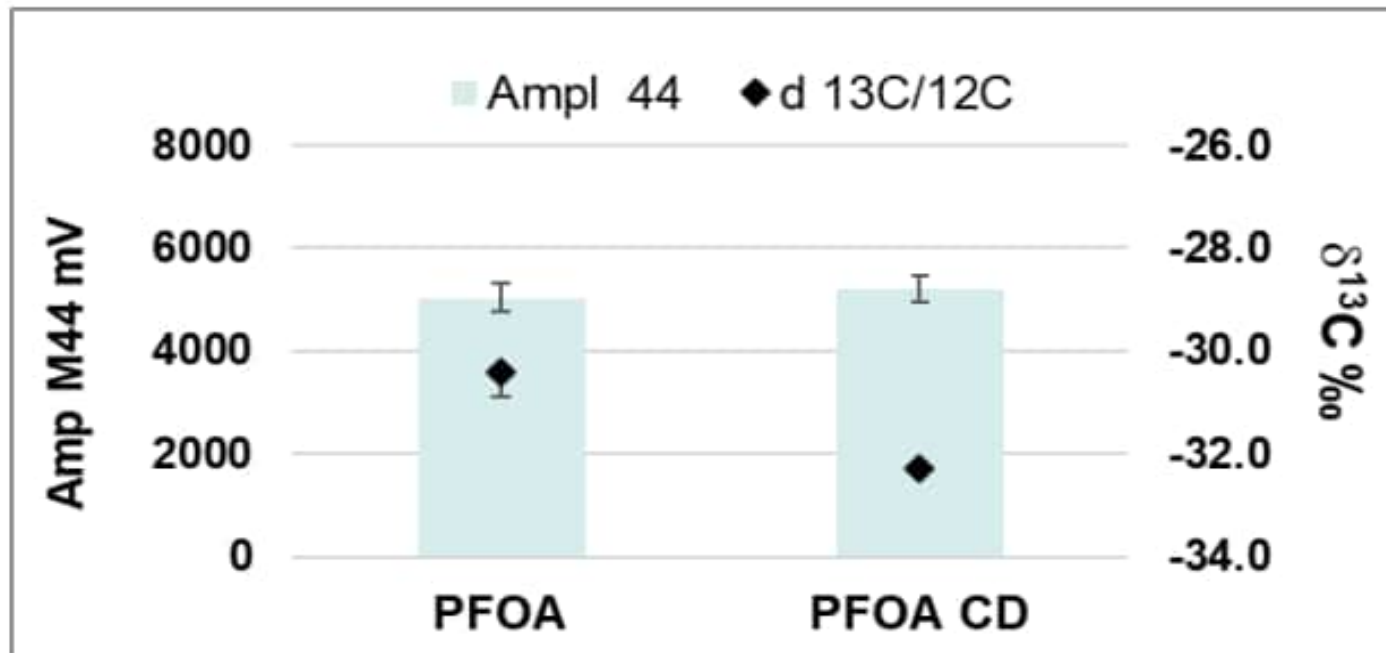
PFAS-Source Identification by Identification Tools by use of PFAS Data Bank on Commercial Products and AI-MVA-Tool (Artificial Intelligence Multi-Vector-Analysis)

Statistical examples based on more than 800 000 Environmental Analysis (NAS, 2023)



Ratios of median concentrations between different PFCAs and other PFAS

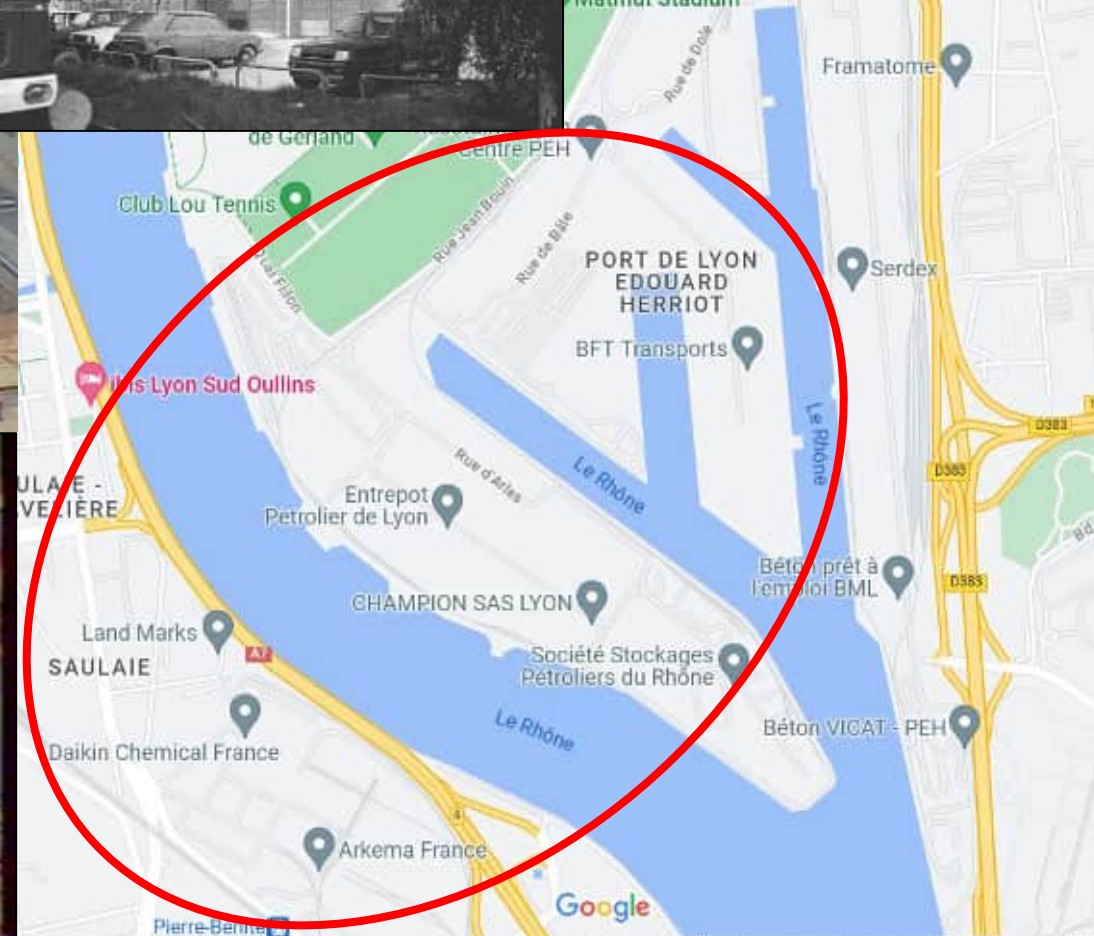
PFAS-Source-Identification via Isotope Ratios ($^{13}\text{C}/^{12}\text{C}$) :



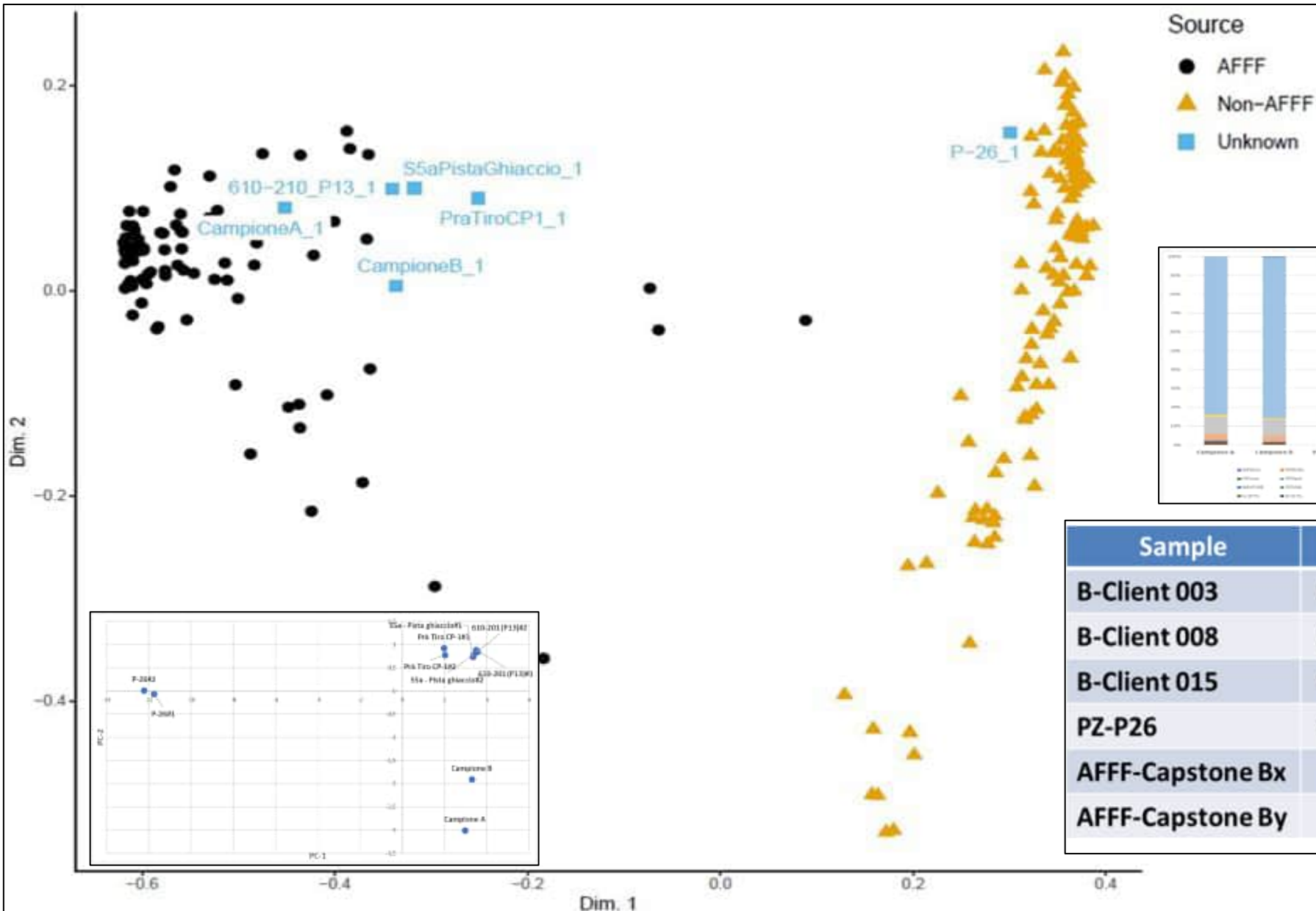
Application $^{13}\text{C}/^{12}\text{C}$ Ratios for identification of PFAS Sources: Example of PFOA (Kuntz 2023). PFAS Source Identifications with Sulfur-Isotopes for PFOS, etc. is in development.

PFAS: Per- & Polyfluor-Alkyl-Substanzen: Management von Umweltkontaminationen und Gesundheitsrisiken

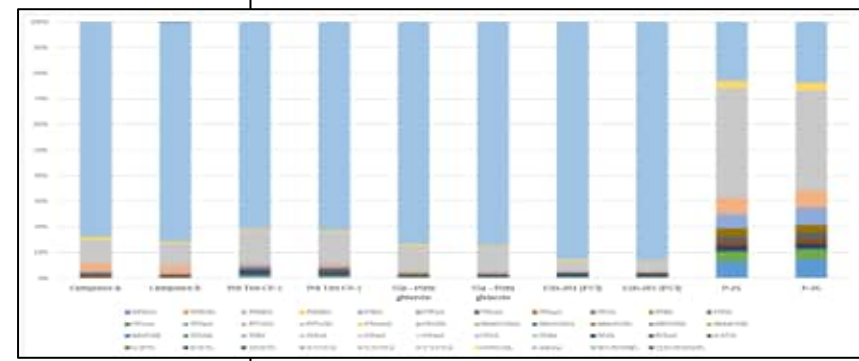
Fire event Harbor Edouard-Herriot 1987



Identification des Sources PFAS via Polytopic Data Bank et AI-MVA-Tool (Artificial Intelligence Multi-Vector-Analysis)

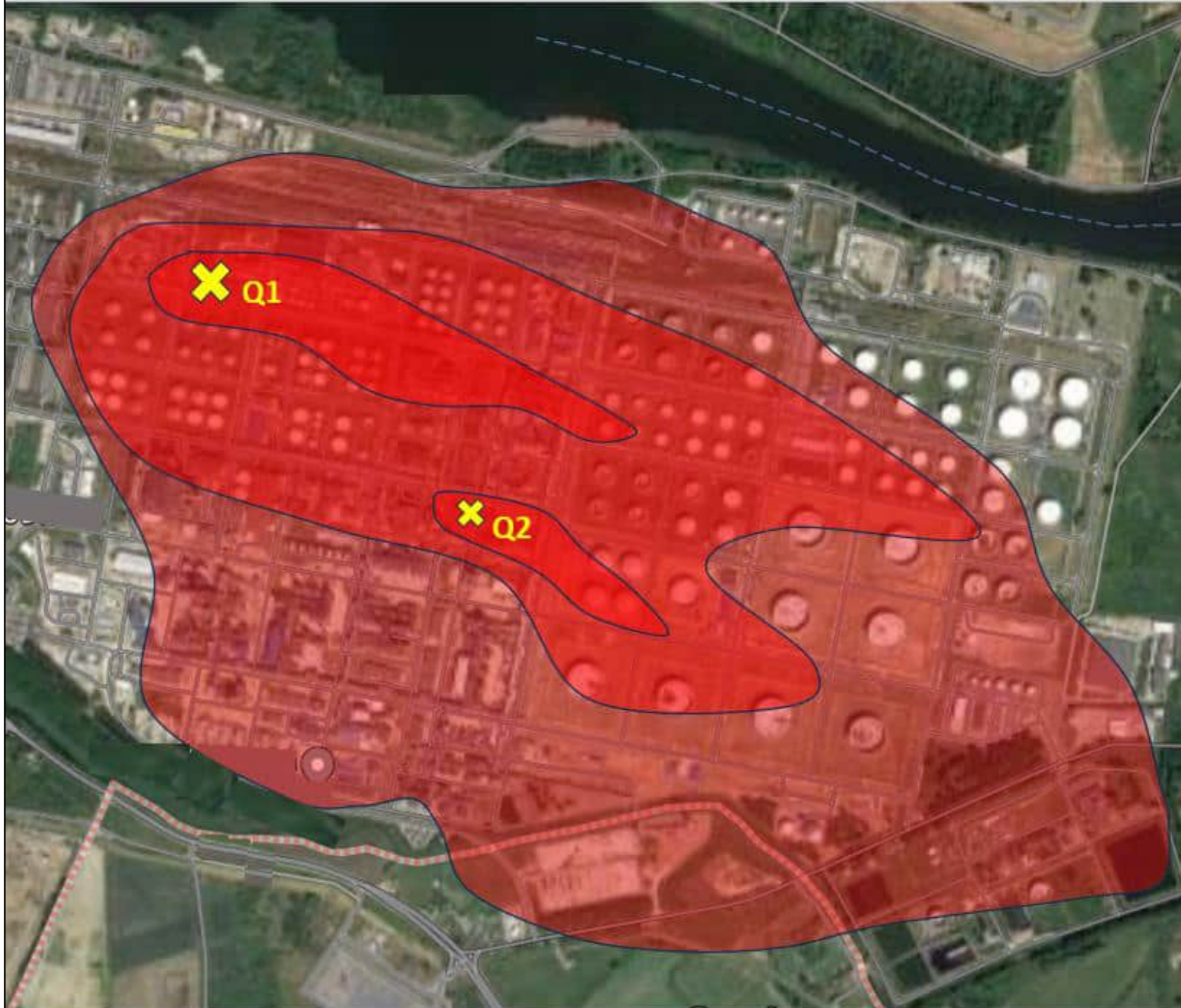


Source Differentiation in different Clusters, based on individual Ratios: CH (PFCAs to other PFAS)



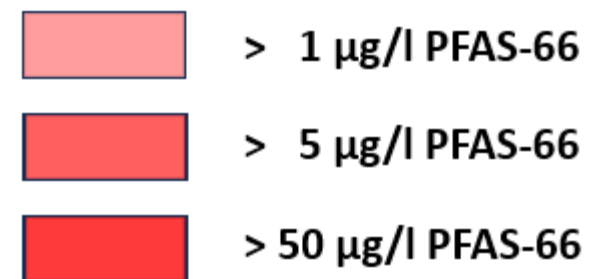
Sample	Type	AFFF	Non-AFFF
B-Client 003	Groundwater	66 %	34 %
B-Client 008	Groundwater	69 %	31 %
B-Client 015	Groundwater	78 %	22 %
PZ-P26	Groundwater	18 %	82 %
AFFF-Capstone Bx	AFFF	85 %	15 %
AFFF-Capstone By	AFFF	96 %	4 %

Example with Monti 2024



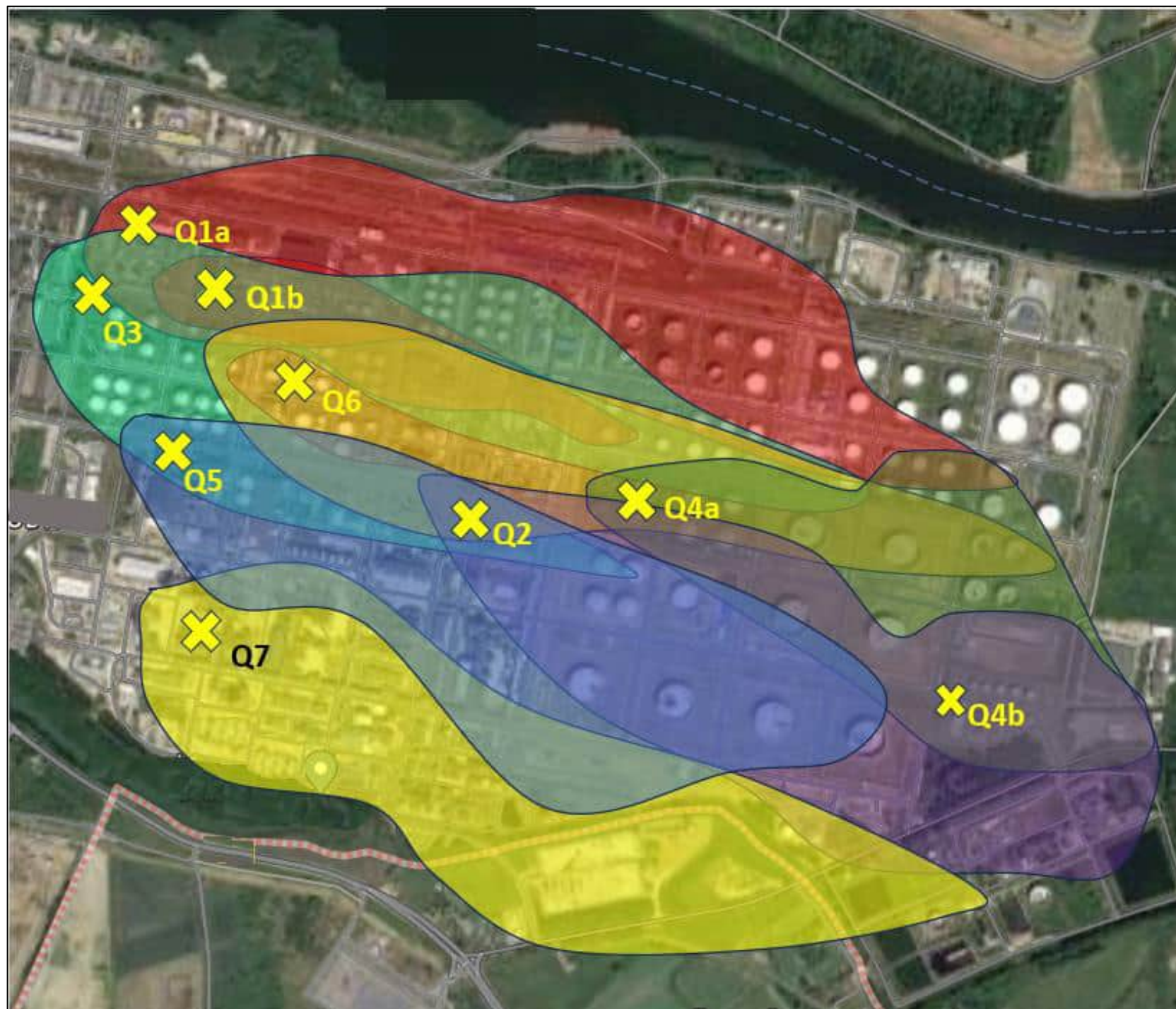
PFAS-66 total Presence in Groundwater

Identified PFAS
Sources S1 – S3



PFAS-Sources In Groundwater

MVA-AI: Dominating Clusters:
Sources S1 – S9



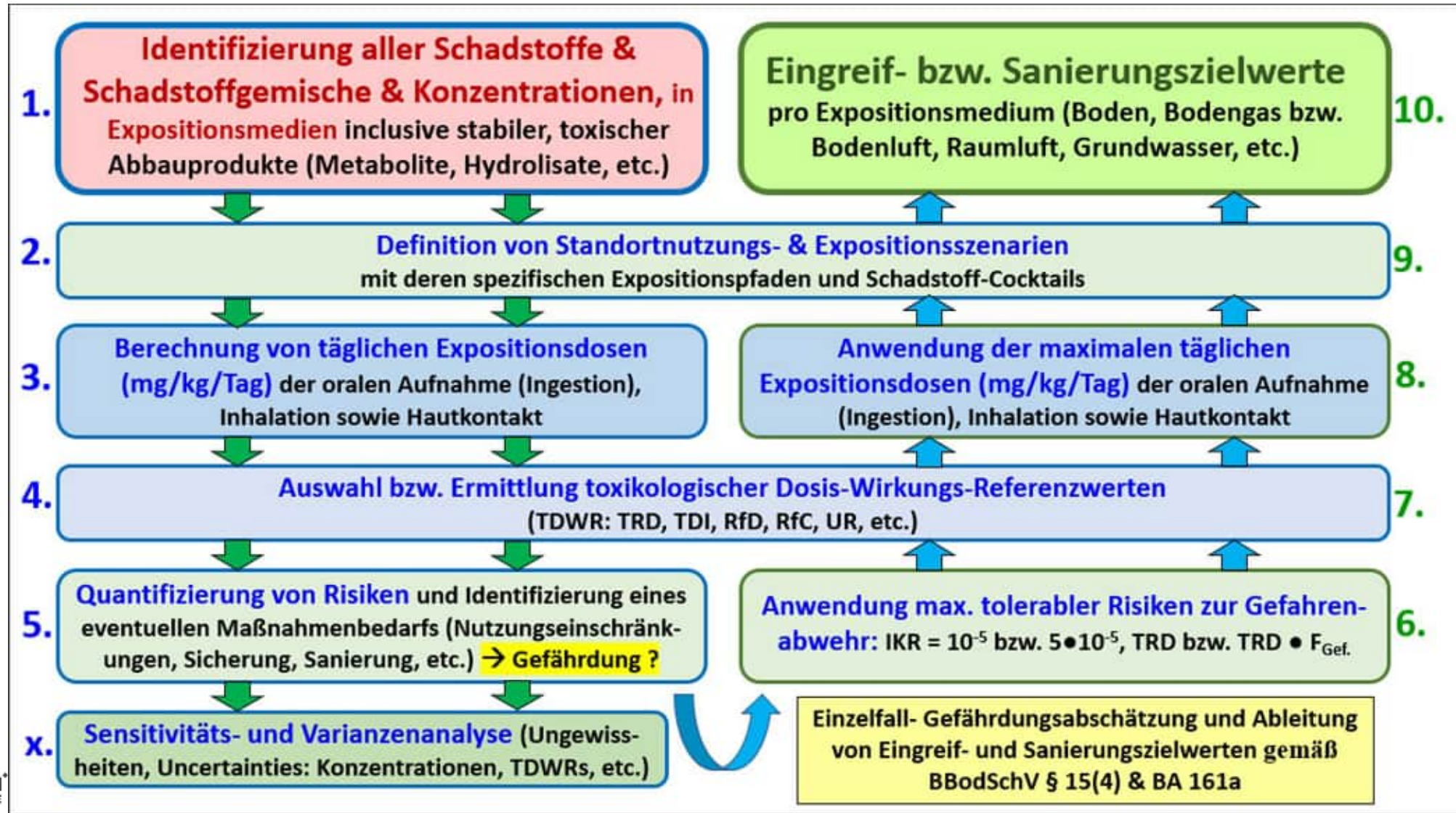
Q1ab: AFFF	6:2-FTAB, 6:2-FTS, 6:2-FTOH, PFHxA, PFPeA, PFBA, PFOS..
Q2: AFFF 2	6:2-FTS, 6:2-FTAB, 6:2-FTOH, PFHxA, PFPeA, PFOA, PFHxS
Q3: AFFF 3	6:2-FTS, 6:2-FTOH, PFHxA, PFPeA, PFBA, PFHxS, PFBS, 4:2-FTS....
Q4ab: Galv	PFHxA, PFPeA, PFOA, PFBA, PFOS, PFBS, PFHpA, PFBS...
Q5: Landfill	PFBA, PFPeA, PFHxA, PFOA, PFHpA, 8:2-FTOH, 5:3-FTCA..
Q6: Surfact	4:2-FTS, 6:2-FTS, PFHxS, PFBS, 6:2-FTOH, PFHxA, PFPeA....
Q7: Surfact	6:2-FTS, PFHxS, PFBS, 6:2-FTOH, PFHA, PFPeA, PFBA...

PFAS (PFC, PFT):






1. Was sind PFAS?: Schadstoffbeschreibung
2. PFAS-Kontaminationsquellen
3. Umweltchemie
4. Toxikologie
5. Vorschriften & Grenzwerte
6. Untersuchungen & **Risikobewertung**
7. Behandlungen & Sanierung



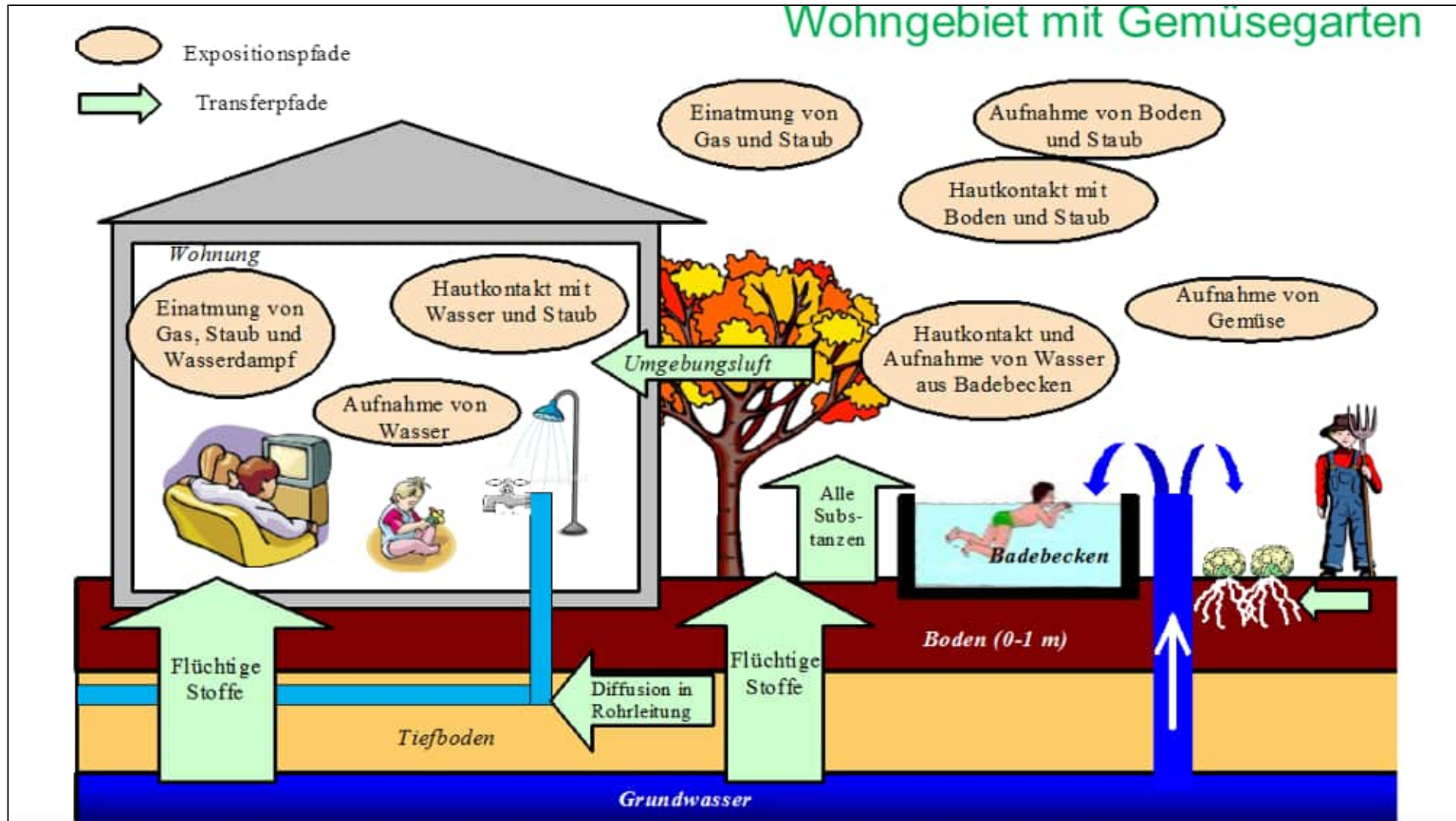
Standortspezifische Einzelfallbewertung gemäß BBodSchV § 15.4 sowie BA 161a



**Toxikologische
 Bewertung (TERQ)
 gemäß
 Unterregelwerk des
 BBodSchG (BA 161a)
 sowie Ableitung von
 standortspezifischen
 Maßnahmen- oder
 Eingreifwerten**

Risiko- schwellen	Individuelles Krebsrisiko IKR Tolerable resorbierte Dosis TRD		Vorsorge- und Gefahrenbereiche
Maßnahmen- werte	Risikoschwellen   $IKR = 5 \cdot 10^{-5}$ $TRD \cdot F_{Gef}$	$IKR > 5 \cdot 10^{-5}$ $EED / (TRD \cdot F_{Gef}) > 1$	Gefahrenbereich: Eine hinreichende Wahrscheinlichkeit des Schadenseintrittes besteht
Zwischen Prüfwerten und Maßnahmen- werte	  $IKR = 10^{-5}$ TRD	$10^{-5} < IKR \leq 5 \cdot 10^{-5}$ $1 < EED / TRD \leq$ $EED / (TRD \cdot F_{Gef})$	Besorgnisbereich: Behörden brauchen nicht unmittelbar einzugreifen
Prüfwerte		$IKR \leq 10^{-5}$ $EED / TRD \leq 1$	Vorsorgebereich indem eine Gefahr für die menschliche Gesundheit unwahrscheinlich ist

Definition von Standortnutzungs- und Expositionsszenarien (ganzheitlich)



Expositionspfade & -Szenarien: Brücksichtigung International (I) und in Deutschland (D)

Expositionspfade		Industrie/ Gewerbe		Park & Freizeit		Kinder- Spiel- Plätze		Wohnbe- bauung mit Grün ohne Gemüse- garten		Acker-bau oder Futter- mittel & Tier- zucht		Wohnbe- bauung mit Gemüse- garten	
		I	D	I	D	I	D	I	D	I	D	I	D
Inhala- tiv	Einatmung von Gas oder Dampf: Bodengas → Innen- & Außenluft	J	N	J	N	J	(J)	J	(J)	J	(J)	J	(J)
	Einatmung von Staub	J	(J)	J	(J)	J	(J)	J	(J)	J	(J)	J	(J)
	Einatmung von kontaminiertem Wasserdampf (Bad o. Dusche)	(J)	N	(J)	N	N	N	J	N	N	N	J	N
Oral	Direkte Bodenaufnahme: passiv / aktiv (Kinder / Eltern)	J	J	J	J	J	J	J	J	J	J	J	J
	Selbsterzeugte Nahrungsmittel	N	N	N	N	N	N	N	N	J	J	J	J
	Orale Aufnahme v. kontaminiertem Wasser: Bad o. Dusche	(J)	N	(J)	N	N	N	J	N	J	N	J	N
Dermal	Direkter Bodenkontakt	J	J	J	J	J	J	J	J	J	J	J	J
	Hautkontakt: Bad /Dusche	(J)	(J)	(J)	N	N	N	(J)	N	N	N	J	N
	Hautkontakt mit Wasser: Baden im Oberflächengewässer	N	N	J	(J)	N	N	(N)	(J)	N	N	(J)	N

**In Deutschland werden selten mehrere Expositionspfade kombiniert:
→ Meistens Anwendung: Boden → Mensch direkt / Boden → Pflanze.....**

Quantifizierung der täglichen Expositionsdosen (mg/kg/Tag):

Oral

$$TED_{oral} = C_m \cdot \frac{Q_f}{G} \cdot AF_{oral} \cdot JEF \cdot TEF$$

Inhalativ

$$TED_{inh} = (C_{il} \cdot TEF_{innen} + C_{al} \cdot TEF_{au\beta en}) \cdot AF_{inh} \cdot JEF \cdot \frac{Q_{al}}{G}$$

Dermal

$$TED_{derm} = C_w \cdot HK_w \cdot \frac{A_{exp}}{G} \cdot JEF \cdot TEF$$

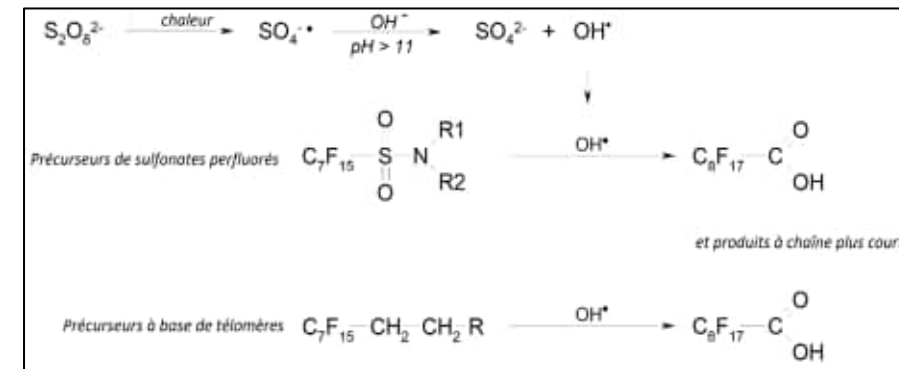
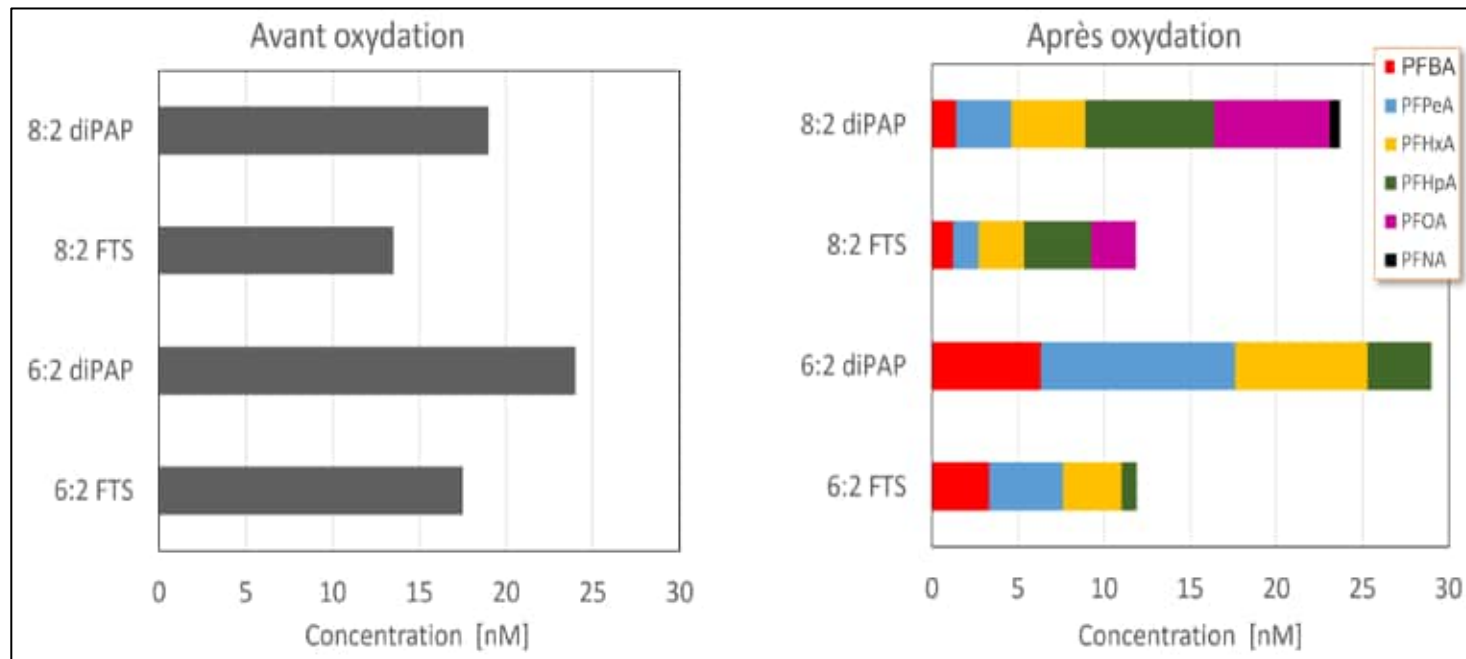
Berechnung der gesamten täglichen effektiven Expositionsdosis

$$TED_{tot} = TED_{oral} + TED_{inh} + TED_{derm}$$

- EED_{oral} : Effektive tägliche Expositionsdosis durch Aufnahme von Wasser und/oder Gemüse [mg/kg/Tag]
 C_m : Konzentration an Kontaminanten im Expositionsmedium [mg/l] im Wasser oder [mg/kg] in Gemüse
 $Q_f(K)$: Vom Kind aufgenommene Tagesdosis an Wasser beim Baden oder an Gemüse aus dem Kleingarten [l/Tag oder kg/Tag]
 $Q_f(E)$: Vom Erwachsenen aufgenommene Tagesdosis an Wasser beim Baden oder an Gemüse aus dem Kleingarten [l/Tag oder kg/Tag]
 $G(K)$: Gewicht des Kindes (15 kg)
 $G(E)$: Gewicht des Erwachsenen (70 kg)
 AF_{oral} : Absorptionsfaktor im Expositionspfad [= 1, entspricht 100 %]
 JEF : Jährliche Expositionsfrequenz [Tage/ 365 Tage]
 TEF : Tägliche Expositionsfrequenz [Std/ 24 Std].
 HK_w : Absorptionsrate bzw. Hautkontaktrate m. Wasser o. Boden [m/Tag]
 $A_{exp}(K)$: Exponierte Körperfläche beim Kind [m²]
 $A_{exp}(E)$: Exponierte Körperfläche beim Erwachsenen [m²]

TERQ*-Gefährdungsabschätzung / Einzelfallbetrachtung, gemäss BBodSchG § 15.4:

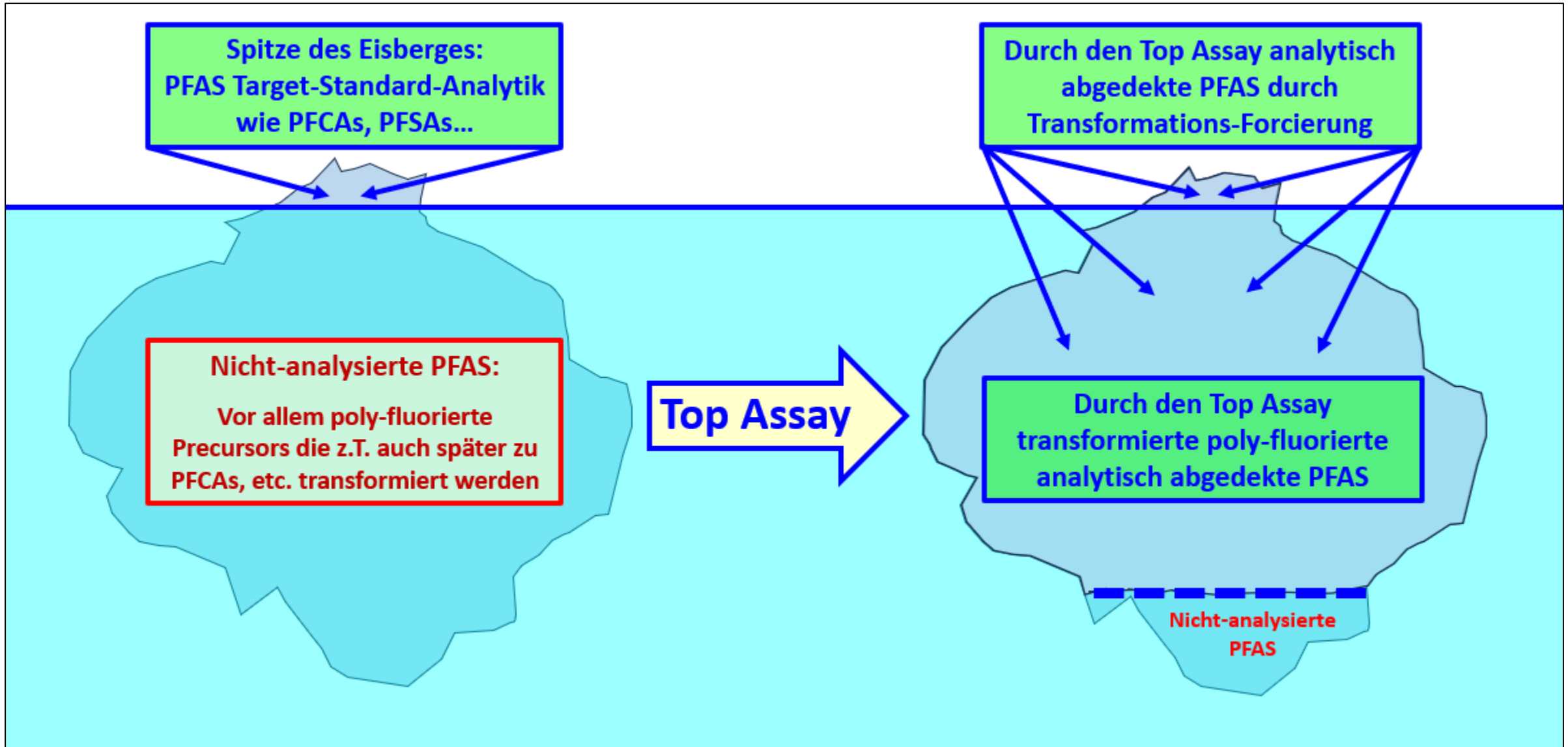
Integration der meisten polyfluorierten PFAS (Precursors) als finale PFCAs via TOP Assay zur Simulation der kompletten Bio-transformation



(Houtz and Sedlak: 2012, Glöckner et al.: 2021)

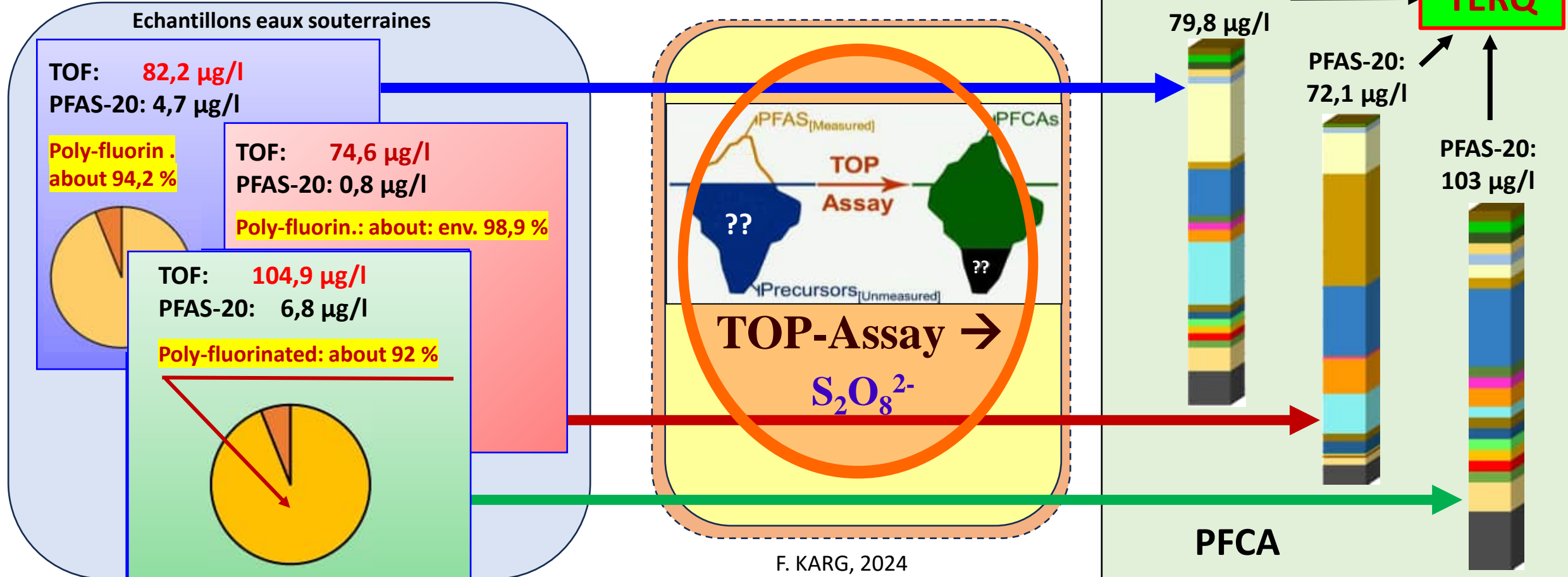
(*: Toxicologische Expositions-Risiko-Quantifizierung)

PFAS-Analytik mit und ohne Top Assay



PFAS: Per- & Polyfluor-Alkyl-Substanzen: Management von Umweltkontaminationen und Gesundheitsrisiken

TERQ-Integration der Poly-fluorierten PFAS via Top Assay:



- Perfluorbutansäure (PFBA)
- Perfluorbutansulfonsäure (PFBS)
- Perfluordecansäure (PFDA)
- Perfluordecansulfonsäure (PFDS)
- Perfluordodecansäure (PFDoA)
- Perfluordodecansulfonsäure (PFDoS)
- Perfluorheptansäure (PFHpA)
- Perfluorheptansulfonsäure (PFHpS)
- Perfluorhexansäure (PFHxA)
- Perfluorhexansulfonsäure (PFHxS)
- Perfluorononansäure (PFNA)
- Perfluorononansulfonsäure (PFNS)
- Perfluorooctansäure (PFOA)
- Perfluorooctansulfonsäure (PFOS)
- Perfluoropentansäure (PFPeA)
- Perfluoropentansulfonsäure (PFPeS)
- Perfluorotridecansäure (PFTriDA)
- Perfluorotridecansulfonsäure (PFTriDS)
- Perfluorundecansäure (PFUnA)
- Perfluorundecansulfonsäure (PFUnS)

Quantification of unknown poly-fluorinated PFAS and their corresponding final Perfluorinated Carboxylic Acids

Risiko- & Gefahrenschwellen in Deutschland → Stoffe mit Dosis-Wirkungsschwelle (systemtoxisch):

RI = TED/ATD = 1: **-International:** max. Risikoschwelle

-Deutschland: (Besorgniswert)

- **RI = TED/(ATD • F_{Gef}) = 1:** **-Deutschland:** Prüfwert
(*tiefstmöglicher Maßnahmenwert*) =
hinreichende Wahrscheinlichkeit
des Eintretens einer Gefahr
(*nicht-akzeptables Risiko*)

Der Gefahrenfaktor: F_{Gef} wird substanzspezifisch ermittelt

TED = tägliche Expositions-Dosis

ATD = Akzeptable tägliche Dosis (oder auch TRD: Tolerable resorbierte Dosis)

Nach Bundesanzeiger 161a

Risiko- & Gefahrenschwellen in Deutschland → Stoffe ohne Dosis-Wirkungsschwelle (CMR):

$IKR = TED \cdot UKR = 1 \cdot 10^{-5} =$ **-International:** max. Risikoschwelle
-Deutschland: (Besorgniswert)

$IKR = TED \cdot UKR = 5 \cdot 10^{-5} =$ **-Deutschland:** Prüfwert
(tiefstmöglicher Maßnahmenwert) =
hinreichende Wahrscheinlichkeit
des Eintretens einer Gefahr
(nicht-akzeptables Risiko)

UKR = Unitäres Krebsrisiko = UR: Unit Risk
IKR = Individuelles Krebsrisiko
TED = Tägliche Expositions-Dosis
Nach Bundesanzeiger 161a 28/08/99

Acceptable Risks (for ex.: ICR Individual Cancer Risk):

- **WHO:** WHO: World Health Organisation, M. Younes: International Symposium “Exposure and Risk Assessment with Respect to Contaminated Soil”, Munich from February 28 & 29/1996: **Acceptable Individual Cancer Risk: $ICR = 10^{-5}$** (= 1 additional Cancer per 100 000 Persons),
- **Austria:** UBA_{AT}: Umweltbundesamt (2011): **Acceptable Cancer Risk: $ICR = 10^{-5}$,**
- **UK:** DEFRA: Department for Environment, Food and Rural Affairs (2002): Report CLR9TOX1-10: **Acceptable Cancer Risk: $ICR = 10^{-5}$,**
- **Canada:** According HEALTH CANADA (2002) : “Atlantic Provinces” (NS, NB, PEI, and Nfld./Lab.): **Acceptable Cancer Risk: $ICR = 10^{-5}$,**
- **France:** MEDD: Circular from April 2017: **Acceptable Cancer Risk: $ICR = 10^{-5}$,**
- **Germany:** Bundesanzeiger BA 161a from August 28/1999 : Toxicological Screening Level (PW) for **Acceptable Cancer-Risk: $ICR = 10^{-5}$, Proved intervention level: $ICR = 5 \cdot 10^{-5}$**
- **Italy:** Decreto 52/2006 from 2006: **Acceptable Cancer Risk: $ICR = 10^{-5}$,**
- **Netherlands:** RIVM (2001): Document 711701 025 Re-Evaluation of Human-Toxicological Maximum Permissible Risk levels: **Acceptable Cancer Risk: $ICR = 10^{-5}$,**
- **Switzerland:** Vollzugshilfe zur Altlastenverordnung / Herleitung von Konzentrationswerten BAFU: 29.01.2014. **Acceptable Cancer Risk: $ICR = 10^{-5}$,**
- **USA:** DOH: **Acceptable Cancer Risk: $ICR = 10^{-6} - 10^{-4}$.** In the most cases and States an **Acceptable Cancer Risk of $ICR = 10^{-5}$** is used.
- **Australia, Hong-Kong, Denmark, Japan, New Zealand, Norway, Sweden: $ICR = 10^{-5}$** is used.

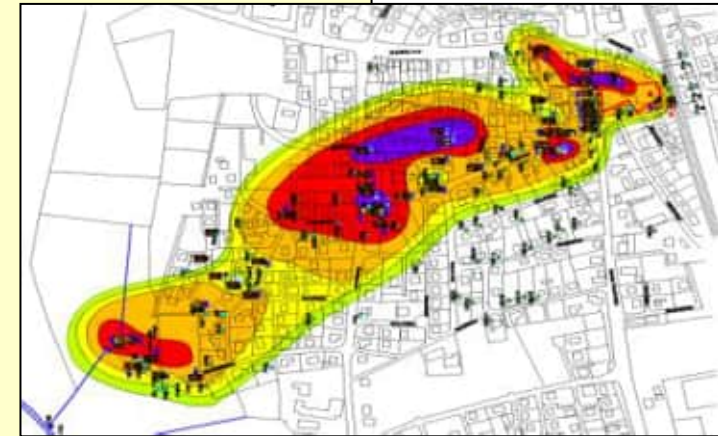
Methodik gemäss IPCS & WHO: 2009, AFSSET 2010, UBA-AT 2011 + US-EPA 2024, ITVA-E1-AH7: 2022 (Draft) etc.

➤ Toxikologische Expositionsrisiko-Quantifizierung (TERQ) von Vielstoff-Belastungen über die Anwendung der **Effekt-Additivitäten** pro Zielorgan, basierend auf den **Dosis-Additivitäten** (mit vergleichbaren Effekten), *ausgenommen bei Kenntnis von:*

➤ **Synergien** (Interaktionen) welche Effekte **grösser** als additive Wirkungen zeigen,

➤ **Antagonismen** (Interaktionen) welche Effekte **kleiner** als additive Wirkungen zeigen,

In this case the slope of the dose-response curve of a Chemical is altered



→ **In Deutschland** : vereinzelt ähnliche Anwendung, z.B. GFS-PFC-Bericht (seit 2017)

Methodik gemäss IPCS & WHO: 2009, AFSSET 2010, UBA-AT 2011 + US-EPA 2024, ITVA-E1-AH7: 2022 (Draft) etc.

Es muss unterschieden werden, zwischen:

A. Aggregate Exposure bzw. Einzelstoff-Belastung (über alle Expositionspfade),

B. Cumulative Exposure bzw. Vielstoff-Belastung mit kombinierten Risiken der Exposition durch Schadstoff-Cocktails:

➤ Identifizierung v. CT-MOA-Schadstoff-Gruppen m. gleichen toxikologischen Wirkmechanismen (oder Ziel-Organen bzw. Zielgeweben) = CT-MOA: Common Toxic Mode of Action

➤ “Dose Addition is assumed for different MOA Subgroups”

In this case the slope of the dose-response curve of a Chemical is not altered)

IPCS: International Program on Chemical Safety. Assessment of combined Exposures to Multiple Chemicals: Report WHO / IPCS



Methodik gemäss IPCS & WHO: 2009, AFSSET 2010, UBA-AT 2011 +
US-EPA 2024, ITVA-E1-AH7: 2014 (Draft) etc.

➤ Anwendung der **Effekt-Additivitäten bei CT-MOA-Gruppen** basierend auf den **Dosis-Additivitäten** (mit vergleichbaren Wirkungen):

- **Risiko-Addition von individuellen Schadstoffen mit gleichen Wirkungen bzw. Zielorganen:**

→ Systemtoxischer Risiko-Index: $RI = \text{Exposition}_1 / \text{ATD} + \text{Exposition}_2 / \text{ATD} + \dots$

→ Individuelles Krebs-Risiko: $\text{IKR} = \text{Exposition}_1 \cdot \text{UR} + \text{Exposition}_2 \cdot \text{UR} + \dots$

➤ Berücksichtigung der **Synergie-Effekte bei CT-MOA-Gruppen**:

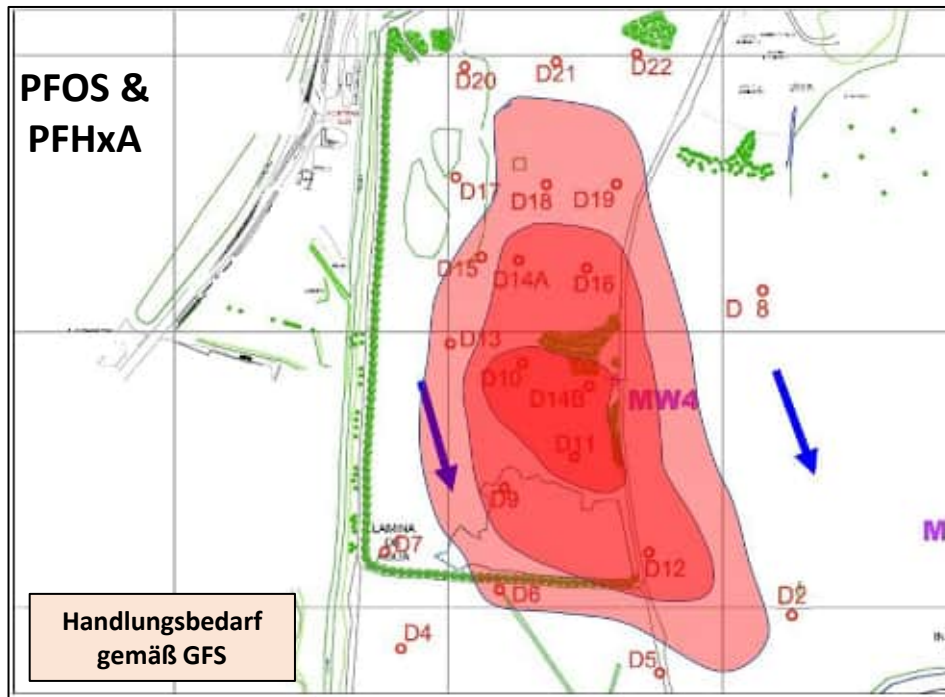
- Addition der Risiken der individuellen Schadstoffe z.B. m. Potenz-Korrekturen wie z.B. bei **toxikologischen Äquivalenzfaktoren (TEQ)** zu PCDD/F, PAK, PCB, **RPF bei PFAS...**
- Anwendung von toxikokinetischen & toxikodynamischen Modellen (PBTK...)

Anmerkung: In Deutschland: TRGS 402: Addition aller Risiken der Einzelstoffe.

Humantoxikologische Bewertung: GW (TERQ)

Überschreitung der GFS-Werte

als Handlungsbedarf zum PFOS (Perfluoroktansulfonsäure) & PFHxA: Perfluorhexansäure
(vertraulicher Standort „N“)



Substanz	GW maximale Konzentration	SS-MW : Standortspezifische Maßnahmenwerte			
		Wohngebiet GW ohne Nutzung	Wohngebiet GW-Nutzung mit Bewässerung von Grünflächen	Wohngebiet GW-Nutzung mit Bewässerung von Gemüsegärten	Wohngebiet GW-Nutzung mit Bewässerung und Wasseraufnahme
		Expositions-pfade →	Inhalation von PFAS mit Wasserdämpfen	Inhalation von PFAS mit Wasserdampf und Hautkontakt mit GW	Inhalation von PFAS mit Wasserdampf u. Hautkontakt mit GW sowie orale Aufnahme von Gemüse
µg/L	µg/L	µg/L	µg/L	µg/L	
PFBA	0,015	447 ⁽¹⁾	447 ⁽¹⁾ (45 000)	447 ⁽¹⁾ (40 000)	10 (7) ⁽²⁾
PFPeA	0,031	3 ⁽²⁾	3 ⁽²⁾	3 ⁽²⁾	3 ⁽²⁾
PFHxA	0,190	180 000	75 000	70 000	8
PFHpA	0,036	7	6	5	0,3 (0,06) ⁽²⁾
PFOA	0,350	0,15	0,14	0,12	0,1 ⁽²⁾ (0,03)
PFNA	<0,010	62,5 ⁽¹⁾	15	10	0,06 ⁽²⁾ (0,006)
PFDA	<0,010	4,270 ^(*)	7,5	7	0,1 ⁽²⁾ (0,03)
PFBS	0,120	6 ⁽²⁾	6 ⁽²⁾	6 ⁽²⁾	6 ⁽²⁾
PFHxS	6,90	243 ⁽¹⁾	243 ⁽¹⁾ (20 000)	243 ⁽¹⁾ (15 000)	7
PFHpS	0,530	0,3 ⁽²⁾	0,3 ⁽²⁾	0,3 ⁽²⁾	0,3 ⁽²⁾
PFOS	6,40	300	25	20	0,1 ⁽²⁾ (0,004)
PFOSA	<0,010	0,1 ⁽²⁾ (0,024)	0,1 ⁽²⁾ (0,023)	0,1 ⁽²⁾ (0,022)	0,1 ⁽²⁾ (0,02)

(1) Limitierung an GFS-Werten

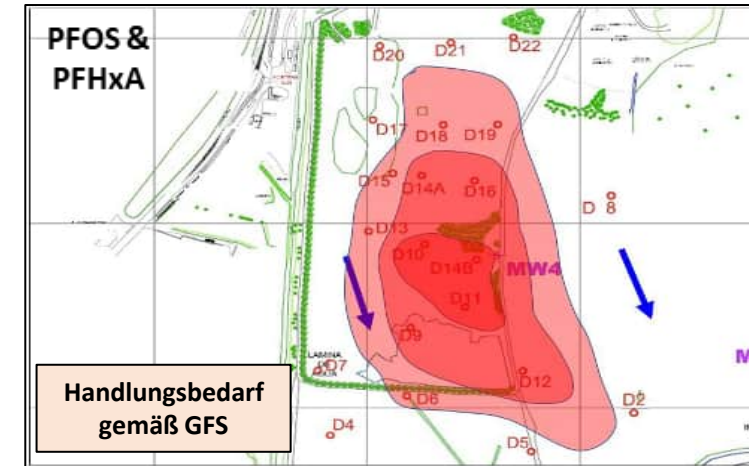
Humantoxikologische Bewertung (GW)

(TERQ: Toxikologische Expositions-Risiko-Quantifizierung)

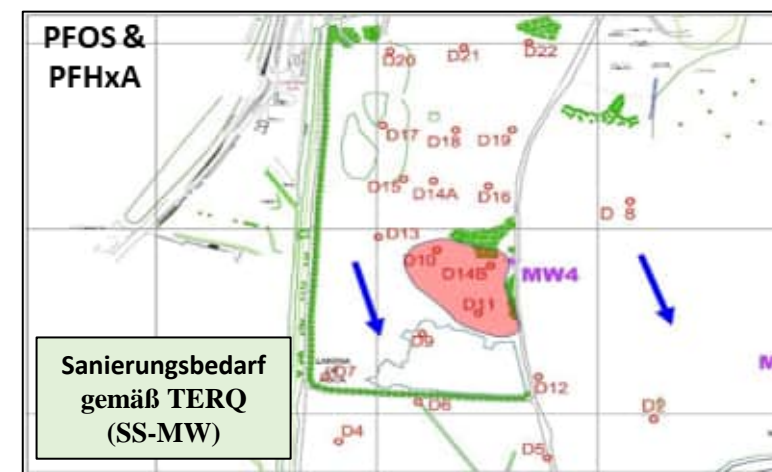
- **Ableitung von SS-MW zur Gefahrenabwehr:** Standort-spezifischen Maßnahmenwerten für Grundwasser: Standort „N“ (vertraulich).
- **Oben: Überschreitung der GFS-Werte (mit Handlungsbedarf) und darunter die Überschreitung der TERQ-San-Ziele** (SS-MW: standortspezifische Maßnahmenwerte).
- Die angewendeten **TERQ-SS-MW** als Sanierungsziele garantieren eine **maximale Rechtssicherheit** sowie transparente Gefahrenabwehr gemäss BA 161a (BBodSchG).
- **Anwendung als San-Ziele:** z.B.: geom. Mittel aus SS-MW & GFS (siehe auch ÖRV in Oberhausen, Köln, etc.)

Reduzierung der Sanierungskosten -73%.

TERQ-Sanierungsbedarf gemäß SS-MW standortspezifische Maßnahmenwerte zum PFOS (Perfluoroktansulfon-säure) & PFHxA: Perfluorhexansäure: Standort N (vertraulich): Wohnbebauung mit GW-Nutzung in Gärten.

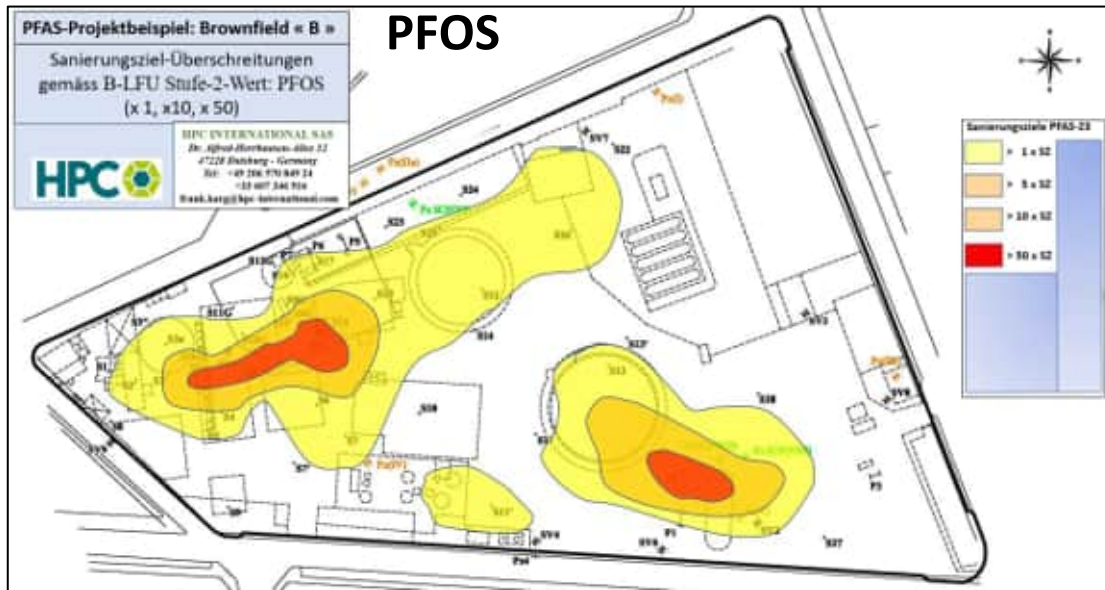


Überschreitung der GFS-Werte als Handlungsbedarf zum PFOS (Perfluoroktansulfonsäure) & PFHxA: Perfluorhexansäure.



Humantoxikologische Bewertung: Boden (TERQ)

- **Initialer Sanierungsbedarf gemäß Listenwerte (B-LFU Stufe-2-Wert zum PFOS + PFCAs (Perfluorktansulfonsäure) > 0,0004 mg/l Boden-Eluat. Vertraulicher Standort "F"**



Initialer Sanierungsbedarf gemäß B-LFU Stufe 2 Wert

Substanz	SS-MW (Standort-Spezifische Massnahmenwerte)				Bayern Stufe 1 + BW (GFS)* (2017)	Bayern Stufe 2 LFU
	Industrielle Nutzung / Bedeckung von Böden		Industrielle Nutzung / Keine Bedeckung von Böden			
	Expositionspfade (EP): Inhalation von Dämpfen (Bodenluft)		EP: Inhalation von Dämpfen Inhalation von Staub Hautkontakt mit Böden/Staub Aufnahme von Böden/Staub			
	Boden mg/kg	Eluat mg/l	Boden mg/kg	Eluat mg/l	Eluat mg/l	Eluat mg/l
PFBA	1 000 ⁽¹⁾	0,355	800	0,355	0,01	0,004
PFPeA	-	0,012 ⁽²⁾	-	0,012 ⁽²⁾	0,003	0,012
PFHxA	600	3 980	300	1 990	0,006	0,024
PFHpA	0,000025	0,001 ⁽²⁾ (0,00011)	0,00002	0,001 ⁽²⁾ (0,000088)	0,0003	0,001
PFOA	0,000002	0,0004 ⁽²⁾ (0,0000035)	0,0000015	0,0004 ⁽²⁾ (0,000027)	0,0001	0,0004
PFNA	1 000 ⁽¹⁾	0,0496	0,8	0,0496	0,00006	0,00025
PFDA	1 000 ⁽¹⁾	0,00339	4	0,00339	0,0001	0,0004
PFBS	-	0,024 ⁽¹⁾	-	0,024 ⁽¹⁾	0,006	0,024
PFHxS	1 000 ⁽¹⁾	0,193	200	0,193	0,0001	0,0004
PFHpS	-	0,001 ⁽¹⁾	-	0,001 ⁽¹⁾	0,0003	0,001
PFOS	0,003	0,0197	0,002	0,0131	0,0001 0,00023	0,0004
H ₄ PFOS	-	0,0004 ⁽¹⁾	-	0,0004 ⁽¹⁾	0,0001	0,0004
PFOSA	0,000006	0,0004 ⁽¹⁾ (0,0000007)	0,000005	0,0004 ⁽¹⁾ (0,0000006)	0,0001	0,0004

(1) Limitierung an der Wasserlöslichkeit (2) Limitierung an Stufe 2-Werten

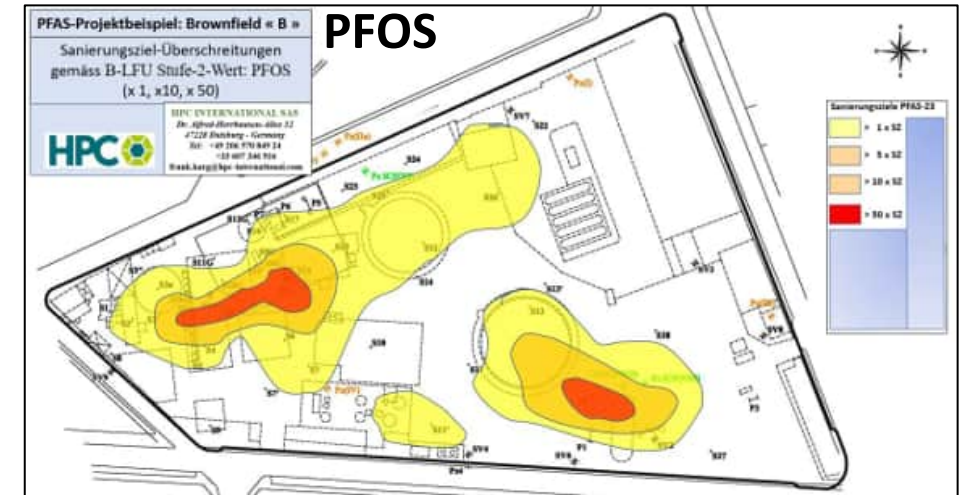
Humantoxikologische Bewertung (Boden) (TERQ: Toxikologische Expositions-Risiko-Quantifizierung)

- **Überschreitungen von Sanierungszielen zeigen oben die ursprünglichen Listengrenzwerte (basierend auf B-LFU Stufe-2-Werten) und darunter die TERQ-Sanierungsziele (SS-MW: standort-spezifische Maßnahmenwerte zur Gefahrenabwehr)**

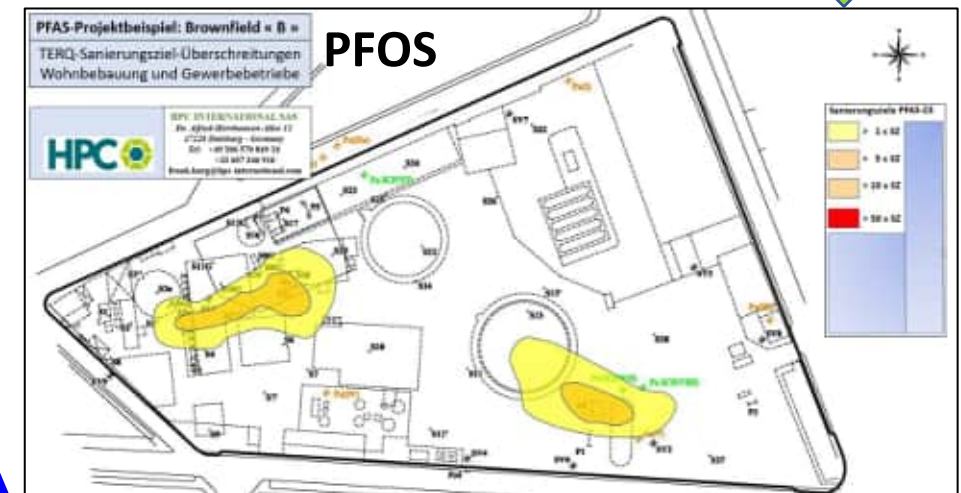
Initialer Sanierungsbedarf gemäß Listenwerte (B-LFU Stufe-2-Wert zum PFOS (Perfluorktansulfonsäure) + PFCAs > 0,0004 mg/l Eluat.

TERQ Sanierungsbedarf gemäß SS-MW standortspezifische Maßnahmenwerte zum PFOS (Perfluorktansulfonsäure) > 0,02 mg/l Eluat:
Standort F (vertraulich). Industrielle Nutzung.

Reduzierung der Sanierungskosten -81 %.



Initialer Sanierungsbedarf gemäß B-LFU Stufe 2 Wert

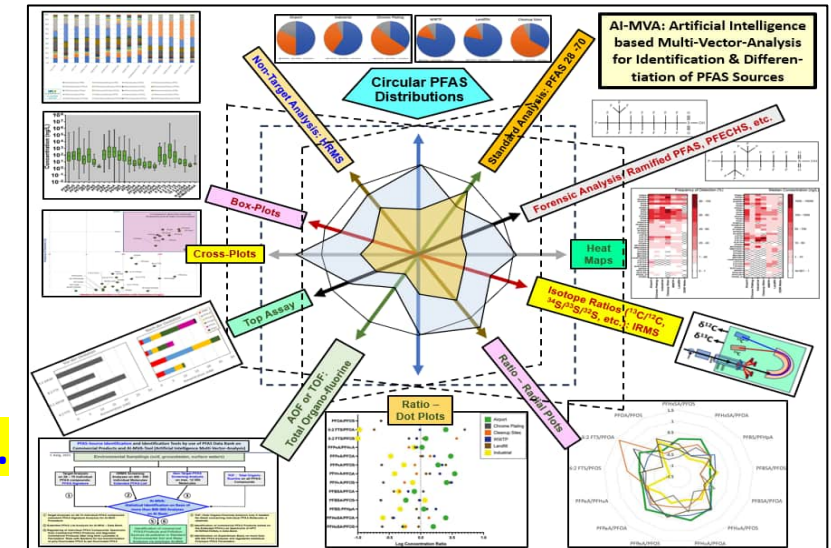
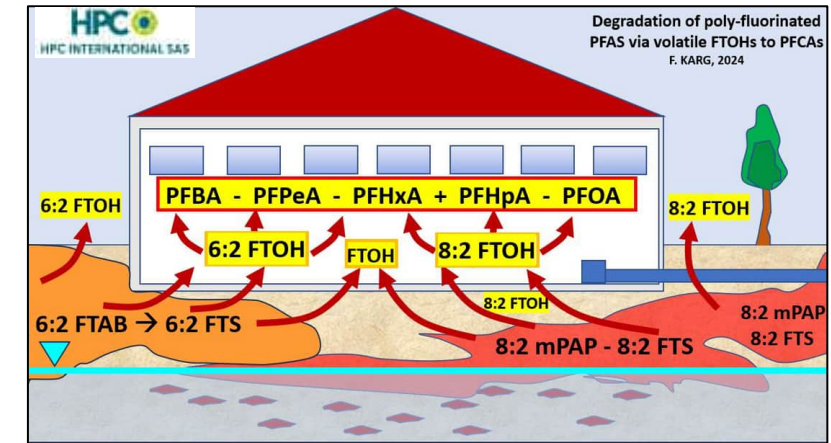


Sanierungsbedarf gemäß TERQ (SS-MW)

Zusammenfassung PFAS (PFC, PFT):

Kontakt: frank.karg@hpc-international.com

- Es existieren > 9 000 PFAS-Verbindungen.
- PFAS sind sehr löslich, aber auch bio-akkumulierbar.
- gibt tausende von Standorten, die durch PFAS belastet sind: Feuerlöschstandorte (wie auf Flughäfen usw.), Industrieanlagen, landwirtschaftliche Flächen mit Klärschlamm usw.
- Per- und Polyfluoralkylsubstanzen (PFAS) sind nicht-flüchtig, ausgenommen flüchtige FTOH: Fluorotelomer-Alkohole.
- Polyfluorierte PFAS werden in stabile perfluorierte PFAS biotransformiert.
- **PFAS-Schadstoff-Quellen können mit Hilfe von MVA-AI: Multi-Vector-Analyse unter Anwendung künstlicher Intelligenz identifiziert und differenziert werden.**
- **Standortuntersuchungen und TERQ-Risikobewertungen sind erforderlich zur Rechtssicherheit & Optimierung von Sanierungskosten! Poly-fluorierte Precursors können grösstenteils per TOP-Assay via PFCAs integriert werden.**



PFAS: Per- & Polyfluoro-Alkyl-Substanzen: Management von Umweltkontaminationen und Gesundheitsrisiken

Vielen Dank für Ihre Aufmerksamkeit!

Dr. (PhD) Frank Karg / Wissenschaftlicher Direktor der HPC-Gruppe (INOGEN JV) und
Vorstand – CEO-Präsident der HPC INTERNATIONAL / Frankreich, Deutschland, Ungarn, Balkan, etc.

E-Mail: frank.karg@hpc-international.com / Tel: +33 607 346 916

