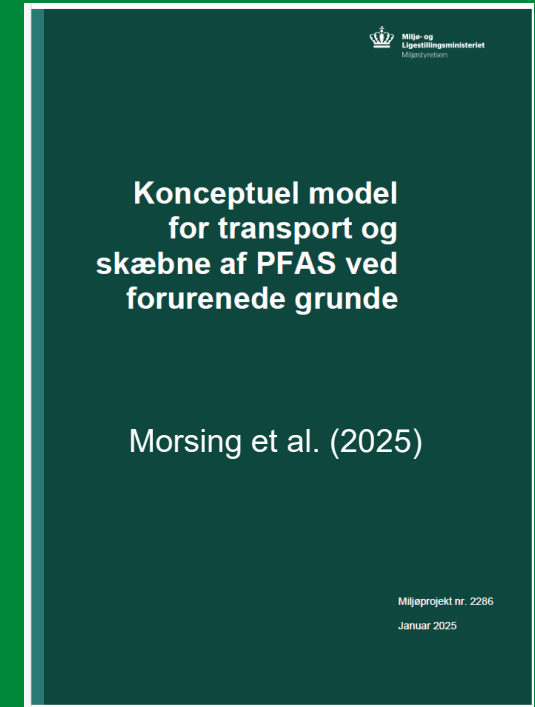


DTU

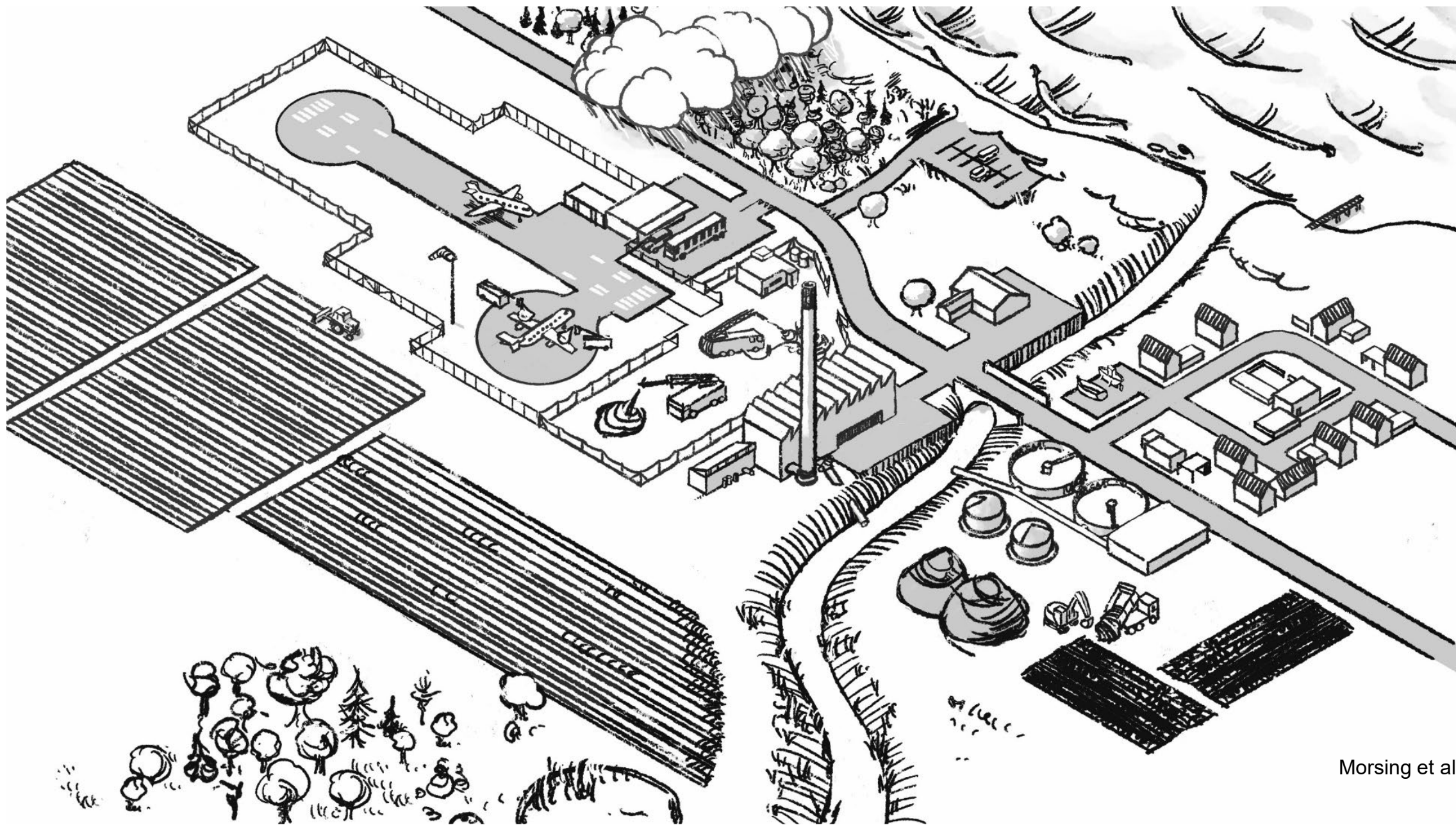




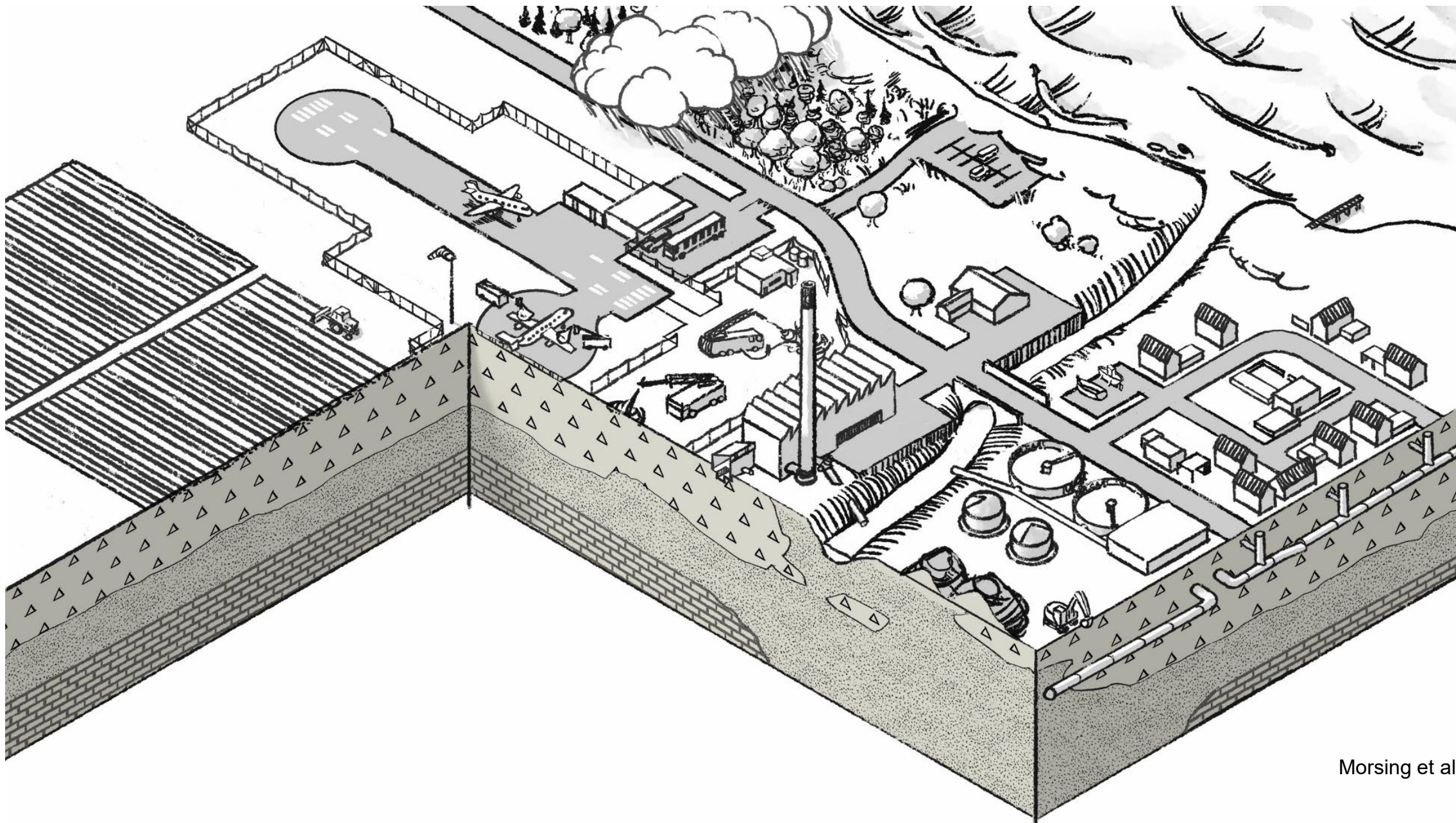
Konceptuel model for PFAS – styrende processer og rammesættende overblik

Poul L. Bjerg, Laura Morsing, Esther Schott, Nika Bilic, Henning Wienkenjohan, Clarissa Settimi, Marie Tholoniati, Klaus Mosthaf, Annika S. Fjordbøge

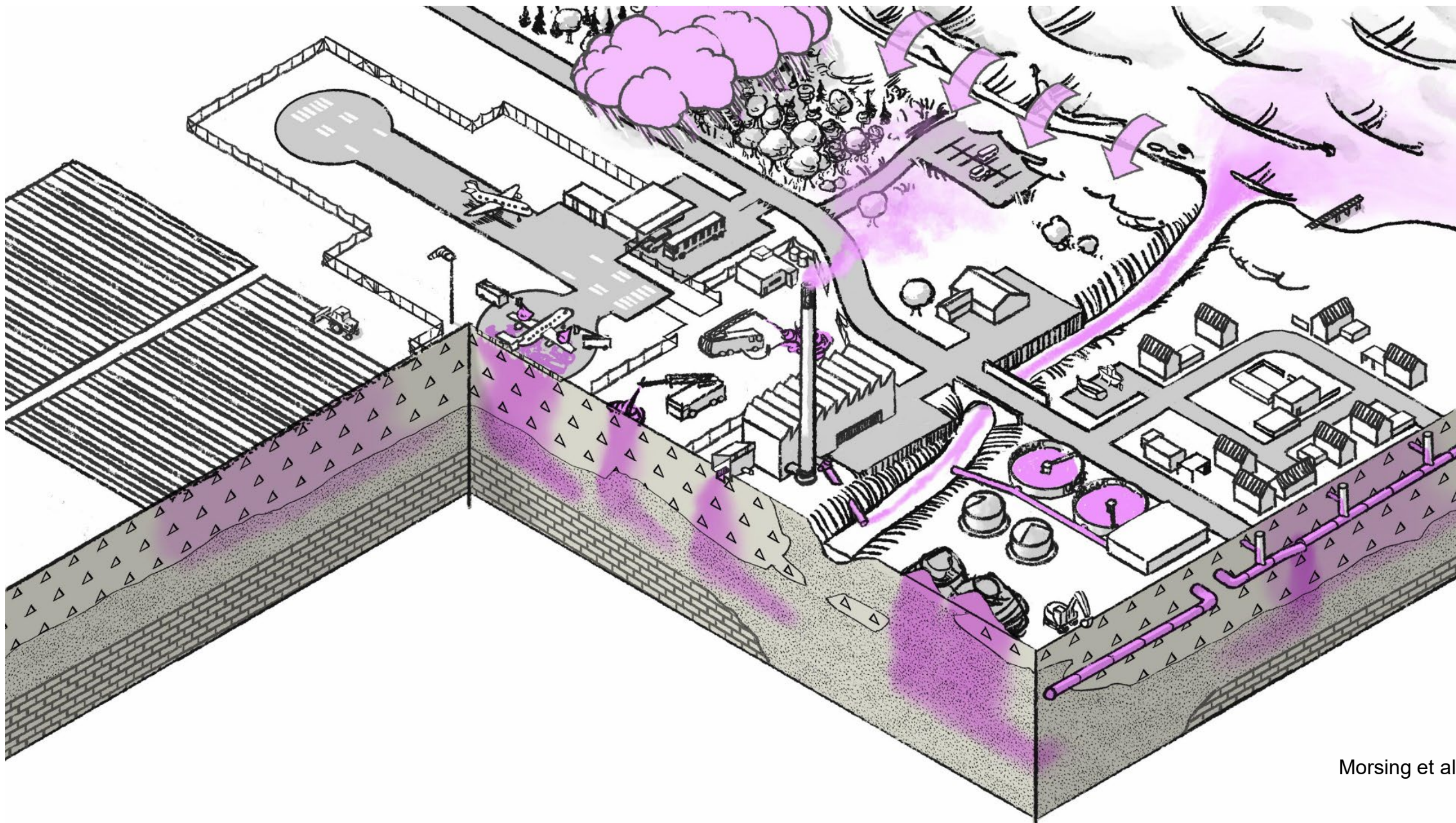




Morsing et al. (2025)

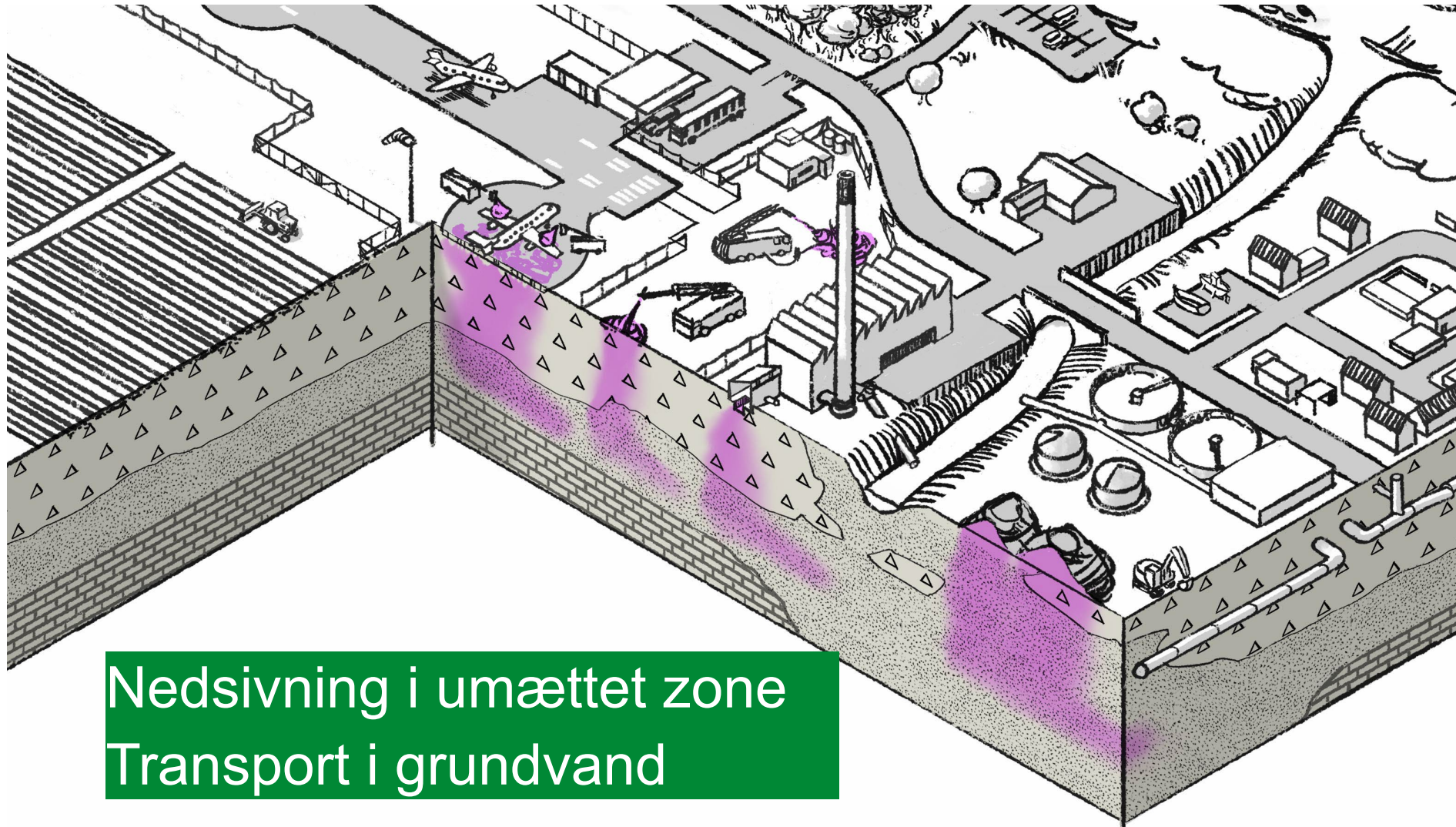


Morsing et al. (2025)



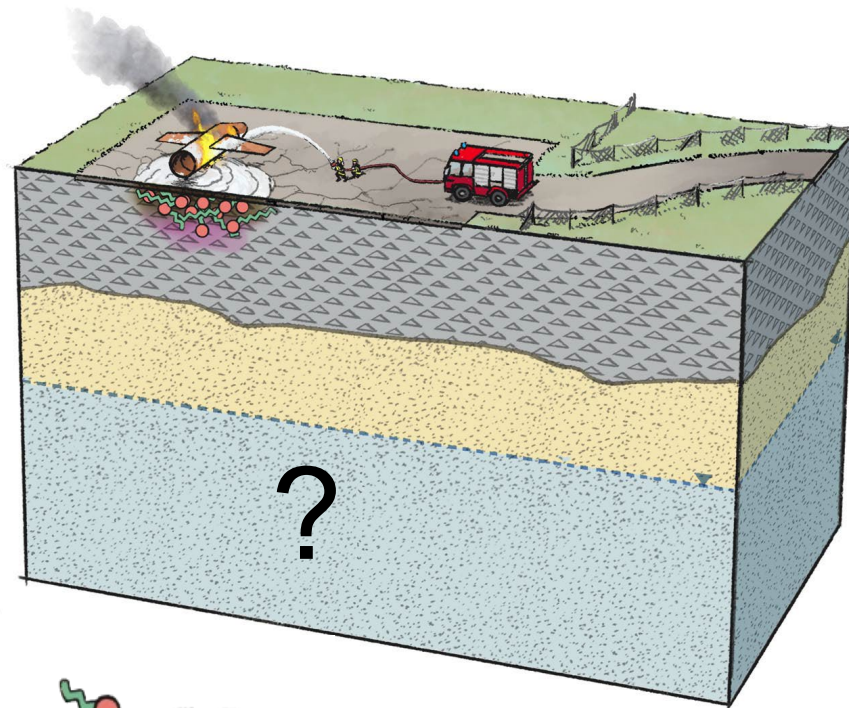
Morsing et al. (2025)

PFAS forurenede grunde i Danmark



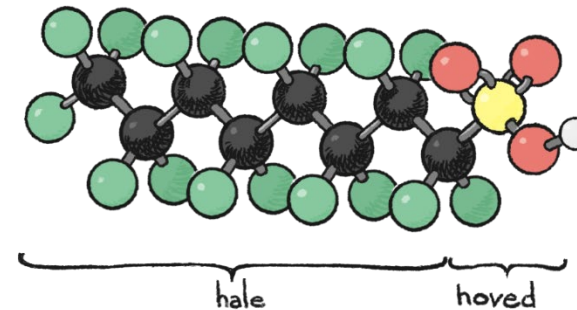
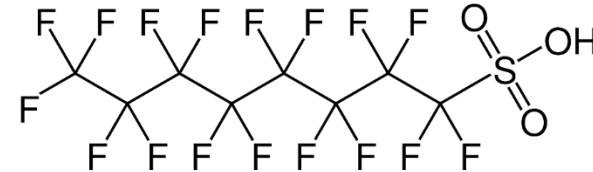
Konceptuel forståelse af PFAS transport

Forureningsundersøgelser



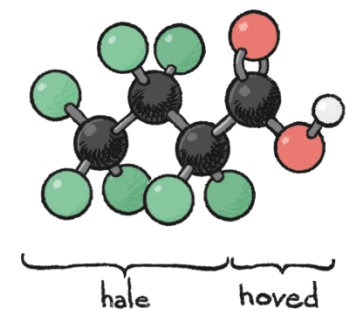
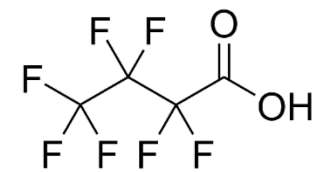
Perfluorerede sulfonsyrer

PFOS



Perfluorerede carboxylsyrer

PFBA



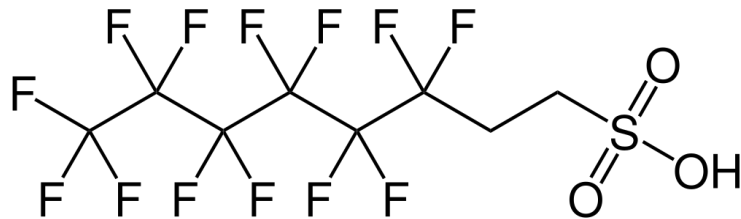
Morsing et al. (2025)

Husk PFAS ≠ PFAS

Hvad er PFAS?

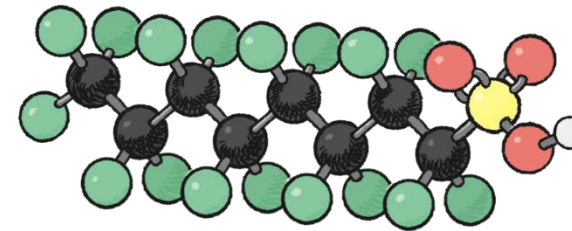
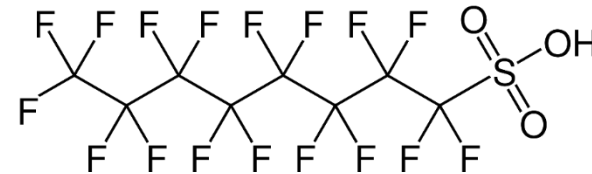
- **Per-** og **polyFluoroAlkyl Stoffer**
 - Fuldt og delvist fluorerede stoffer
- Forskellige funktionelle grupper
- Kort- og langkædede PFAS
 - Langkædet > 5 fluorerede C atomer
- Precursors – nedbrydelige forstadier

6:2 FTS



Perfluorerede sulfonsyrer

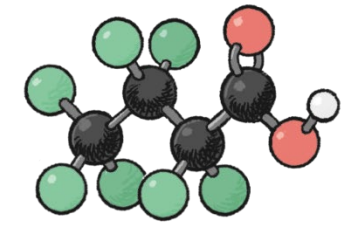
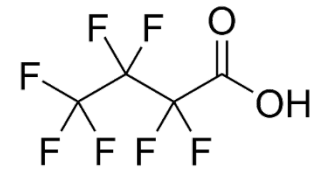
PFOS



Hydrofob og lipofob

Perfluorerede carboxylsyrer

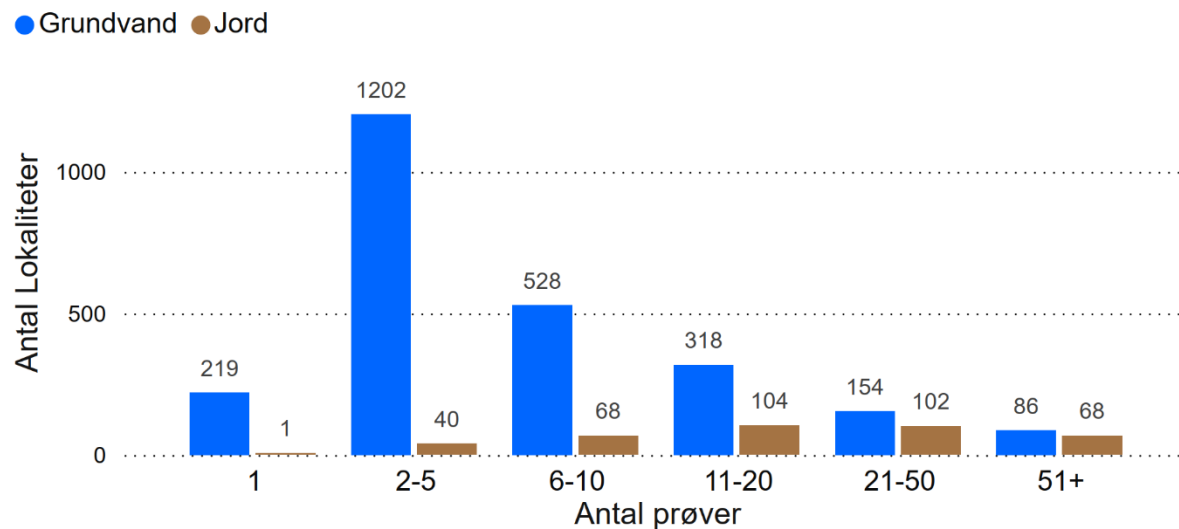
PFBA



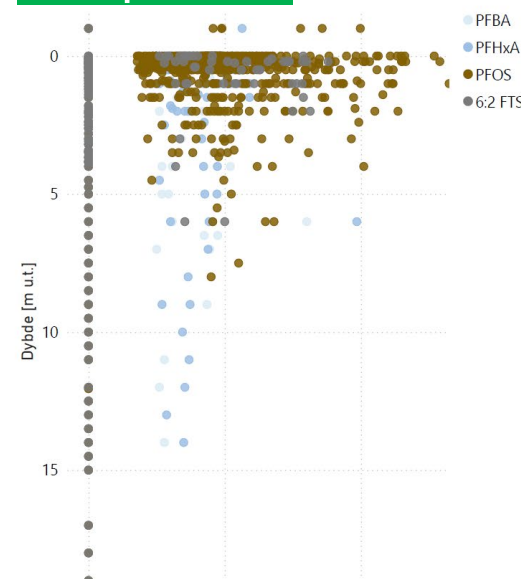
Hydrofil

PFAS fund fra danske forureningsundersøgelser

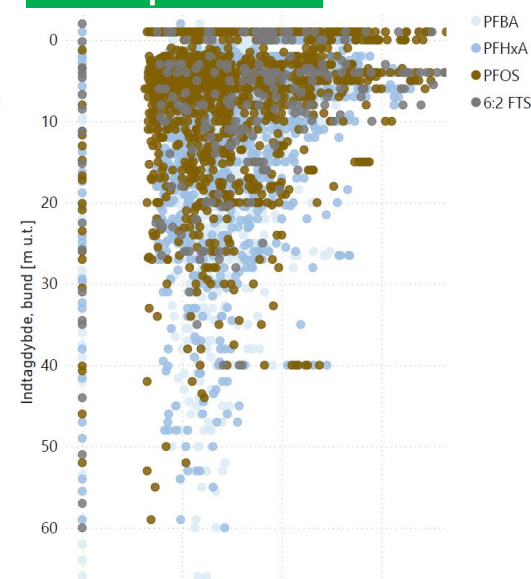
- Størstedelen af PFAS massen findes i de øverste ca. 10 meter
- Kortkædede PFAS træffes ofte dybere end langkædede PFAS
- I jord detekteres PFOA og PFOS hyppigt
- I grundvand detekteres både kortkædede og langkædede PFAS
- **Svært at udlede noget generelt for enkeltstoffer**



Jordprøver



Vandprøver



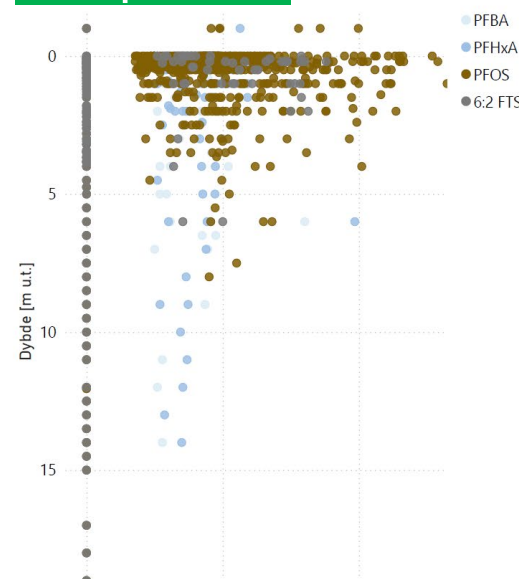
PFAS fund fra danske forureningsundersøgelser

- Størstedelen af PFAS massen findes i de øverste ca. 10 meter
- Kortkædede PFAS træffes ofte dybere end langkædede PFAS
- I jord detekteres PFOA og PFOS hyppigt
- I grundvand detekteres både kortkædede og langkædede PFAS

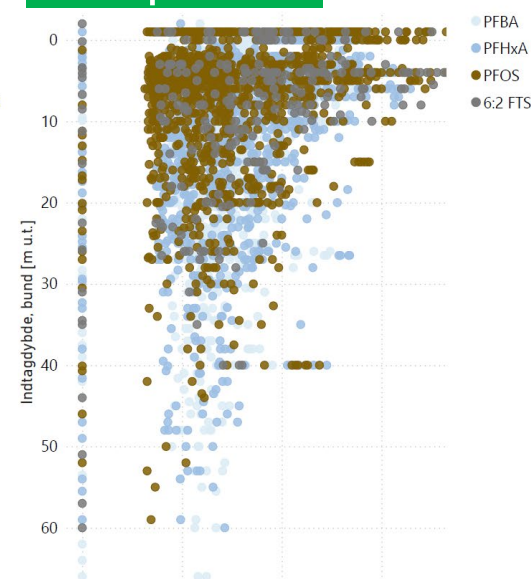
• Dominerende forureningskilder?

Branche	Antal lokaliteter i alt	Antal lokaliteter ▼	Grundvand, C > 10.000 ng/l	Antal lokaliteter	Jord >100 µg/kg TS
Brandvæsen og redningskorps	113	8	PFBA, PFPeA, 6:2 FTS, PFBS, PFHpA, PFHxA, PFHxS, PFOS	7	PFOS
Lufthavne	12	5	PFOS, 6:2 FTS, PFHxS, PFPeA, PFHxA	2	6:2 FTS, PFOS
Losse- og fyldpladser	468	4	PFOS, PFPeA, 6:2 FTS, PFDA, PFHxA, PFHxS, PFHpA, PFOA	3	PFOS, PFOA, PFDA
Forsvar	41	3	PFOS, PFPeA, 6:2 FTS, PFHxA, PFBA, PFHxS	2	PFOS
Jern- og metalvareindustri	348	3	PFHxS, 6:2 FTS, PFOS, PFOA		
Overfladebehandling af metal	180	3	PFOS, 6:2 FTS	3	PFOS
Gummi- og plastindustri	140	2	PFOS, PFOA		
Tekstilindustri	75			2	PFOS

Jordprøver

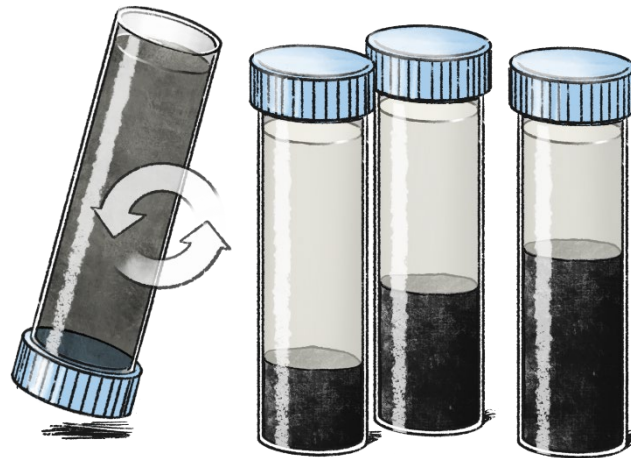


Vandprøver

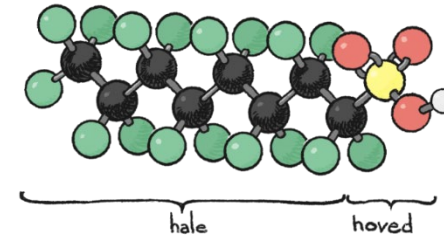
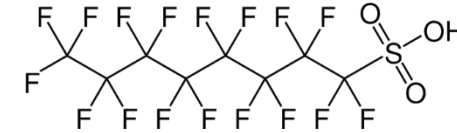


Binding til jordpartikler

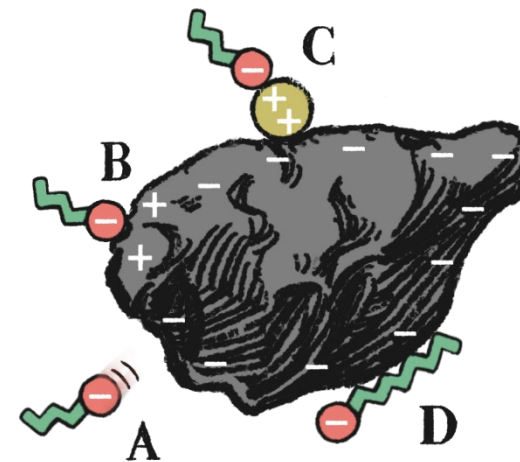
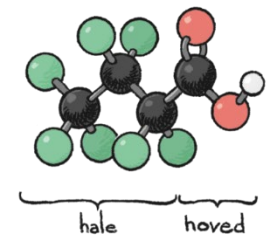
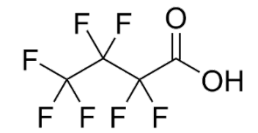
- Forureninger kan bindes/sorbere til jord
- K_d angiver forureningens fordeling mellem sorberet fase på jord og vandfase



PFOS



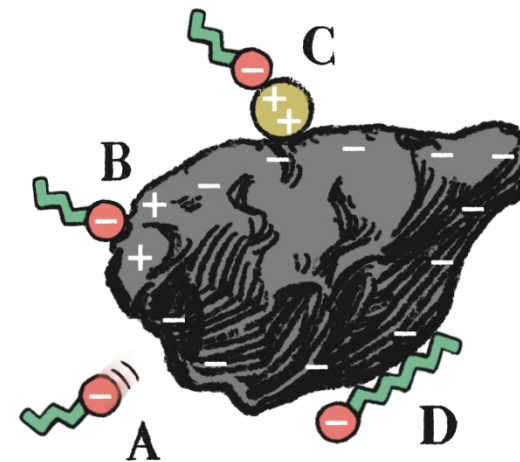
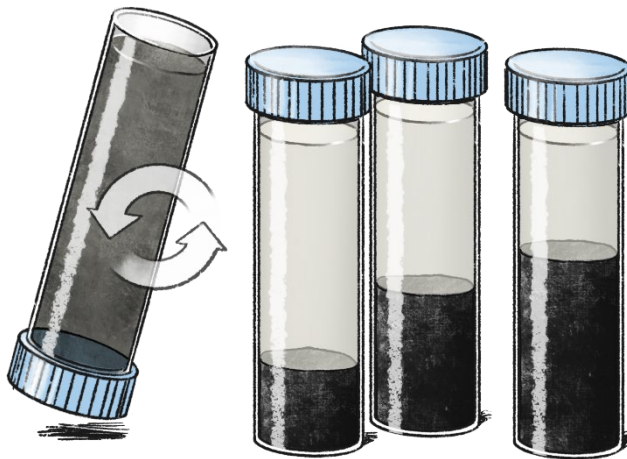
PFBA



- A – elektrostatisk frastødning,
B – elektrostatisk tiltrækning,
C – divalent-bro effekter,
D – hydrofobisk interaktion.

Binding til jordpartikler

- Forureninger kan bindes/sorbere til jord
- K_d angiver forureningens fordeling mellem sorberet fase på jord og vandfase

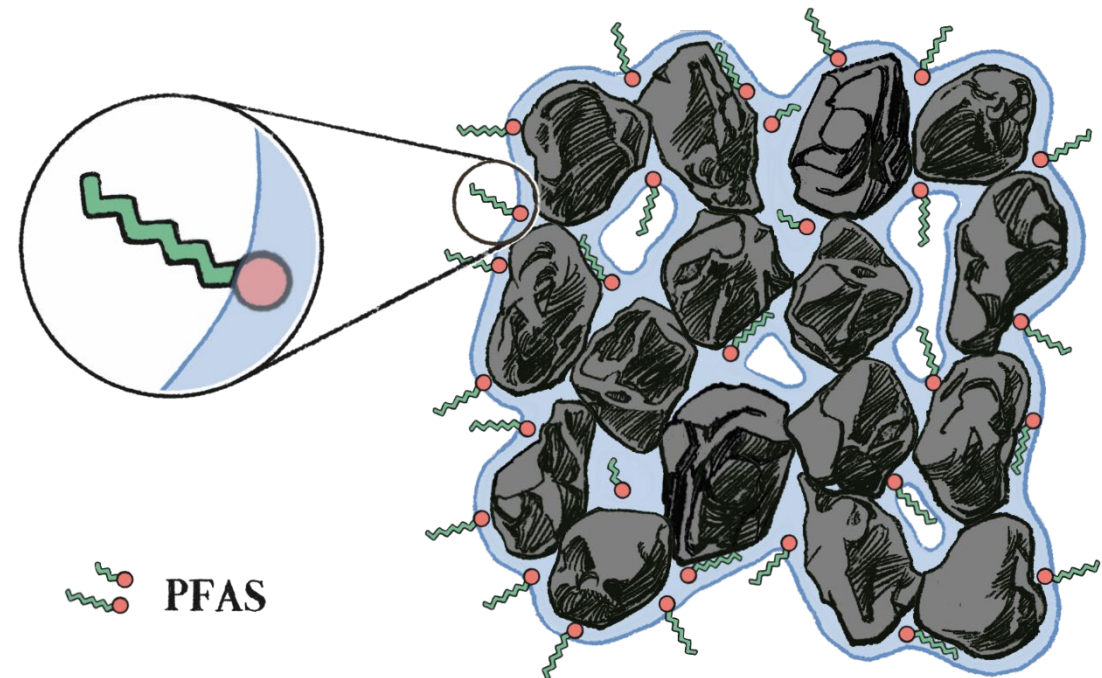


- A – elektrostatisk frastødning,
B – elektrostatisk tiltrækning,
C – divalent-bro effekter,
D – hydrofobisk interaktion.

Binding til luft-vand grænsefladen

Umættede forhold

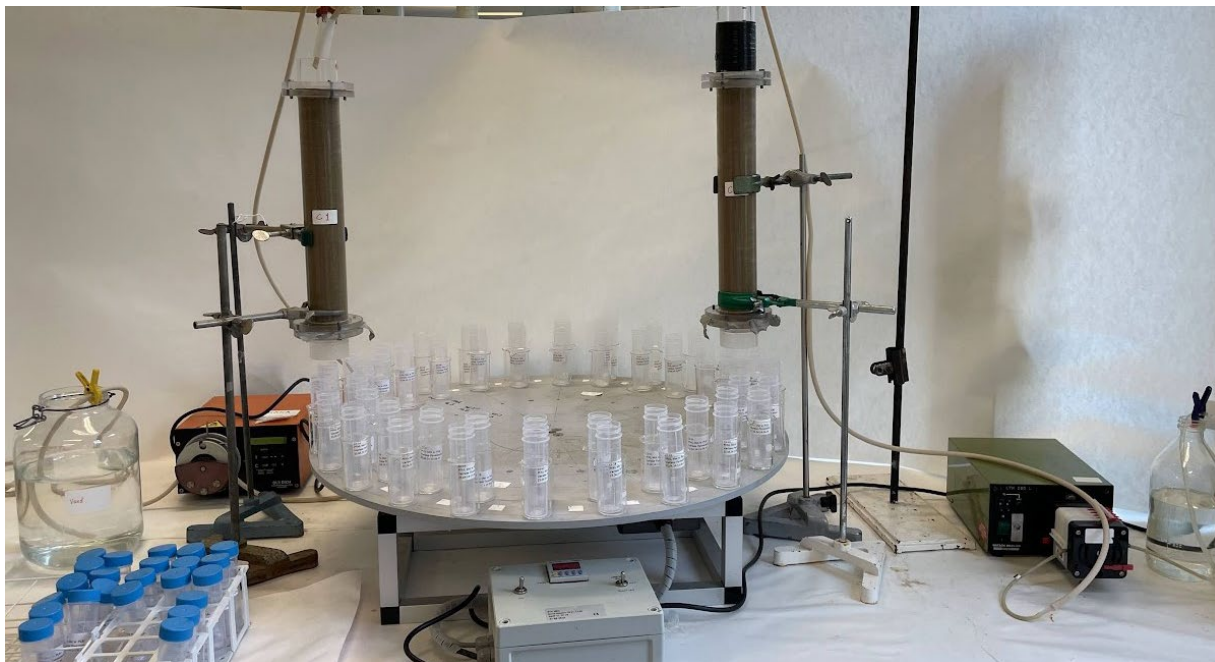
- Adsorption til luft-vand grænsefladen



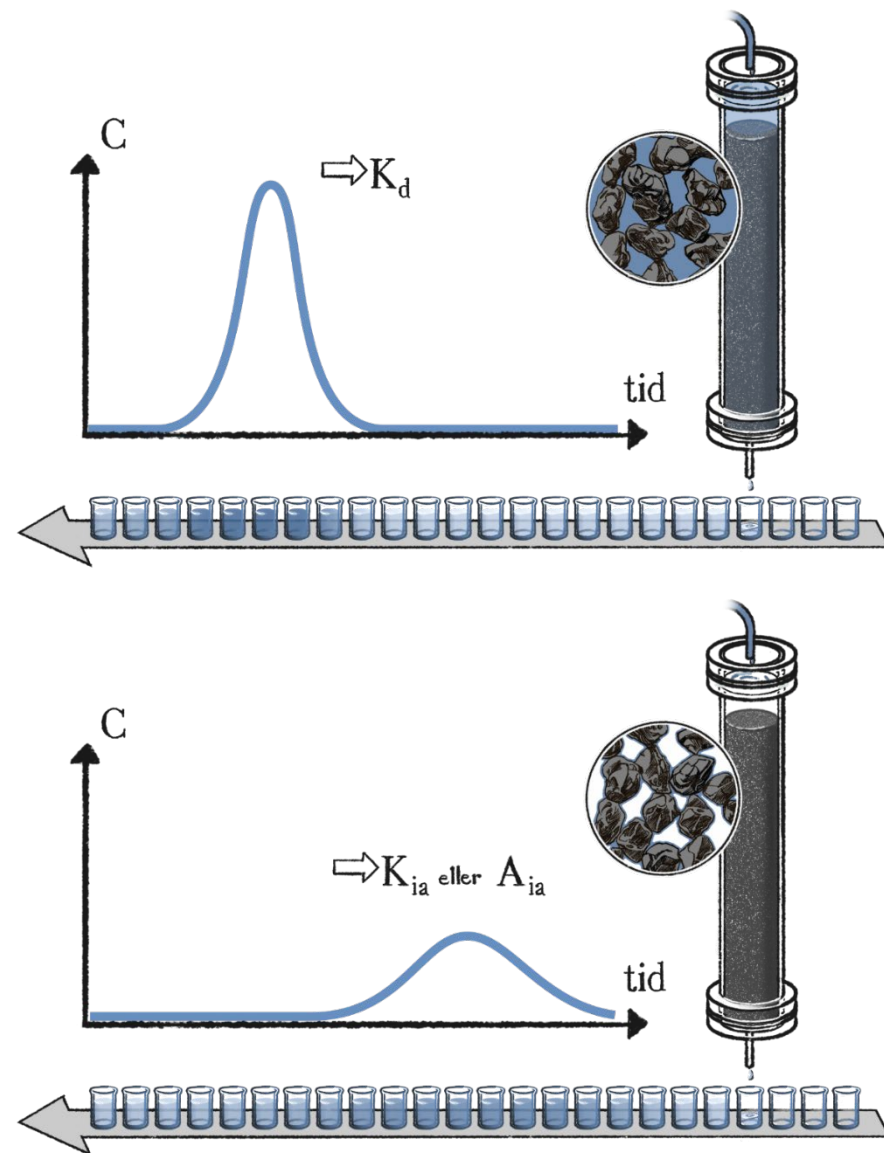
Hvad gør transport af PFAS særlig?

Umættede forhold

- Sorption til jord **og** adsorption til luft-vand grænsefladen

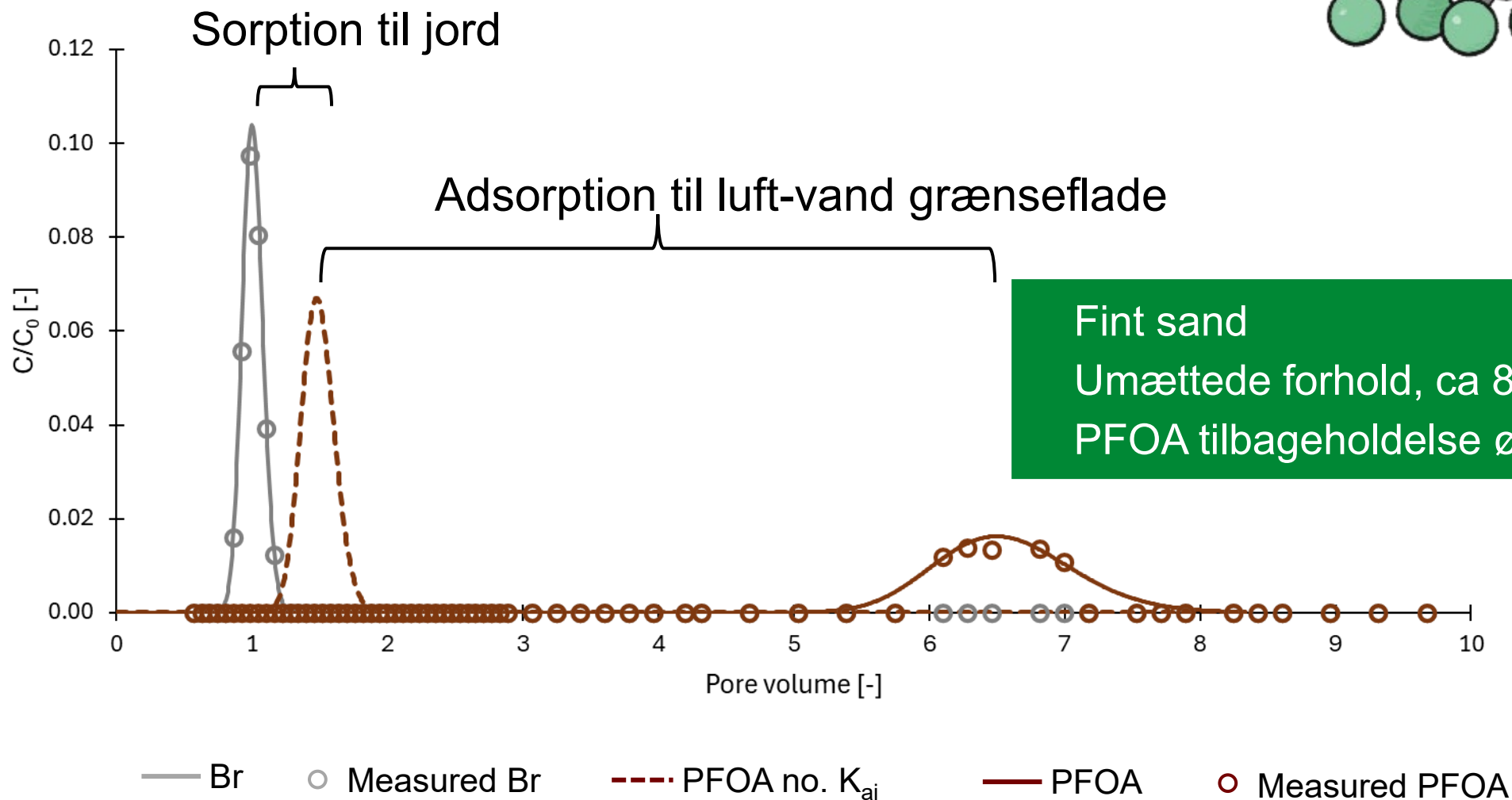
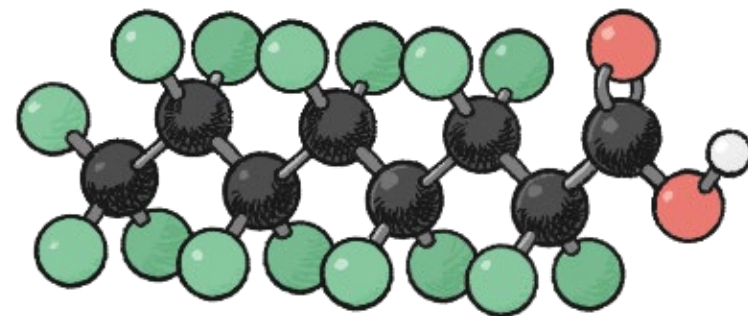


Morsing & Petersen (2024)

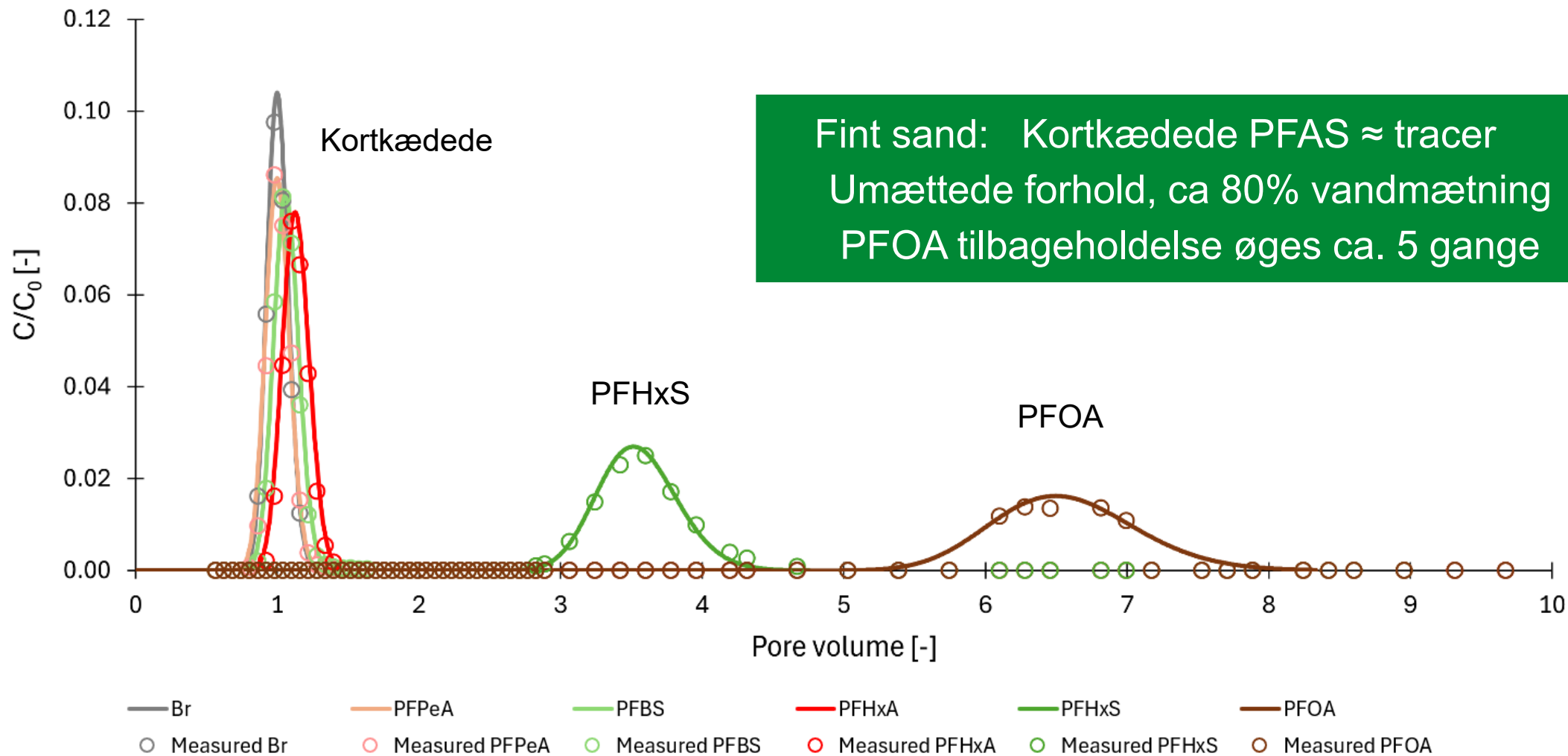


Morsing et al. (2025)

Hvad gør transport af PFAS særlig?



Hvad gør transport af PFAS særlig?



Fint sand: Kortkædede PFAS $\approx$ tracer
Umættede forhold, ca 80% vandmætning
PFOA tilbageholdelse øges ca. 5 gange

Retardationsfaktor, styrende processer og parametre

Sorption til jord

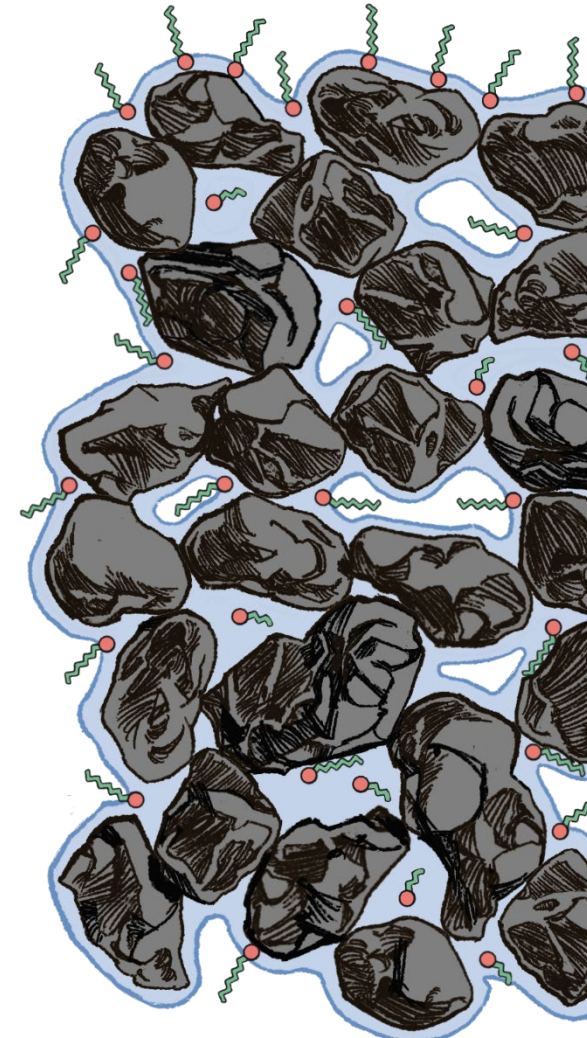


Retardationsfaktor

$$R = 1 + \frac{K_d \cdot \rho_b}{\theta_w}$$

R udtrykker forsinkelsen af PFAS i forhold til vandets transporthastighed

- K_{ia} → Sorptionskoefficient til luft-vand grænsefladen (cm)
- A_{ia} → Luft-vand grænsefladearealet (cm⁻¹)
- K_d → Fordelingskoefficient til jord (l/kg)
- θ_w → Vandindhold (-)
- ρ_b → Rumvægt - bulk density (kg/l)



Styrende processer og betydende parametre

Sorption til jord

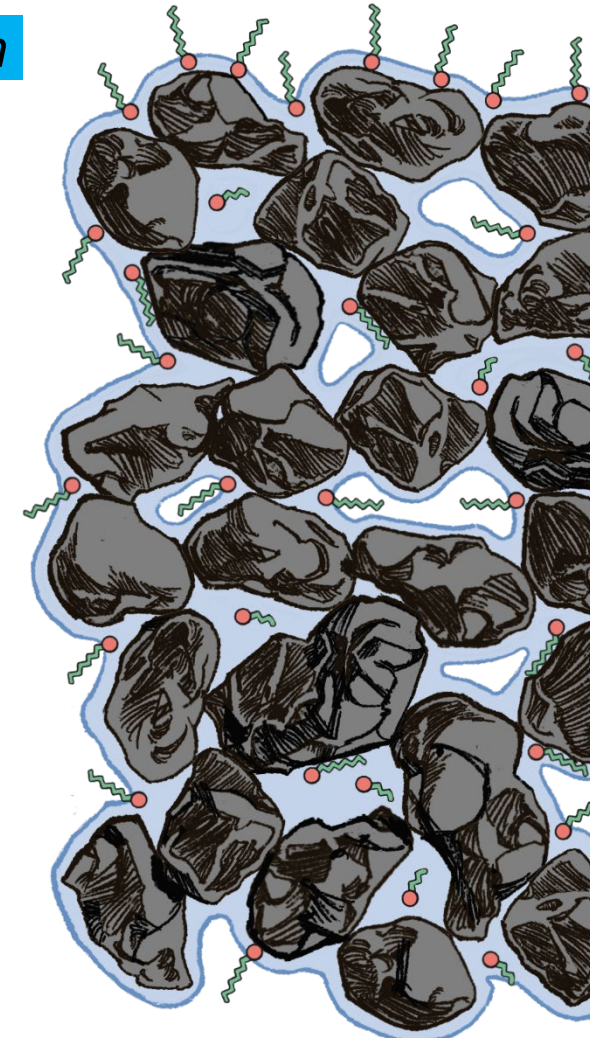
Adsorption til luft-vand grænsefladen

Retardationsfaktor

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

Relevant for
langkædede PFAS

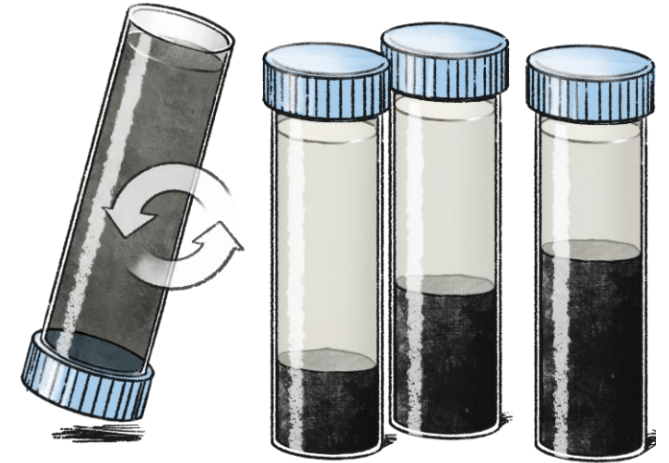
- K_{ia} → Sorptionskoefficient til luft-vand grænsefladen (cm)
- A_{ia} → Luft-vand grænsefladearealet (cm⁻¹)
- K_d → Fordelingskoefficient til jord (l/kg)
- θ_w → Vandindhold (-)
- ρ_b → Rumvægt - bulk density (kg/l)



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

Bestemmelse af PFAS sorption til danske jorde

- Flaskeforsøg – batchforsøg – ligevægt
 - OECD procedure
 - “Ren” jord tilført en PFAS opløsning
 - Bestemmelse af lineære isothermer
 - 4-5 koncentrationer (30-3000 ng/L)
- Relevante danske jorde
 - Moræneler, morænesand, smeltevandssand, fyld og kalk
- Fokus på de mest almindelige PFAS
 - Erfaringer udbygges løbende

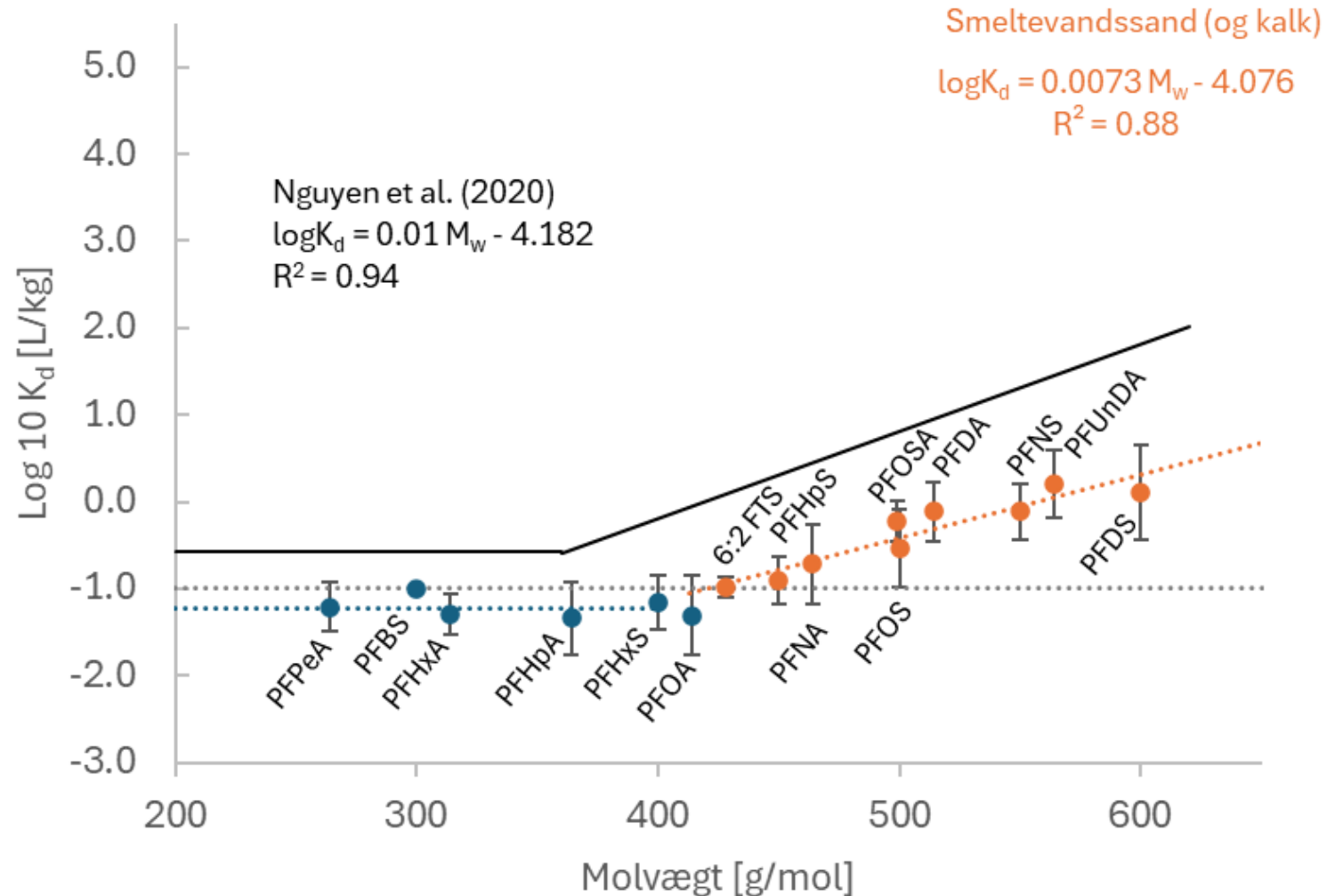


Kontakt: Annika Fjordbøge, DTU Sustain

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

K_d - Sorption i danske akvifermaterialer

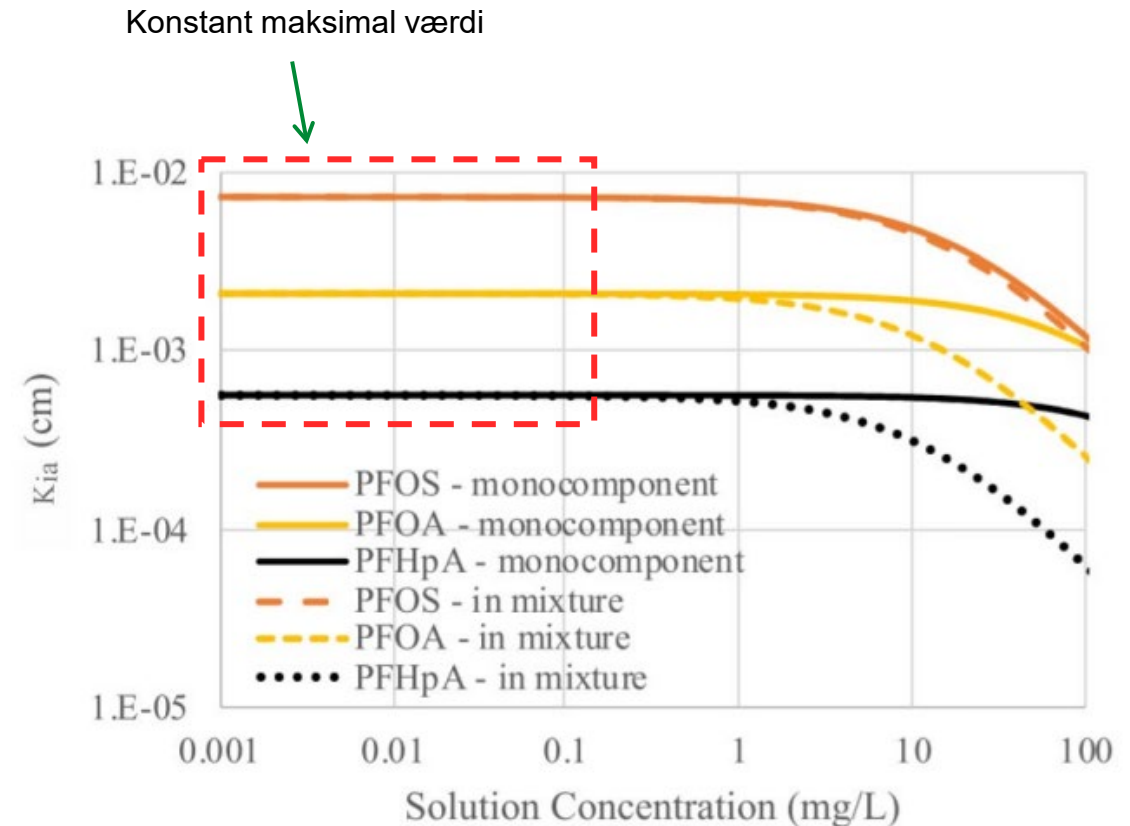
- PFAS med kædelængde kortere end 8
 - K_d er meget lille i akvifermaterialer
 - Retardation under 2
- Tilsyneladende mindre K_d end udenlandske undersøgelser
- Sorption – desorption
 - Udvaskningstest
 - Kolonneforsøg



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

K_{ia} – Adsorptionskoefficienten til luft-vand grænsefladen

- Faktorer der påvirker K_{ia} :
 - Ionstyrke
 - Koncentration
 - Tilstedeværelsen af andre PFAS i høje koncentrationer
- Koncentrationsniveau i Danmark
 - K_{ia} kan antages at være konstant
- Lineær sammenhæng med PFAS kædelængde
 - Bedste bud til estimering af K_{ia}

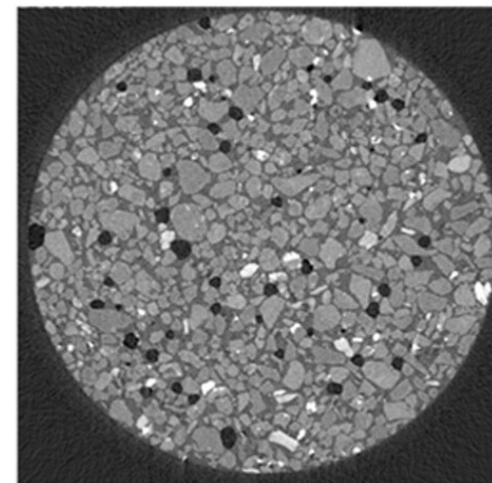


$$\log K_{ia} = 0.019 (\pm 0,002) \cdot V_m - 7.1 (\pm 0,45), \quad r^2 = 0.946$$

A_{ia} – luft-vand grænsefladearealet

- Beskriver størrelsen af overfladearealet mellem luft og vand
- De største luft-vand grænsefladearealer
 - Vandmætningen er lav
 - Kornene/jordpartiklerne er små
- Direkte bestemmelse med målinger – X-ray Microtomography
- Kan bestemmes ud fra empiriske korrelationer - for sand

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



Brusseau et al. (2024)

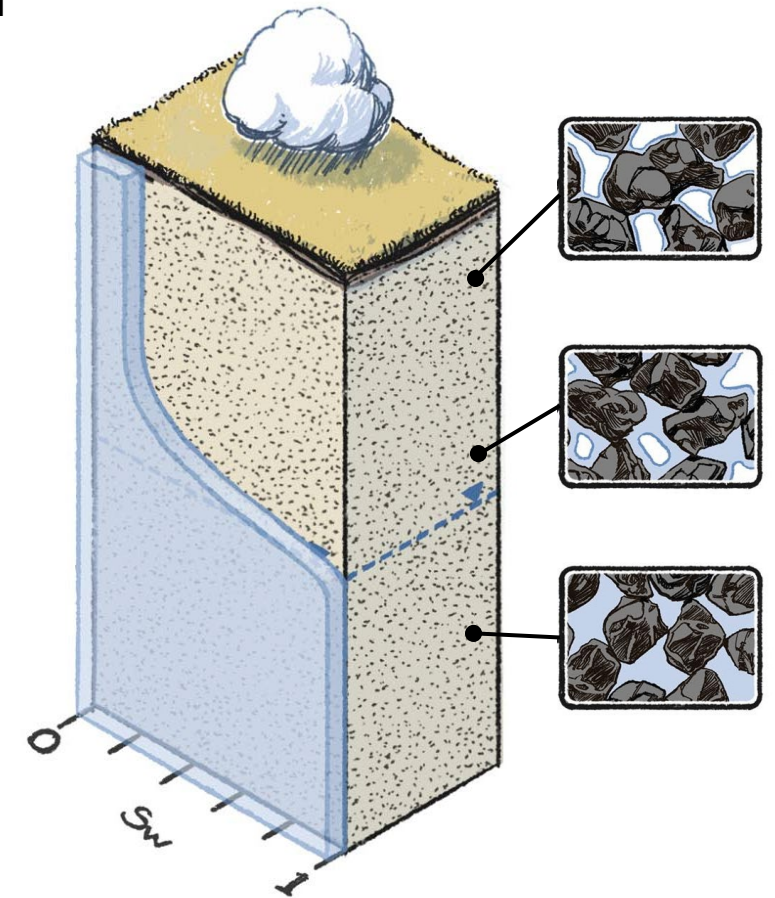


Vandmætningen i mættet og **umættet** zone

- Vandmætning (S_w) er styrende for A_{ia} og dermed transporten
- Vandmætning S_w , er den vandmættede del af porøsiteten, n :

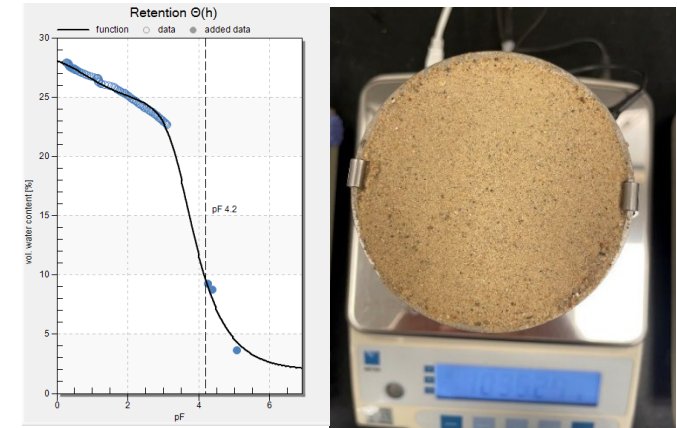
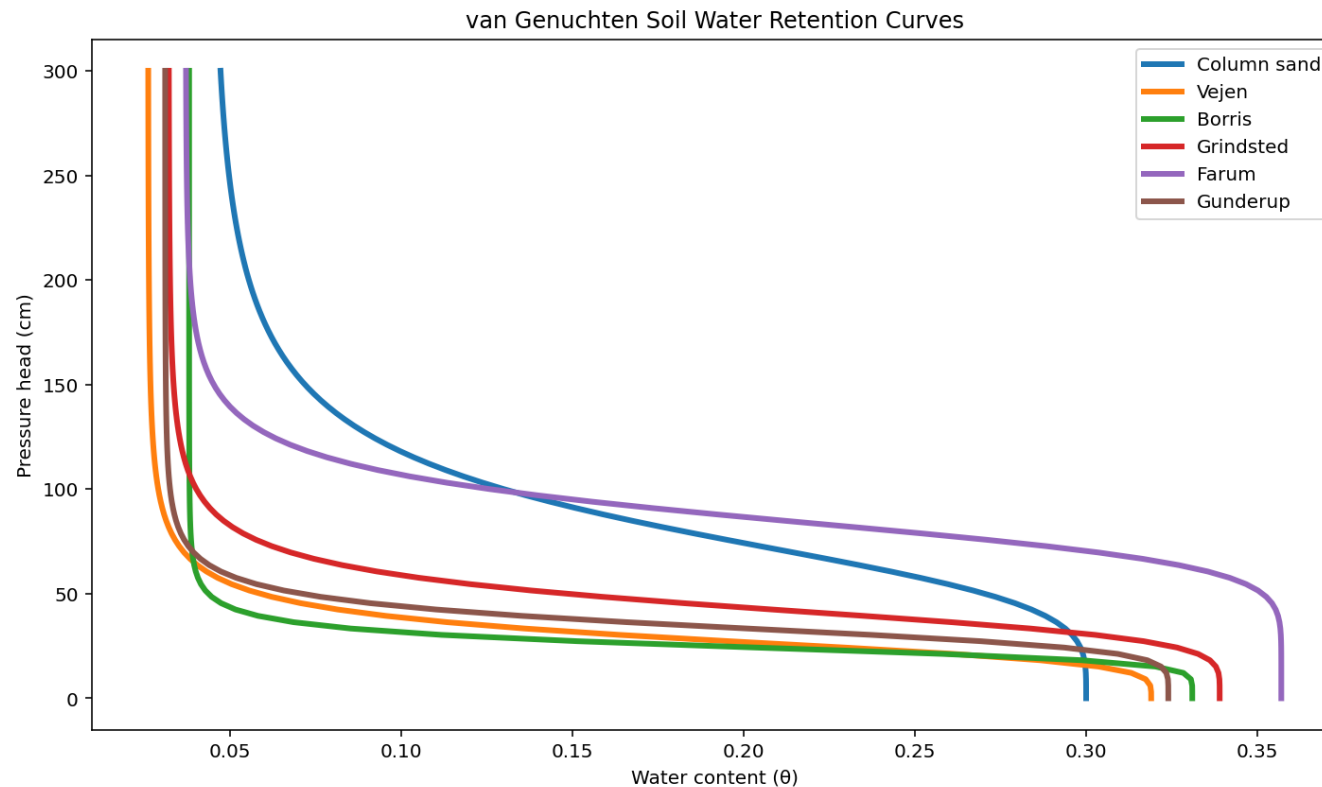
$$S_w = n_{vand} / n$$

- Vandmætning (S_w) varierer i umættet zone
- Vandmætning (S_w) er 1 i mættet zone
- Vandmætningsfordeling i den umættede zone
 - Kan matematisk beskrives med retentionskurver
 - van Genuchten parametre

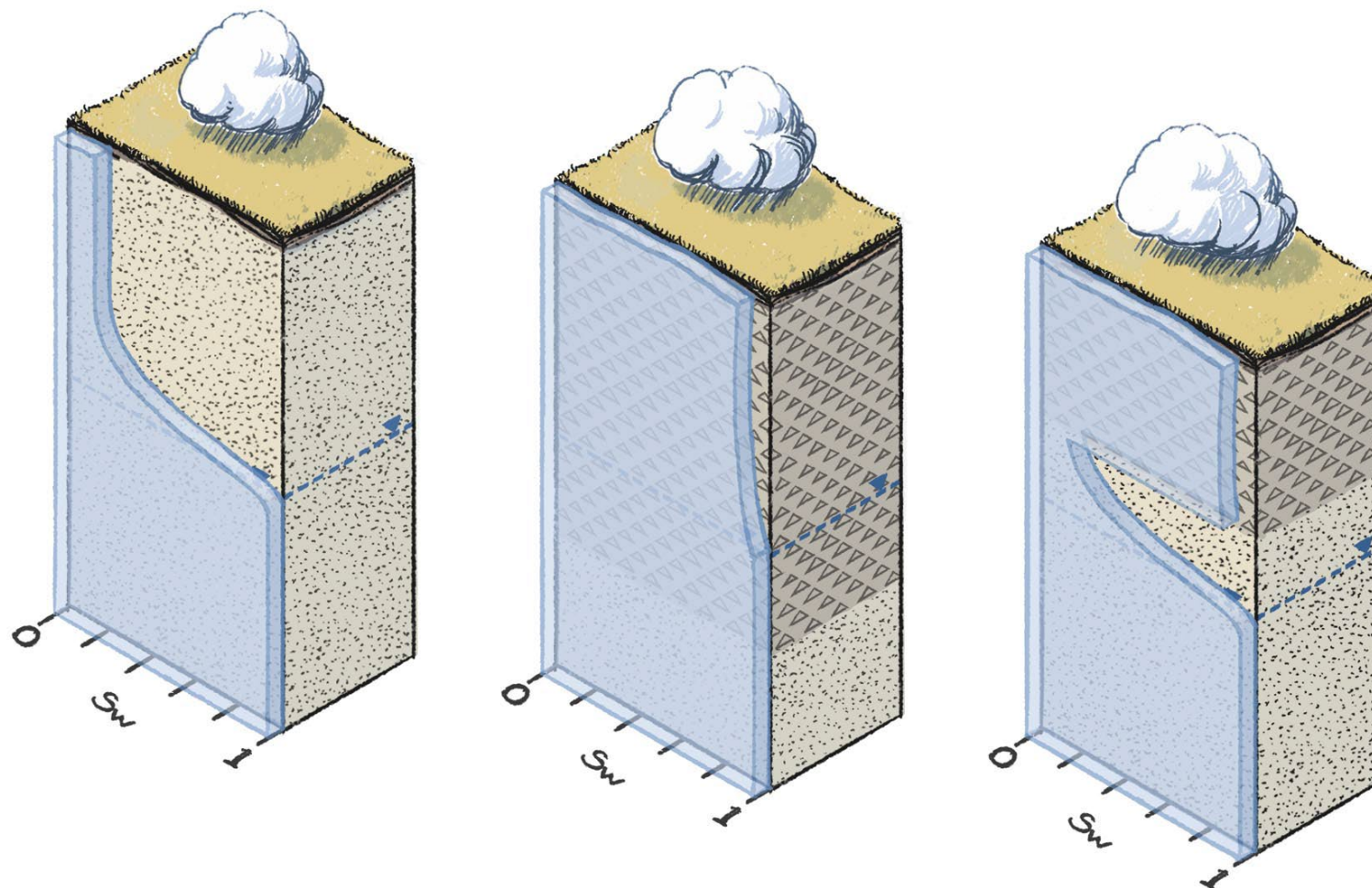


Retentionskurver for danske jorde

- Målinger af jord-vand retentionskurver
- van Genuchten parametre og andre hydrauliske parameter
- Anvendes i Richards ligning

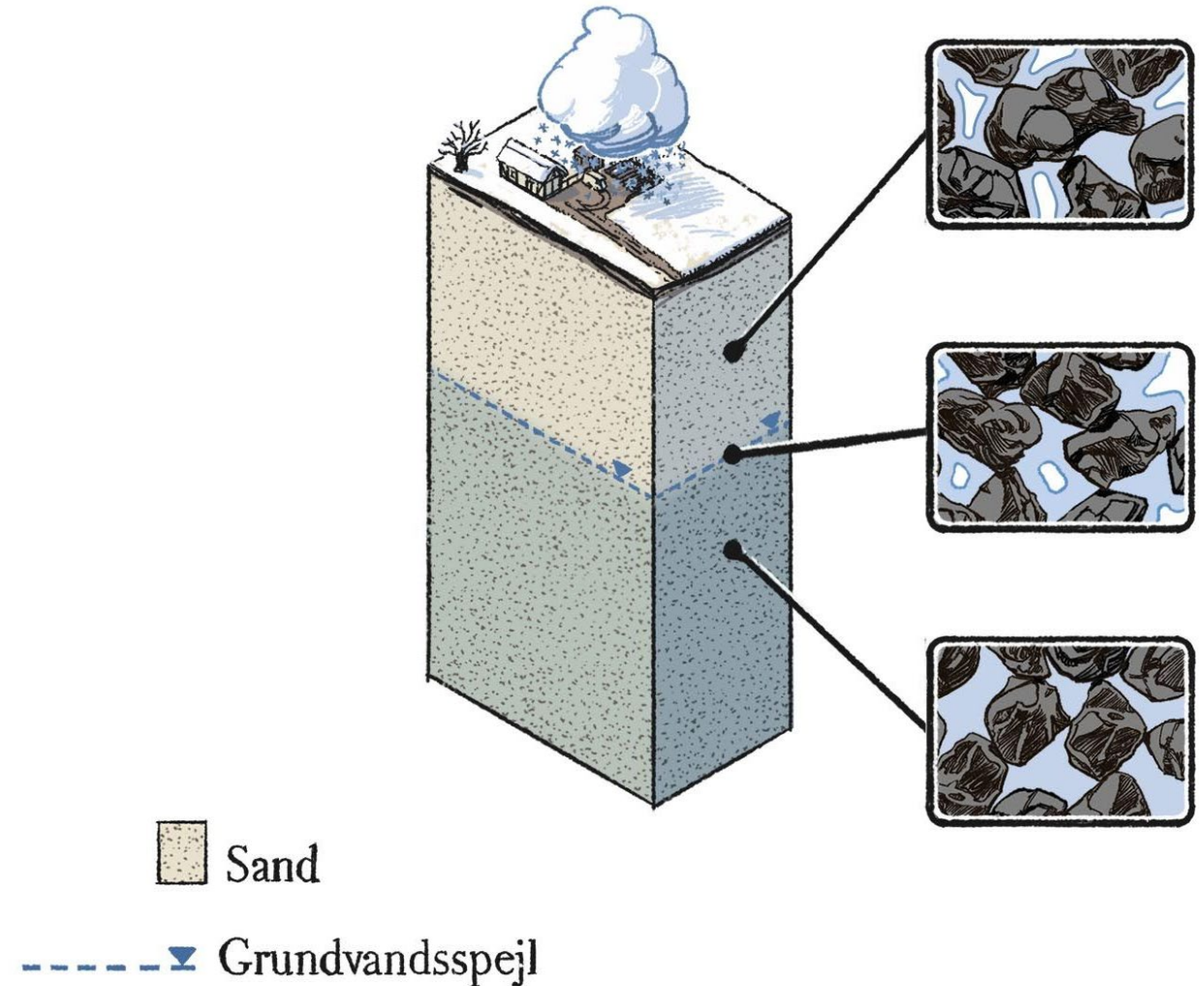


Geologiens påvirkning af vandmætningen, S_w



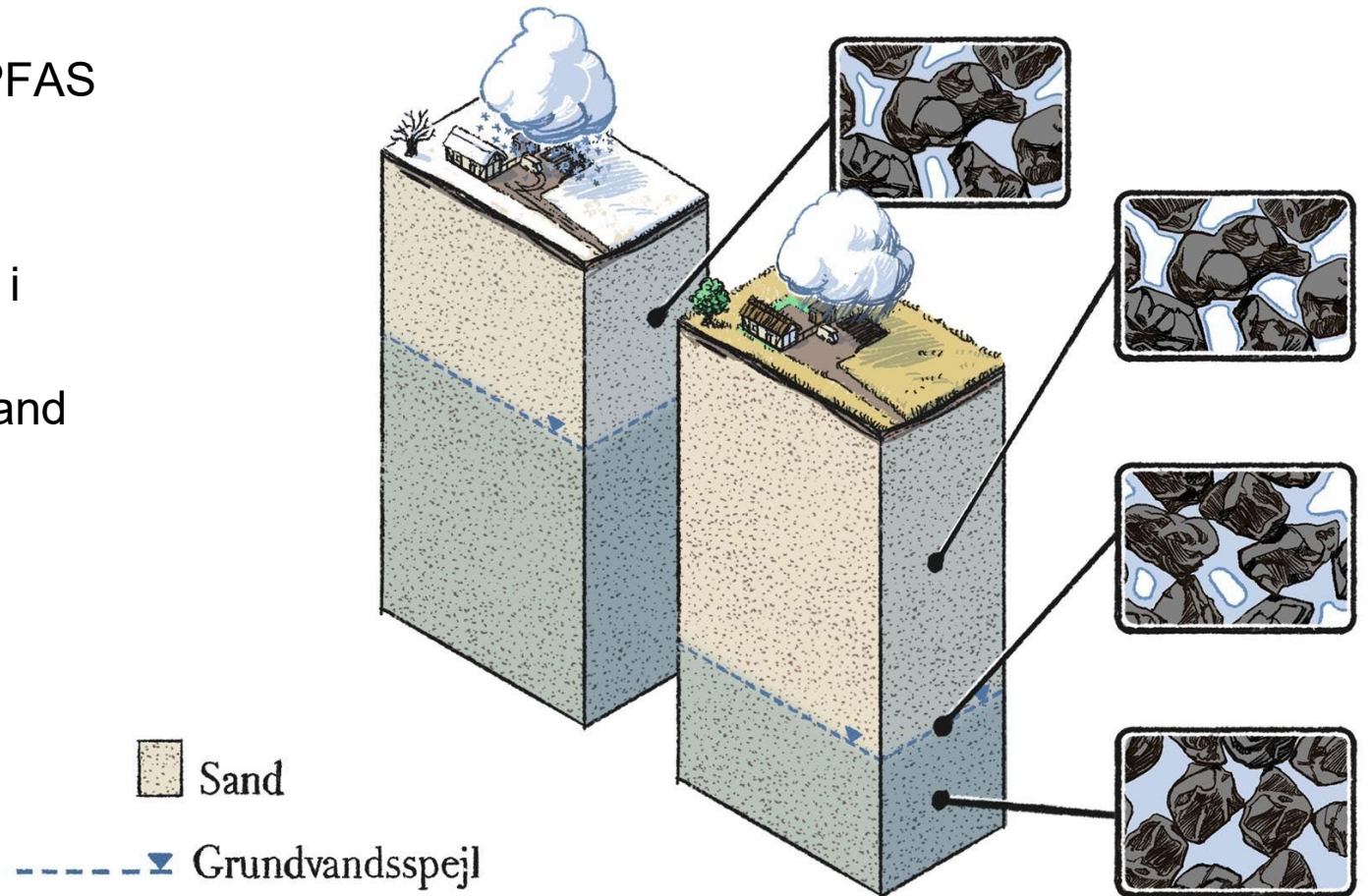
Sæsonvariationers påvirkning af vandmætning

- Typisk højere vandmætning om vinteren og et højere grundvandsspejl
- Mobilisering af langkædede PFAS
- Forventeligt:
 - højere koncentrationer af PFAS i porevand udtaget efter en våd periode



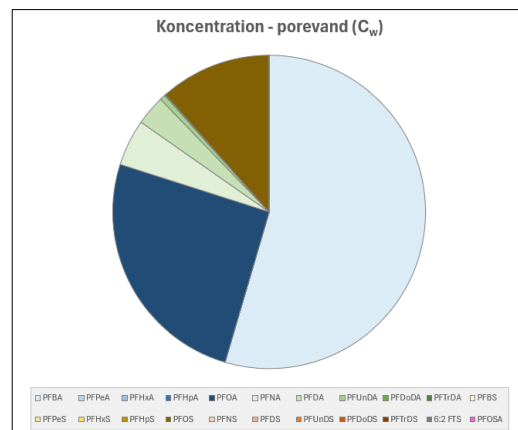
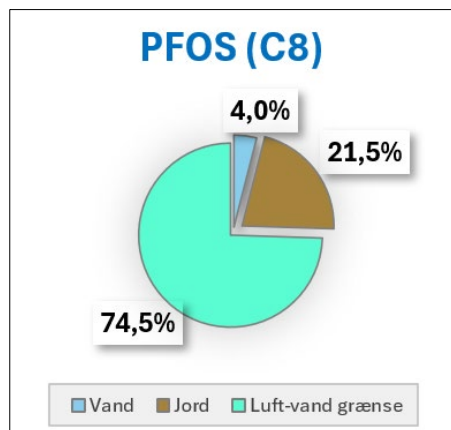
Sæsonvariationers påvirkning af vandmætning

- Typisk lav vandmætning om sommeren
- Demobilisering af langkædede PFAS
- Forventeligt:
 - Lavere koncentration af PFAS i porevand
 - Mere PFAS adsorberet i luft-vand grænsefladen



Fasefordelingsværktøj - PFASen

Analyseresultater			Fra jordprøve	Fra vandprøve	Estimerede resultater (afrundede)		
Trivialnavn	# fluorerede C-atomer	Forkortelse	Koncentration (C _t) (µg/kg TS)	Koncentration (C _w) (ng/L)	Forkortelse	C _t (µg/kg TS)	C _w (ng/L)
Perfluorbutansyre	3	PFBA	0,111		PFBA	0,111	966
Perfluorbutansulfonsyre	4	PFBS	<0,10		PFBS		
Perfluorpentansyre	4	PFPeA	<0,20		PFPeA		
Perfluorhexansyre	5	PFHxA	<0,20		PFHxA		
Perfluorpentansulfonsyre	5	PFPeS	<0,050		PFPeS		
Perfluorheptansyre	6	PFHpA	<0,20		PFHpA		
Perfluorhexansulfonsyre	6	PFHxS	<0,10		PFHxS		
6:2 fluortelomersulfonsyre	6	6:2 FTS	<0,050		6:2 FTS		
Perfluoroctansyre	7	PFOA	0,233		PFOA	0,233	449
Perfluorheptansulfonsyre	7	PFHpS	<0,10		PFHpS		
Perfluoroctansulfonamid	8	PFOSA	<0,050		PFOSA		
Perfluornonansyre	8	PFNA	0,128		PFNA	0,128	85,0
Perfluoroctansulfonsyre	8	PFOS	0,443		PFOS	0,443	204



Programmet er tilgængeligt for alle via følgende link: [PFASen](#)

Ved brug af programmet er det vigtigt at sikre sig, at man arbejder i den nyeste version, som altid vil være tilgængelig på Region Hovedstadens hjemmeside

PFAS-fasefordelingsberegner – PFASen

DMR har for Region Hovedstaden og med fagligt input og sparring fra DTU Sustain udarbejdet et værktøj "PFASen" til beregning af fasefordelingen af PFAS.

Arbejdsgruppen bag PFASen

Per Loll, DMR A/S, pl@dmr.dk

Maria Hag, Region Hovedstaden, maria.hag@regionh.dk

Poul L. Bjerg, DTU Sustain, Danmarks Tekniske Universitet, plbj@dtu.dk

Annika Fjordbøge, DTU Sustain, Danmarks Tekniske Universitet, asfj@dtudk

Laura Morsing, DTU Sustain, Danmarks Tekniske Universitet, laumo@dtu.dk

Klaus Mosthaf, DTU Sustain, Danmarks Tekniske Universitet, klmos@dtu.dk

Henning Wienkenjohann, DTU Sustain, Danmarks Tekniske Universitet, henwie@dtu.dk

Desuden har en kreds af rådgivere og phd studerende bidraget med ideer til design og kvalitetssikring af beregningerne i værktøjet.

Værktøjet er udarbejdet af DMR for Region Hovedstaden, med fagligt input og sparring fra DTU Sustain.

Oktober 2025

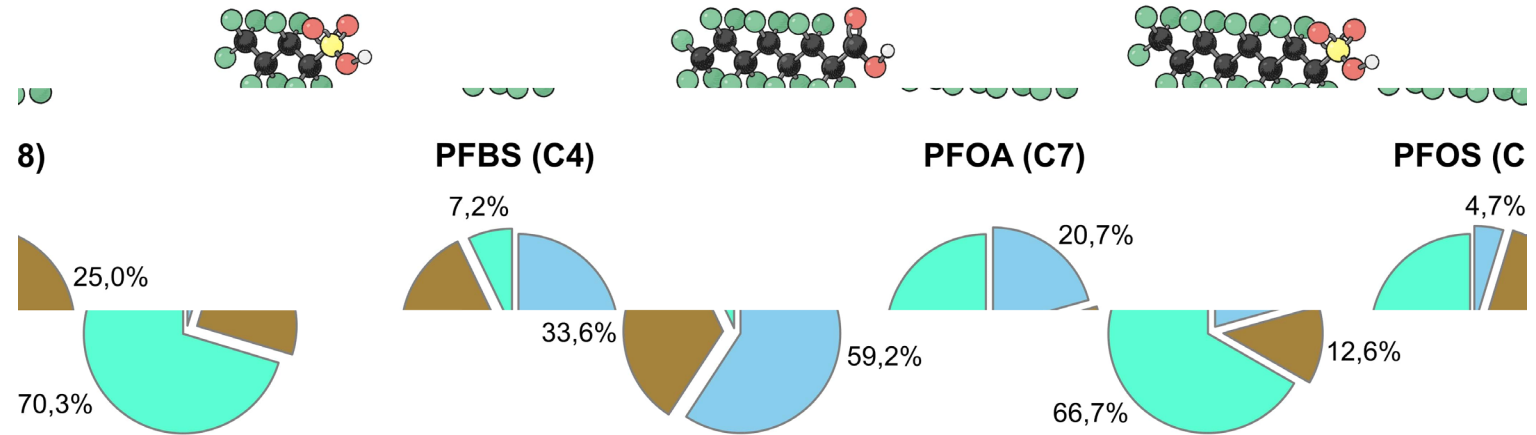
PFASen (Ver. 2.4) - 2025-10-09



Konstant vandmætning PFBS, PFOA, PFOS

(a) Konstant vandmætning: sand ($S_w = 60\%$)

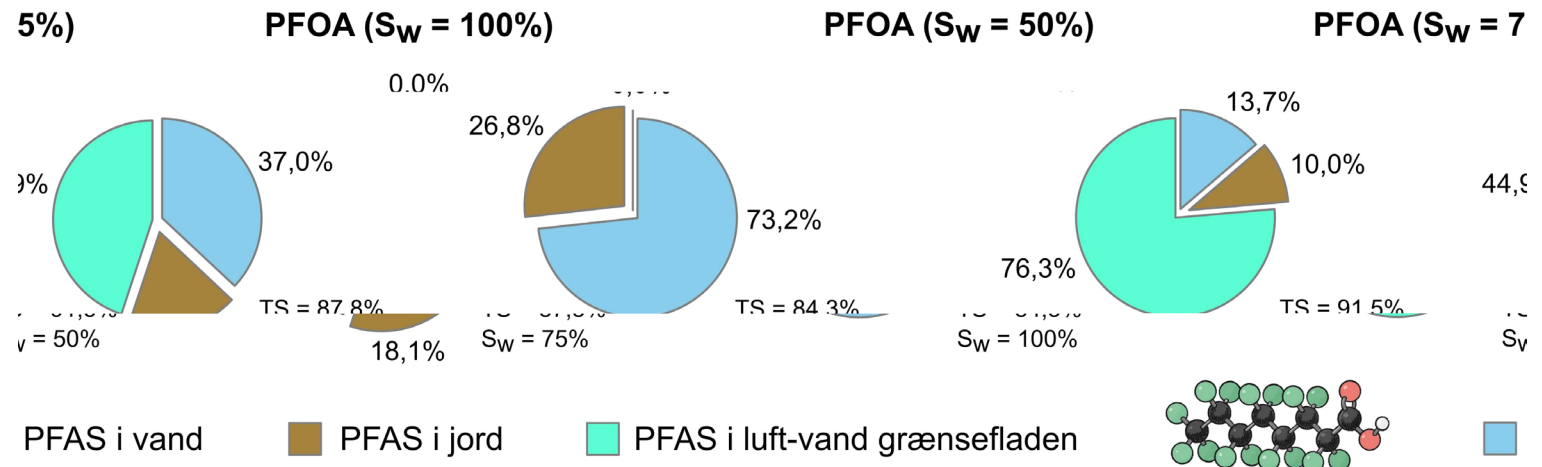
tørstofindhold TS = 90% vandmætning $S_w = 60\%$



Vandmætning varierer PFOA

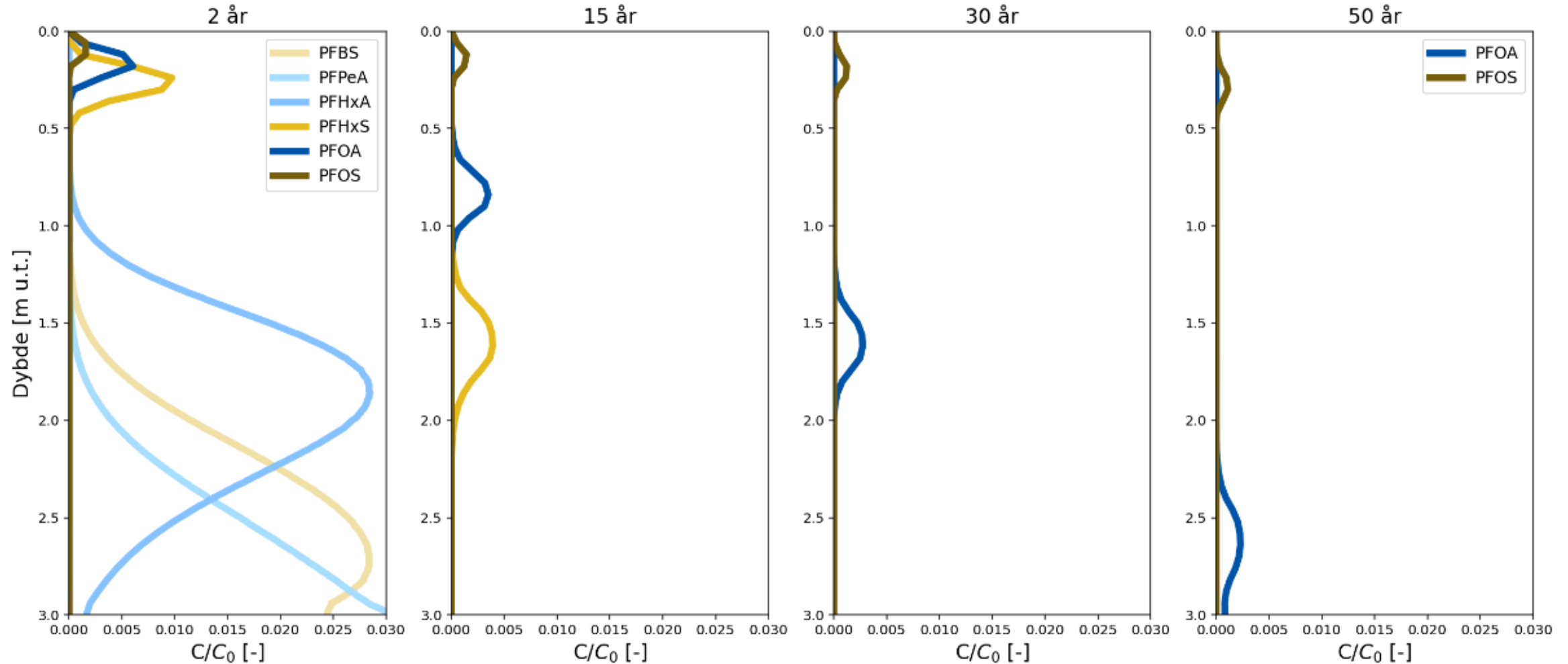
sand ($S_w = \text{variabel}$)

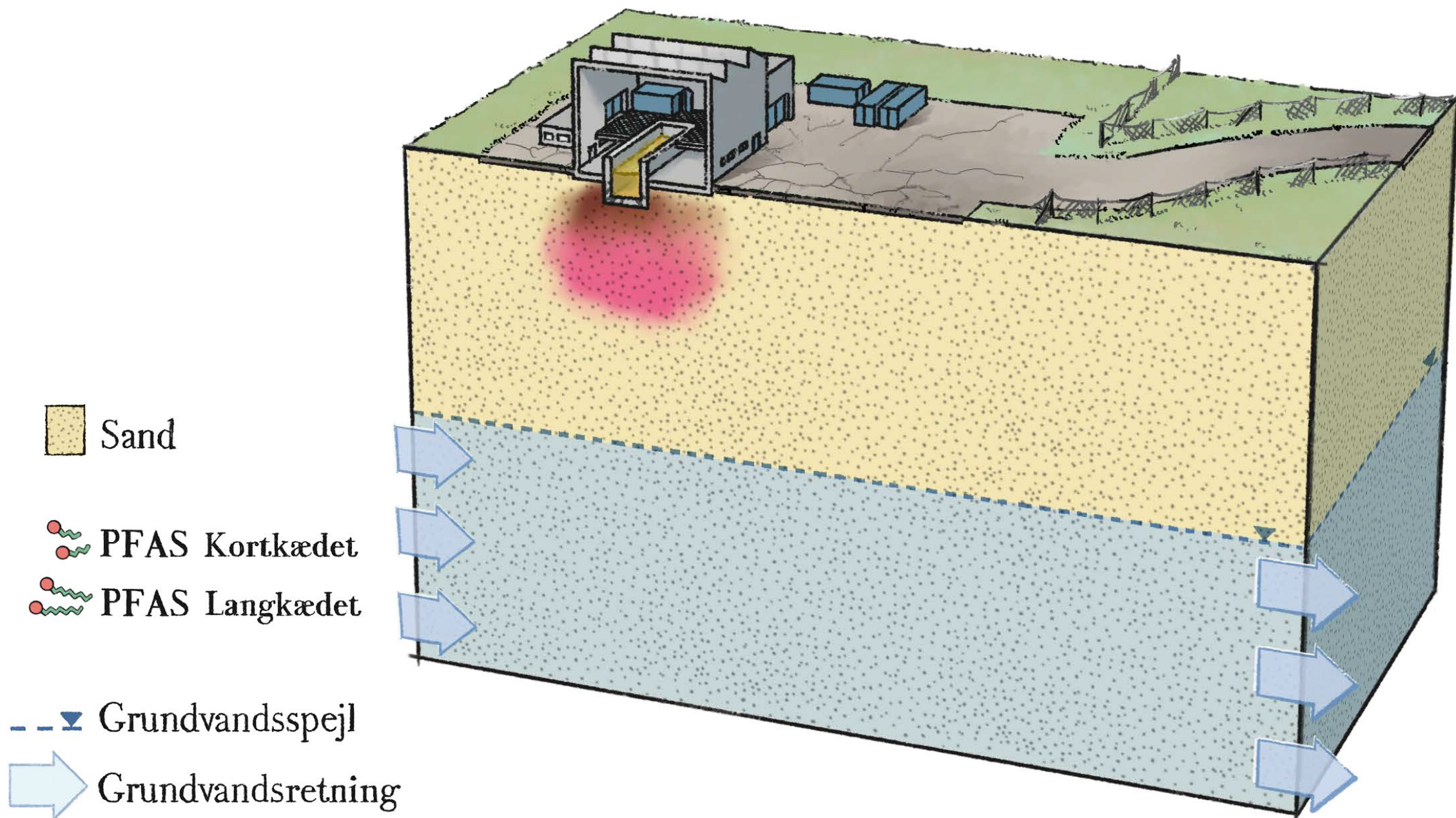
(b) Varierende vandmætning:

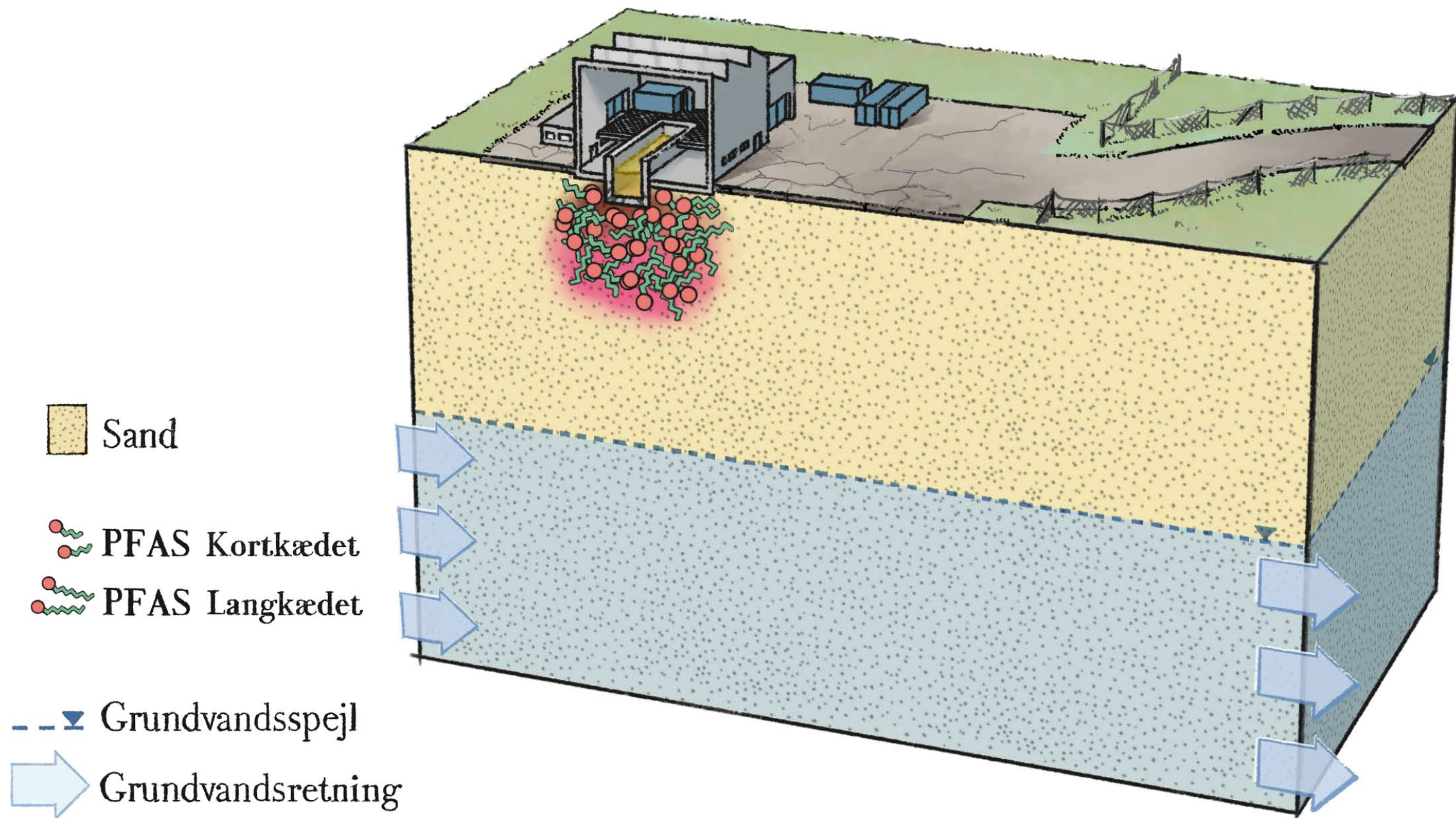


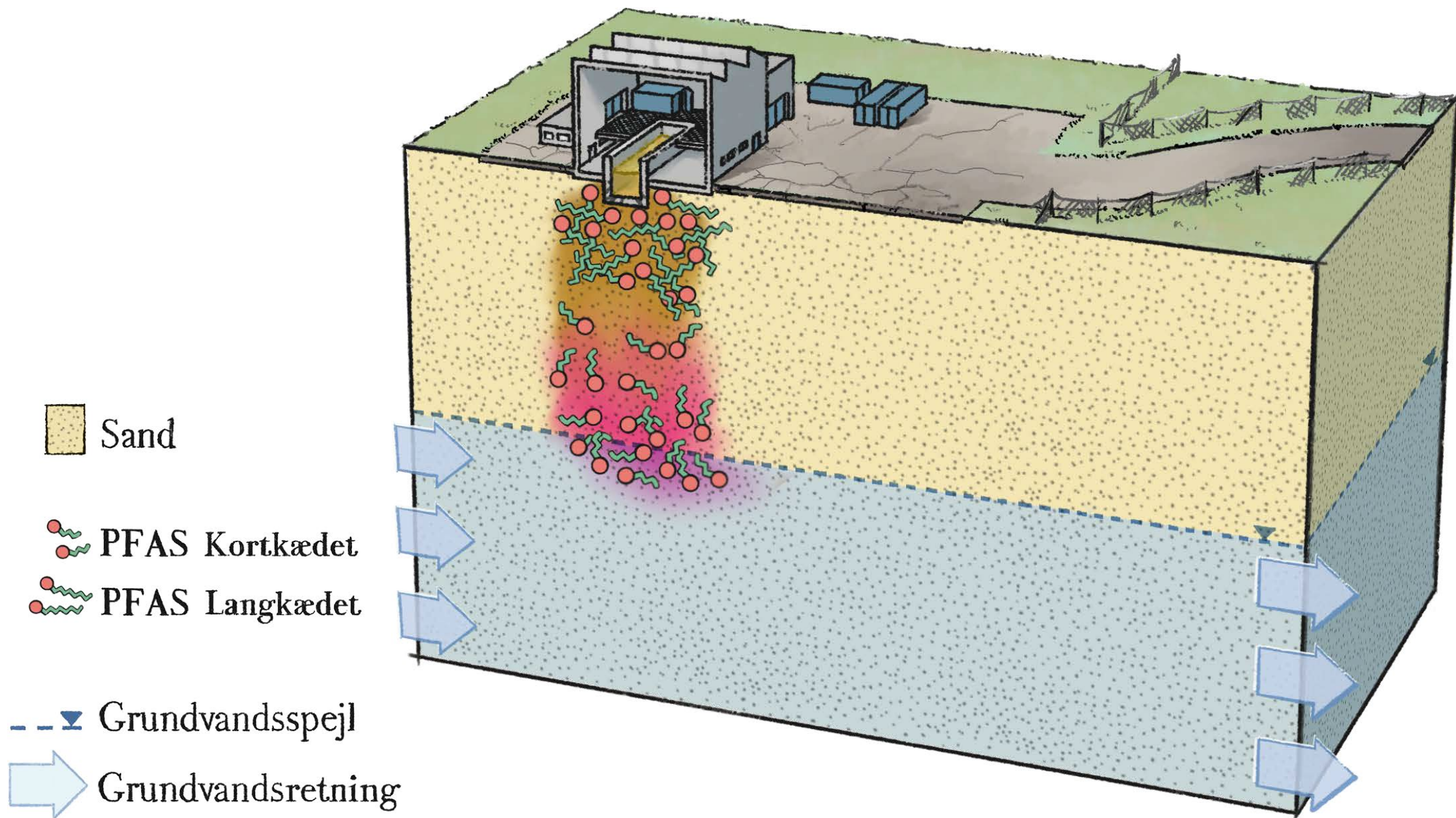
Fasefordeling og stoftransport hænger sammen

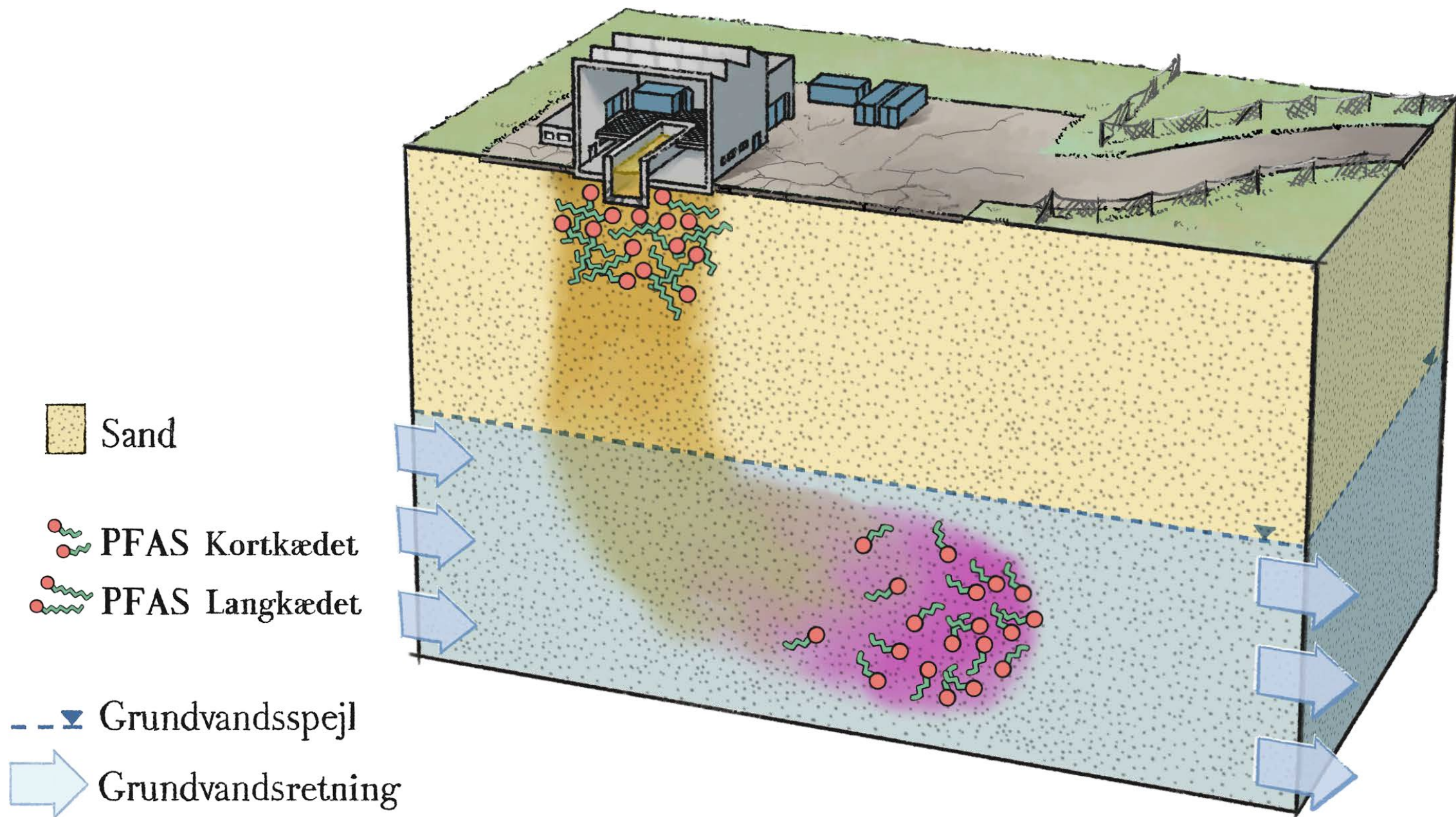
Chromatografering i umættet zone – retardation, R-faktor

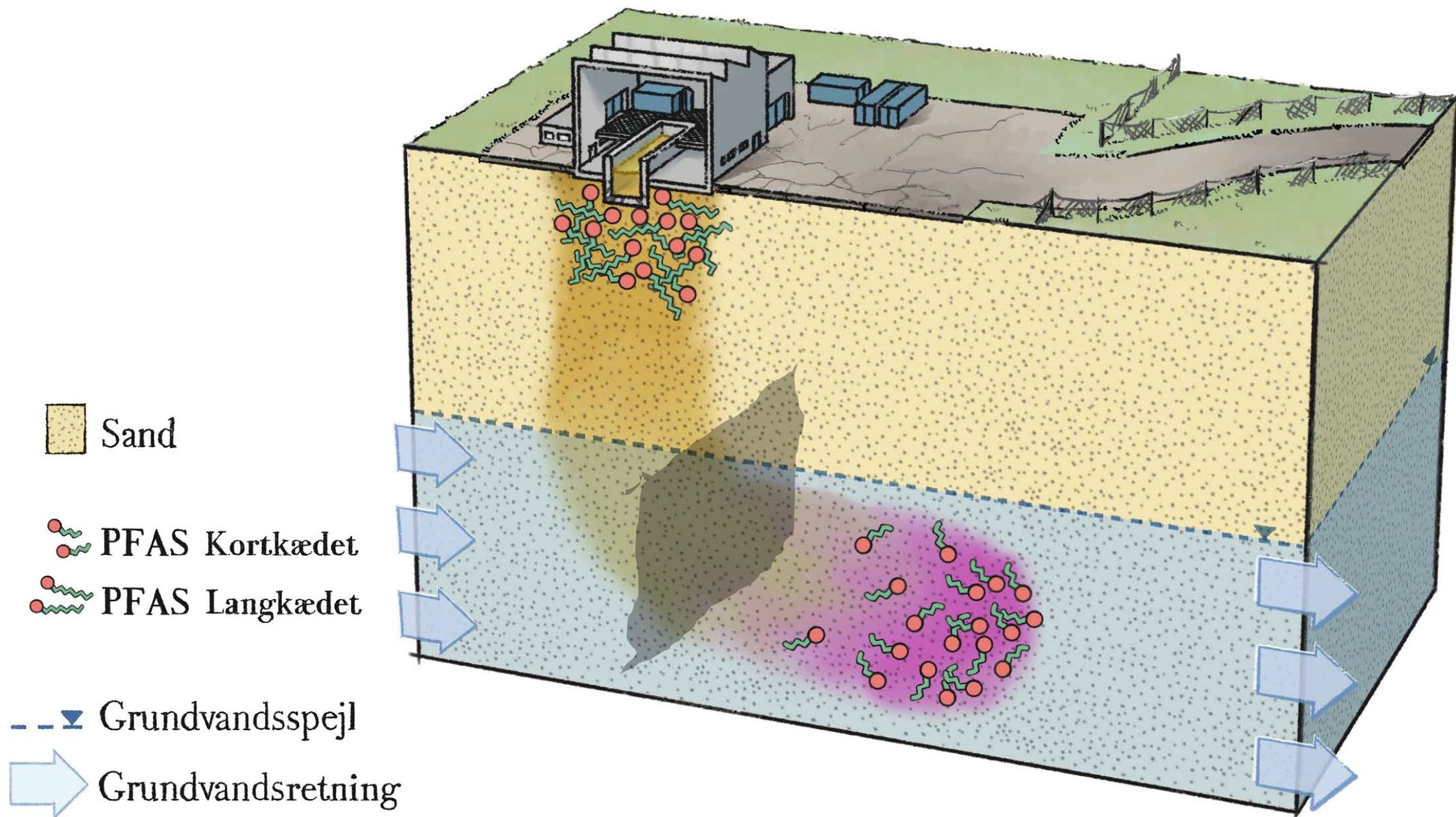












Hvad betyder dette for en forureningsundersøgelse?

PFAS som forurening er mange forskellige stoffer med forskellige egenskaber

- PFAS $\neq$ PFAS
- Se nøje på hvilke PFAS dominerer i analyser for PFAS-4, PFAS-22

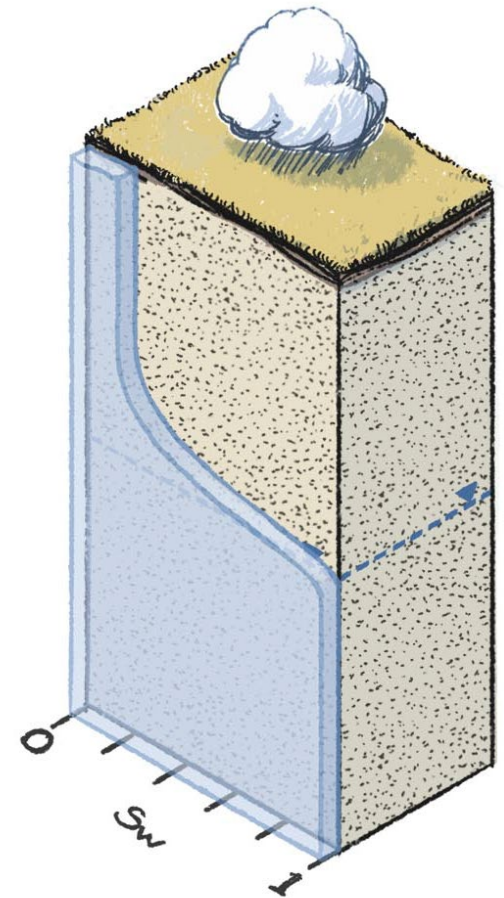
Kritisk at forholde sig til, hvor jord og vandprøver er udtaget

- Dybde – forskellige PFAS er i forskellige dybder
- Type af jord – muld – dybere jordlag - grundvand
- Vandindhold – tørstofindhold i jordprøven

Hvilke risiko skal vurderes?

- Kontaktrisiko?
- Grundvandsrisiko?

Overvej valg af prøvetype ud fra formålet med risikovurderingen



Opsummering

- Kortkædede PFAS er (meget) mobile i jord og grundvand
- Langkædede PFAS tilbageholdes ofte i den umættede zone grundet adsorption til luft-vand grænsefladen.
- Luft-vand grænsefladearealet påvirkes direkte af vandmætningen i den umættede zone
- Kædelængde og vandindhold påvirker fasefordeling af PFAS
- PFAS forureningsfaner er karakteriseret ved stofkromatografering
 - Fluktuerende grundvandsspejl og varierende vandindhold
 - Sprækketransport og matrixdiffusion i ler/kalkmatricer

Vigtigt at overveje ved forureningsundersøgelser

Konceptuel model for transport og skæbne af PFAS ved forurenede grunde

Miljøprojekt nr. 2286

Januar 2025

PFAS Center projekt
Region Hovedstaden

- PFAS processer og parametre
- PFAS fluxe i jord og grundvand
- Felt- og laboratorieundersøgelser
- Numerisk modellering

Mere information og litteratur (I)

- Morsing, L.; Tsitonaki, K.; Dyreborg, S.; Mosthaf, K.; Fjordbøge, A. S.; Hjorth, R.; Jensen, B.; Baun, A.; Bjerg, P. L. (2025): Konceptuel model for transport og skæbne af PFAS ved forurenede grunde, Projektrapport for Videnstaskforcen for PFAS- forurening. **Miljøprojekt 2286**. Miljøstyrelsen, Odense, Danmark.
- Bjerg, P. L., Fjordbøge, A., Morsing, L., Mosthaf, K., Wienkenjohann, H., Loll, P., & Hag, M. (2025). Transport af PFAS i umættet zone. Vand & Jord, 32(3), 97-100.
- 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. Master Thesis. DTU Sustain. Technical University of Denmark.

Konceptuel model
for transport og
skæbne af PFAS ved
forurenede grunde

Miljøprojekt nr. 2286
Januar 2025

Tak for opmærksomheden



Morsing og Petersen (2024) <https://panopto.dtu.dk/Panopto/Pages/Viewer.aspx?id=f58eec28-d65f-4d7a-a1bd-b273005fd282>



Mere information og litteratur (II)

- Zeng, J., Brusseau, M. L., & Guo, B. (2024). Modeling PFAS Subsurface Transport in the Presence of Groundwater Table Fluctuations: The Impact on Source-Zone Leaching and Exploration of Model Simplifications. *Water Resources Research*, 60(11). <https://doi.org/10.1029/2024WR037707>
- Divine, C., Hasbrouck, K., Guo, B., Brusseau, M., Zeng, J., Wright, J., Fortner, E., Chapman, S., Munn, J., Parker, B., & Packer, B. (2024). Dynamic Storage, Release, and Enrichment of some Per- and Polyfluoroalkyl Substances in the Groundwater Table Fluctuation Zone: Transport Processes Requiring Further Consideration. *Groundwater Monitoring and Remediation*. <https://doi.org/10.1111/gwmr.12694>

**Konceptuel model
for transport og
skæbne af PFAS ved
forurenede grunde**

Miljøprojekt nr. 2286

Januar 2025



Morsing og Petersen (2024) <https://panopto.dtu.dk/Panopto/Pages/Viewer.aspx?id=f58eec28-d65f-4d7a-a1bd-b273005fd282>