



Relatie tussen atmosferische depositie en bodem- of grondwaterconcentraties voor PFAS

Studie uitgevoerd in opdracht van: Vlaamse Milieumaatschappij (VMM)
Referentie: WET/2410561/WSmmij052025
Januari 2026

Relatie tussen atmosferische depositie en bodem- of grondwaterconcentraties voor PFAS

VITO
Boeretang 200
2400 MOL
Belgium
BTW No: BE0244.195.916
vito@vito.be – www.vito.be
IBAN BE34 3751 1173 5490 BBRUBEBB

Ingeborg Joris

Michiel Maertens

Ward Swinnen

Joni Dehaspe



AUTEURS

Ingeborg Joris, VITO
Michiel Maertens, VITO
Ward Swinnen, VITO
Joni Dehaspe, VITO

Ref: WET/2410561/WSmmij052025

Dit rapport is de weerslag van een onafhankelijk wetenschappelijk onderzoek op basis van de stand van de kennis van wetenschap en techniek beschikbaar bij VITO op het moment van het onderzoek. Alle intellectuele eigendomsrechten, waaronder het auteursrecht, op dit rapport berusten bij de Vlaamse Instelling voor Technologisch Onderzoek ("VITO"), Boeretang 200, BE-2400 Mol, RPR Turnhout BTW BE 0244.195.916. Dit rapport kan zonder de voorafgaande schriftelijke toestemming van VITO niet geheel of gedeeltelijk worden gereproduceerd of worden gebruikt voor het instellen van claims, voor het voeren van gerechtelijke procedures, voor reclame of antireclame en ten behoeve van werving in meer algemene zin. Tenzij uitdrukkelijk anders bepaald is de informatie zoals verstrekt in dit rapport van vertrouwelijk aard en kan dit rapport, of delen ervan, niet worden verspreid aan derden. In het geval dat reproductie of verspreiding wel is toegestaan, vb. door de vermelding "algemene verspreiding", is bronvermelding verplicht.

DOCUMENTBESCHRIJVING

TITLE VAN PUBLICATIE

Relatie tussen atmosferische depositie en bodem- of grondwaterconcentraties voor PFAS

DEPOTNUMMER

D/2026/6871/004

TREFWOORDEN

PFAS, depositie, bodem, grondwater, toetsingswaarden

DATUM PUBLICATIE

Januari 2026

REFERENTIE

Joris, I., Maertens, M., Swinnen, W., Dehaspe, J. (2026). Relatie tussen atmosferische depositie en bodem- of grondwaterconcentraties voor PFAS. VITO.

Ref: WET/2410561/WSmmij052025

Dit rapport is de weerslag van een onafhankelijk wetenschappelijk onderzoek op basis van de stand van de kennis van wetenschap en techniek beschikbaar bij VITO op het moment van het onderzoek. Alle intellectuele eigendomsrechten, waaronder het auteursrecht, op dit rapport berusten bij de Vlaamse Instelling voor Technologisch Onderzoek ("VITO"), Boeretang 200, BE-2400 Mol, RPR Turnhout BTW BE 0244.195.916. Dit rapport kan zonder de voorafgaande schriftelijke toestemming van VITO niet geheel of gedeeltelijk worden gereproduceerd of worden gebruikt voor het instellen van claims, voor het voeren van gerechtelijke procedures, voor reclame of antireclame en ten behoeve van werving in meer algemene zin. Tenzij uitdrukkelijk anders bepaald is de informatie zoals verstrekt in dit rapport van vertrouwelijk aard en kan dit rapport, of delen ervan, niet worden verspreid aan derden. In het geval dat reproductie of verspreiding wel is toegestaan, vb. door de vermelding "algemene verspreiding", is bronvermelding verplicht.

INHOUDSTAFEL

Auteurs	I
Documentbeschrijving.....	II
Inhoudstafel	III
Lijst van Figuren.....	IV
Lijst van tabellen	VI
1 Inleiding.....	1
2 Methodologie.....	3
2.1 Uitloogmodel F-LEACH.....	3
2.2 Literatuuronderzoek naar modelparameters.....	4
2.3 Relatie depositie en bodem- en grondwaterconcentraties voor standaardscenario ..	5
2.3.1 Evaluatie van de bodemconcentraties ten gevolge van depositie	5
2.3.2 Evaluatie van de concentraties die uitlogen naar grondwater ten gevolge van depositie.....	7
2.3.3 Effect van gesimuleerde periode op depositiewaarden	8
2.3.4 Effect van de duur van PFAS depositie op depositiewaarden	9
2.3.5 Effect van de gehanteerde toetsingswaarden	9
2.4 Sensitiviteitsanalyse omgevingsfactoren en bodemeigenschappen	9
3 Resultaten	11
3.1 Literatuuronderzoek modelparameters.....	11
3.1.1 Literatuuronderzoek Koc-waarden	11
3.2 Relatie PFAS deposities en bodem- en grondwaterconcentraties	15
3.2.1 Effect van Koc-waarden op depositiewaarden	15
3.2.2 Maximale depositie in bodem en grondwater op basis van best estimate Koc-waarden voor target PFAS	20
3.2.3 Effect van gesimuleerde periode op depositiewaarden	25
3.2.4 Effect van de duur van PFAS depositie op depositiewaarden	27
3.2.5 Effect van de gehanteerde toetsingswaarden	32
3.3 Sensitiviteitsanalyse omgevingsfactoren en bodemeigenschappen	35
4 Besluit	41
literatuurlijst.....	45
Bijlage A.....	47
Bijlage B.....	49

Ref: WET/2410561/WSmmij052025

Dit rapport is de weerslag van een onafhankelijk wetenschappelijk onderzoek op basis van de stand van de kennis van wetenschap en techniek beschikbaar bij VITO op het moment van het onderzoek. Alle intellectuele eigendomsrechten, waaronder het auteursrecht, op dit rapport berusten bij de Vlaamse Instelling voor Technologisch Onderzoek ("VITO"), Boeretang 200, BE-2400 Mol, RPR Turnhout BTW BE 0244.195.916. Dit rapport kan zonder de voorafgaande schriftelijke toestemming van VITO niet geheel of gedeeltelijk worden gereproduceerd of worden gebruikt voor het instellen van claims, voor het voeren van gerechtelijke procedures, voor reclame of antireclame en ten behoeve van werving in meer algemene zin. Tenzij uitdrukkelijk anders bepaald is de informatie zoals verstrekt in dit rapport van vertrouwelijk aard en kan dit rapport, of delen ervan, niet worden verspreid aan derden. In het geval dat reproductie of verspreiding wel is toegestaan, vb. door de vermelding "algemene verspreiding", is bronvermelding verplicht.

LIJST VAN FIGUREN

Figuur 1: Overzicht van de Koc-waarden per PFAS parameter.	14
Figuur 2: Depositiewaarden ($\mu\text{g}/\text{m}^2$ jaar) per PFAS (logaritmische schaal) waarbij de gehanteerde toetsingswaarde in bodem ($8 \mu\text{g}/\text{kg}$ droge stof) net niet overschreden wordt in een tijdsperiode van 100 jaar voor verschillende Koc-waarden op basis van de ITRC dataset.	16
Figuur 3: Depositiewaarden ($\mu\text{g}/\text{m}^2$ jaar) per PFAS (logaritmische schaal) waarbij de gehanteerde toetsingswaarde in grondwater ($100 \text{ ng}/\text{l}$) net niet overschreden wordt in een tijdsperiode van 100 jaar voor verschillende Koc-waarden op basis van de ITRC dataset. .	17
Figuur 4: Diepteprofiel van de concentratie PFBA in de toplaag van de bodem (0 – 30 centimeter onder maaiveld) bij een atmosferische depositie van $30,15 \mu\text{g}/\text{m}^2$ jaar na simulatieperiodes van 10, 30 en 100 jaar.	18
Figuur 5: Depositiewaarden ($\mu\text{g}/\text{m}^2$ jaar) per PFAS (logaritmische schaal) waarbij de gehanteerde toetsingswaarde in bodem ($8 \mu\text{g}/\text{kg}$ droge stof) net niet overschreden wordt in een tijdsperiode van 100 jaar voor verschillende Koc-waarden op basis van de dataset uit de lopende OVAM studie.	19
Figuur 6: Depositiewaarden ($\mu\text{g}/\text{m}^2$ jaar) per PFAS (logaritmische schaal) waarbij de gehanteerde toetsingswaarde in grondwater ($100 \text{ ng}/\text{l}$) net niet overschreden wordt in een tijdsperiode van 100 jaar voor verschillende Koc-waarden op basis van de dataset uit de lopende OVAM studie.	20
Figuur 7: Depositiewaarden ($\mu\text{g}/\text{m}^2$ jaar) per PFAS (logaritmische schaal) waarbij de gehanteerde toetsingswaarde in bodem ($8 \mu\text{g}/\text{kg}$ droge stof) net niet overschreden wordt in een tijdsperiode van 100 jaar met de Koc-waarden uit de lopende OVAM studie op basis van de residu- en eluaatconcentraties.	22
Figuur 8: Depositiewaarden ($\mu\text{g}/\text{m}^2$ jaar) per PFAS (logaritmische schaal) waarbij de gehanteerde toetsingswaarde in grondwater ($100 \text{ ng}/\text{l}$) net niet overschreden wordt in een tijdsperiode van 100 jaar met de Koc-waarden uit de lopende OVAM studie op basis van de residu- en eluaatconcentraties.	23
Figuur 9: Depositiewaarden ($\mu\text{g}/\text{m}^2$ jaar) per PFAS (logaritmische schaal) waarbij de gehanteerde toetsingswaarde in grondwater ($100 \text{ ng}/\text{l}$) net niet overschreden wordt in een tijdsperiode van 500 jaar met de Koc-waarden uit de lopende OVAM studie op basis van de residu- en eluaatconcentraties.	24
Figuur 10: Depositiewaarden ($\mu\text{g}/\text{m}^2$ jaar) per PFAS (logaritmische schaal) waarbij de gehanteerde toetsingswaarde in grondwater ($100 \text{ ng}/\text{l}$) net niet overschreden wordt in een tijdsperiode van 500 jaar voor verschillende Koc-waarden op basis van de dataset uit de lopende OVAM studie.	25
Figuur 11: Diepteprofiel van de concentratie PFDoDS in de toplaag van de bodem (0 – 30 centimeter onder maaiveld) bij een atmosferische depositie van $172 \mu\text{g}/\text{m}^2$ jaar na simulatieperiodes van 50, 100 en 500 jaar.	26
Figuur 12: Tijdsevolutie (tot 500 jaar) van de concentratie PFDoDS in het grondwater bij een atmosferische depositie van 172 en $30,15 \mu\text{g}/\text{m}^2$ jaar.	27
Figuur 13: Depositiewaarden ($\mu\text{g}/\text{m}^2$ jaar) per PFAS waarbij de gehanteerde toetsingswaarde in bodem ($8 \mu\text{g}/\text{kg}$ droge stof) niet overschreden wordt in een tijdsperiode van 100 jaar met de Koc-waarden uit de lopende OVAM studie op basis van de residu- en eluaatconcentraties.	28
Figuur 14: Depositiewaarden ($\mu\text{g}/\text{m}^2$ jaar) per PFAS waarbij de gehanteerde toetsingswaarde in bodem ($8 \mu\text{g}/\text{kg}$ droge stof) niet overschreden wordt in een tijdsperiode van 100 jaar met de Koc-waarden uit de lopende OVAM studie op basis van de residu- en eluaatconcentraties.	28

Ref: WET/2410561/WSmmij052025

Dit rapport is de weerslag van een onafhankelijk wetenschappelijk onderzoek op basis van de stand van de kennis van wetenschap en techniek beschikbaar bij VITO op het moment van het onderzoek. Alle intellectuele eigendomsrechten, waaronder het auteursrecht, op dit rapport berusten bij de Vlaamse Instelling voor Technologisch Onderzoek ("VITO"), Boeretang 200, BE-2400 Mol, RPR Turnhout BTW BE 0244.195.916. Dit rapport kan zonder de voorafgaande schriftelijke toestemming van VITO niet geheel of gedeeltelijk worden gereproduceerd of worden gebruikt voor het instellen van claims, voor het voeren van gerechtelijke procedures, voor reclame of antireclame en ten behoeve van werving in meer algemene zin. Tenzij uitdrukkelijk anders bepaald is de informatie zoals verstrekt in dit rapport van vertrouwelijk aard en kan dit rapport, of delen ervan, niet worden verspreid aan derden. In het geval dat reproductie of verspreiding wel is toegestaan, vb. door de vermelding "algemene verspreiding", is bronvermelding verplicht.

Figuur 15: Depositiewaarden ($\mu\text{g}/\text{m}^2$ jaar) per PFAS (logaritmische schaal) waarbij de gehanteerde toetsingswaarde in grondwater (100 ng/l) net niet overschreden wordt in een tijdsperiode van 100 jaar met de Koc-waarden uit de lopende OVAM studie op basis van de residu- en eluaatconcentraties.	29
Figuur 16: Depositiewaarden ($\mu\text{g}/\text{m}^2$ jaar) per PFAS (logaritmische schaal) waarbij de gehanteerde toetsingswaarde in bodem (8 $\mu\text{g}/\text{kg}$ droge stof) net niet overschreden wordt in een tijdsperiode van 100 jaar met de Koc-waarden uit de lopende OVAM studie op basis van de residu- en eluaatconcentraties.	30
Figuur 17: Diepteprofiel van de concentratie PFNS in de toplaag van de bodem (0 – 30 centimeter onder maaiveld) bij een atmosferische depositie van 100 $\mu\text{g}/\text{m}^2$ jaar na simulatieperiodes van 20, 40 en 100 jaar.	31
Figuur 18: Tijdsevolutie (tot 100 jaar) van de concentratie PFNS in het grondwater bij een atmosferische depositie van 100 $\mu\text{g}/\text{m}^2$ jaar.	31
Figuur 19: Depositiewaarde (in $\mu\text{g}/\text{m}^2$ jaar) in functie van de gehanteerde toetsingswaarde in bodem (in $\mu\text{g}/\text{kg}$ droge stof) voor PFBA over een tijdsperiode van 100 jaar.	32
Figuur 20: Depositiewaarden ($\mu\text{g}/\text{m}^2$ jaar) per PFAS voor verschillende gehalten organische koolstof in de bodem, waarvoor de bodemconcentratie net onder de gehanteerde toetsingswaarde van 8 $\mu\text{g}/\text{kg}$ droge stof blijft over een gesimuleerde tijdsperiode van 100 jaar.	36
Figuur 21: Depositiewaarden ($\mu\text{g}/\text{m}^2$ jaar) per PFAS (logaritmische schaal) voor verschillende gehalten organische koolstof in de bodem, waarvoor de grondwaterconcentratie net onder de gehanteerde toetsingswaarde van 100 ng/l blijft over een gesimuleerde tijdsperiode van 100 jaar.	37
Figuur 22: Depositiewaarden ($\mu\text{g}/\text{m}^2$ jaar) per PFAS voor verschillende droge stofdichtheden, waarvoor de bodemconcentratie net onder de gehanteerde toetsingswaarde van 8 $\mu\text{g}/\text{kg}$ droge stof blijft over een gesimuleerde tijdsperiode van 100 jaar.	38
Figuur 23: Depositiewaarden ($\mu\text{g}/\text{m}^2$ jaar) per PFAS (logaritmische schaal) voor verschillende droge stofdichtheden, waarvoor de grondwaterconcentratie net onder de gehanteerde toetsingswaarde van 100 ng/l blijft over een gesimuleerde tijdsperiode van 100 jaar.	38
Figuur 24: Depositiewaarden ($\mu\text{g}/\text{m}^2$ jaar) per PFAS voor verschillende waarden van het neerslagoverschot, waarvoor de bodemconcentratie net onder de gehanteerde toetsingswaarde van 8 $\mu\text{g}/\text{kg}$ droge stof blijft over een gesimuleerde tijdsperiode van 100 jaar.	39
Figuur 25: Depositiewaarden ($\mu\text{g}/\text{m}^2$ jaar) per PFAS (logaritmische schaal) voor verschillende waarden van het neerslagoverschot, waarvoor de grondwaterconcentratie net onder de gehanteerde toetsingswaarde van 100 ng/l blijft over een gesimuleerde tijdsperiode van 100 jaar.	39
Figuur 26: Depositiewaarden ($\mu\text{g}/\text{m}^2$ jaar) per PFAS (logaritmische schaal) voor verschillende diktes van de onverzadigde zone, waarvoor de grondwaterconcentratie net onder de gehanteerde toetsingswaarde van 100 ng/l blijft over een gesimuleerde tijdsperiode van 100 jaar.	40

Ref: WET/2410561/WSmmij052025

Dit rapport is de weerslag van een onafhankelijk wetenschappelijk onderzoek op basis van de stand van de kennis van wetenschap en techniek beschikbaar bij VITO op het moment van het onderzoek. Alle intellectuele eigendomsrechten, waaronder het auteursrecht, op dit rapport berusten bij de Vlaamse Instelling voor Technologisch Onderzoek ("VITO"), Boeretang 200, BE-2400 Mol, RPR Turnhout BTW BE 0244.195.916. Dit rapport kan zonder de voorafgaande schriftelijke toestemming van VITO niet geheel of gedeeltelijk worden gereproduceerd of worden gebruikt voor het instellen van claims, voor het voeren van gerechtelijke procedures, voor reclame of antireclame en ten behoeve van werving in meer algemene zin. Tenzij uitdrukkelijk anders bepaald is de informatie zoals verstrekt in dit rapport van vertrouwelijk aard en kan dit rapport, of delen ervan, niet worden verspreid aan derden. In het geval dat reproductie of verspreiding wel is toegestaan, vb. door de vermelding "algemene verspreiding", is bronvermelding verplicht.

LIJST VAN TABELLEN

Tabel 1: Overzicht van de PFAS opgenomen in de CMA- en WAC procedures voor PFAS in bodem en water.	4
Tabel 2: F-LEACH parameters onverzadigde zone	6
Tabel 3: F-LEACH parameters verzadigde zone	8
Tabel 4: Overzicht van de lage, standaard en hoge waarde voor de modelparameters opgenomen in de sensitiviteitsanalyse voor omgevingsfactoren en bodemeigenschappen. 10	
Tabel 5: Bekomen a- en b-coëfficiënten voor de relatie tussen de maximale depositiewaarde (in $\mu\text{g}/\text{m}^2$ jaar) en de gehanteerde toetsingswaarde voor bodem (in $\mu\text{g}/\text{kg}$ droge stof).	33
Tabel 6: Bekomen a- en b-coëfficiënten voor de relatie tussen de maximale depositiewaarde (in $\mu\text{g}/\text{m}^2$ jaar) en de gehanteerde toetsingswaarde voor grondwater (in $\mu\text{g}/\text{l}$).	34
Tabel 7: Overzicht van de parameterwaarden van de Henry-coëfficiënt, oplosbaarheid en diffusiecoëfficiënt van de verschillende PFAS.	47
Tabel 8: Overzicht van de gemiddelde, minimale en maximale Log(Koc)-waarde voor de verschillende PFAS op basis van verschillende datasets.	49

Ref: WET/2410561/WSmmij052025

Dit rapport is de weerslag van een onafhankelijk wetenschappelijk onderzoek op basis van de stand van de kennis van wetenschap en techniek beschikbaar bij VITO op het moment van het onderzoek. Alle intellectuele eigendomsrechten, waaronder het auteursrecht, op dit rapport berusten bij de Vlaamse Instelling voor Technologisch Onderzoek ("VITO"), Boeretang 200, BE-2400 Mol, RPR Turnhout BTW BE 0244.195.916. Dit rapport kan zonder de voorafgaande schriftelijke toestemming van VITO niet geheel of gedeeltelijk worden gereproduceerd of worden gebruikt voor het instellen van claims, voor het voeren van gerechtelijke procedures, voor reclame of antireclame en ten behoeve van werving in meer algemene zin. Tenzij uitdrukkelijk anders bepaald is de informatie zoals verstrekt in dit rapport van vertrouwelijk aard en kan dit rapport, of delen ervan, niet worden verspreid aan derden. In het geval dat reproductie of verspreiding wel is toegestaan, vb. door de vermelding "algemene verspreiding", is bronvermelding verplicht.

DISCLAIMER

In dit rapport worden depositiewaarden berekend die overeenkomen met volgende toetsingswaarden voor bodem en water:

- voor bodem: PFOA 2 µg/kg droge stof; PFOS 3 µg/kg droge stof en overige PFAS 8 µg/kg droge stof;
- voor grondwater: 100 ng/l voor 20 drinkwater PFAS.

Deze waarden werden berekend bij wijze van voorbeeld om meer inzicht te geven in de impact van depositie op bodem en grondwater. Hierbij verwijzen we naar de richtinggevende toetsingswaarden voor bodemonderzoek en sanering PFAS (OVAM, 1 juli 2025) waarbij de toetsingswaarden afhangen van het typegebied (zie <https://ovam.vlaanderen.be/pfas>) en de definitieve goedkeuring van de Vlaamse regering van 19 december 2025 van het 'Ontwerp van decreet tot wijziging van het Bodemdecreet van 27 oktober 2006, wat betreft de vaststelling van richtwaarden voor bodemkwaliteit en waarden voor het gebruik van bodemmateriële' (<https://www.vlaanderen.be/vlaamse-regering/beslissingen-van-de-vlaamse-regering/wijziging-bodemdecreet-vaststelling-richt-achtergrond-en-toetsingswaarden>).

De berekende depositiewaarden kunnen in vergunningsdossiers niet zonder meer gehanteerd worden als toetsingswaarden voor depositie aangezien hierbij ook andere elementen in rekening kunnen gebracht worden: de cumulatieve impact van verschillende bronnen, de cumulatieve impact van verschillende PFAS, de reeds aanwezige PFAS in het milieu, de locatie, minimalisatie, haalbaarheid, achtergronddepositie, ...

1 INLEIDING

PFAS vormen een grote groep van chemische stoffen die gekenmerkt worden door hun poly- of per-gefluoreerde alkylstructuur. Ze worden vaak ingedeeld op basis van de lengte van de koolstofketen in korte- en lange-ketenverbindingen. Door de aanwezigheid van sterke koolstof-fluorverbindingen zijn PFAS uiterst persistent in het milieu. Dankzij hun water-, vet- en vuilafstotende eigenschappen en hun hoge thermische stabiliteit worden ze op brede schaal toegepast in onder andere brandblusschuimen, verchromingsprocessen, textiel- en papierbehandeling, cosmetica, kookgerei, schoonmaakproducten, smeermiddelen, verf, pesticiden en waxen.

PFAS kunnen via tal van wegen, waaronder emissies tijdens productieprocessen, incidenten zoals het blussen van een brand of het gebruik van consumentenproducten, in de verschillende milieucompartimenten terechtkomen zoals lucht, bodem, water en sediment. Literatuuronderzoek in het kader van het PFAS-actieplan heeft bevestigd dat lucht een relevante verspreidingsroute vormt. Momenteel bestaat er in Vlaanderen nog geen officieel toetsingskader voor de beoordeling van PFAS-depositie via lucht. Een recente studie van VITO en ARCHE stelde voor het eerst een toetsingskader voor PFBA en PFOS voor, maar

voor andere PFAS ontbreekt een dergelijke richtlijn nog. Toch wordt bij vergunningsprocedures verwacht dat beoordeeld wordt of de voorziene PFAS-depositie aanvaardbaar is. Een mogelijke oplossing is het afleiden van relaties tussen de atmosferische depositieflux en de resulterende concentraties in bodem en grondwater binnen een bepaalde tijdsperiode. Deze concentraties, die door modellering bekomen kunnen worden, kunnen dan vervolgens getoetst worden aan bestaande toetsingswaarden of een zelfgekozen drempelwaarde in bodem of grondwater.

Dit rapport presenteert de resultaten van een modelmatige analyse van de relatie tussen atmosferische depositie van PFAS en de concentraties in bodem en grondwater voor 42 verschillende PFAS in functie van de tijd. Op basis van deze modelsimulaties kan bepaald worden welke depositiefluxen voor een bepaalde PFAS-verbinding maximaal kunnen toegelaten worden zonder de gehanteerde toetsingswaarden in bodem en/of grondwater te overschrijden. Daarnaast werd ook voor elke PFAS-verbinding de relatie tussen deze depositieflux en de gehanteerde toetsingswaarde bepaald, zodat de bevindingen uit deze studie gebruikt kunnen worden, onafhankelijk van de gebruikte toetsingswaarde. Deze studie omvat drie afzonderlijke delen:

- Het bepalen van de nodige modelparameters voor PFAS-verbindingen die het gedrag van PFAS in de bodem bepalen. Dit op basis van een literatuuronderzoek.
- Het bepalen van de relatie tussen atmosferische depositie en bodem- en grondwaterconcentraties voor PFAS met behulp van het F-LEACH model.
- Het inschatten van de onzekerheid op deze bekomen relaties en het effect van omgevingsvariabelen en bodemeigenschappen op deze relaties (sensitiviteitsanalyse).

2 METHODOLOGIE

Om de relatie tussen PFAS-depositie en de resulterende concentraties in bodem en grondwater te analyseren, werd gebruikgemaakt van het uitloogmodel F-LEACH. In het kader van deze studie werd een literatuuronderzoek uitgevoerd om de relevante fysico-chemische eigenschappen van PFAS te identificeren, die vervolgens als input in het model zijn gebruikt. Naast het afleiden van toelaatbare depositiefluxen op basis van bestaande toetsingswaarden voor bodem en grondwater, werd ook een sensitiviteitsanalyse uitgevoerd om inzicht te krijgen in welke modelparameters de uitkomsten het sterkst beïnvloeden. Voor elke PFAS werd op basis van de F-LEACH modelresultaten een duidelijk lineair verband vastgesteld tussen de atmosferische depositie en de resulterende concentraties in zowel bodem als grondwater. Dit impliceert dat de relatie tussen depositie en milieukwaliteit kan worden beschreven aan de hand van een eenvoudige lineaire functie. Door deze relaties afzonderlijk af te leiden voor elke PFAS, ontstaat de mogelijkheid om, onafhankelijk van de oorspronkelijk gehanteerde toetsingswaarden, de bijbehorende kritische depositie te bepalen voor eender welke toetsingswaarde. Met andere woorden, de methode maakt het mogelijk om de invloed van verschillende toetsingskaders of beleidskeuzes op een transparante en reproduceerbare manier te evalueren. In deze sectie wordt eerst het F-LEACH model kort toegelicht, gevolgd door de gehanteerde methodologie voor de drie doelstellingen van deze studie.

2.1 Uitloogmodel F-LEACH

Om de doelstellingen van deze studie te behalen wordt gebruik gemaakt van het proces-gebaseerde softwarepakket F-LEACH, dat in staat is om de relatie tussen atmosferische depositie van PFAS en de concentraties in bodem en grondwater te simuleren (Seuntjens et al., 2005; Joris et al., 2005). Wiskundig gezien maakt het F-LEACH softwarepakket gebruik van analytische oplossingen voor de convectie-dispersie vergelijking (CDE) om 1D-transport (verticaal) van pollutanten in de onverzadigde zone te simuleren (Toride et al., 1995). Daarbij wordt adsorptie aan de vaste fase en eventuele vervluchtiging of afbraak in rekening gebracht.

Het bodemcompartiment vormt in deze de link tussen de atmosferische deposities en concentraties van PFAS in bodem en grondwater. Via een neerwaartse waterflux door een neerslagoverschot aan het maaiveld kan PFAS immers naar beneden migreren door het bodemprofiel en zo voor verspreidingsrisico's zorgen door uitloging naar het grondwater. De onverzadigde zone van de bodem is echter een complex systeem waarin interacties plaatsvinden tussen lucht, bodempartikels, organisch materiaal en water. Door sorptie aan organisch materiaal en bodempartikels kan het transport van PFAS door het bodemprofiel aanzienlijk vertraagd worden. Met behulp van een proces-gebaseerd transportmodel kan het gedrag van PFAS in de onverzadigde zone van de bodem gesimuleerd worden. De resultaten van deze berekeningen worden gebruikt voor:

- evaluatie van de bodemconcentraties doorheen het bodemprofiel ten gevolge van atmosferische depositie;
- evaluatie van de concentraties die uitlogen naar grondwater ten gevolge van atmosferische depositie.

Door middel van iteratieve berekeningen kan namelijk per pollutent de maximale depositieflux worden bepaald die kan aanwezig zijn alvorens eventuele bestaande toetsingswaarden in de bodem en in het grondwater niet overschreden worden binnen een bepaalde tijdsperiode.

Deze maximaal mogelijke depositieflux wordt verder in het rapport de depositiewaarde genoemd.

2.2 Literatuuronderzoek naar modelparameters

Voor deze studie werden in totaal 42 PFAS geselecteerd die opgenomen worden in de modelsimulaties. Deze groep komt overeen met de 42 PFAS die opgenomen zijn in de CMA- en WAC-procedures (CMA/3/D en WAC/IV/A/025) voor PFAS in bodem en water in Vlaanderen (Tabel 1). Een belangrijke eigenschap van PFAS die ook het gedrag in bodem en grondwater voor een groot stuk kan verklaren is de lengte van de koolstofketen die aanwezig is in de moleculaire structuur van de PFAS. Moleculen met een langere koolstofketen zullen daarbij minder snel uitlogten naar grondwater dan kortere ketens.

Tabel 1: Overzicht van de PFAS opgenomen in de CMA- en WAC procedures voor PFAS in bodem en water. Van elke PFAS is eveneens het unieke CAS-nummer opgenomen.

Naam PFAS	Volledige naam PFAS	CAS-nummer
PFBA	Perfluor-n-butaanzuur	375-22-4
PFPeA	Perfluor-n-pentaanzuur	2706-90-3
PFHxA	Perfluor-n-hexaanzuur	307-24-4
PFHpA	Perfluor-n-heptaanzuur	375-85-9
PFOA	Perfluor-n-octaanzuur	335-67-1
PFNA	Perfluor-n-nonaanzuur	375-95-1
PFDA	Perfluor-n-decaanzuur	335-76-2
PFUnDA	Perfluor-n-undecaanzuur	2058-94-8
PFDoDA	Perfluor-n-dodecaanzuur	307-55-1
PFTriDA	Perfluor-n-tridecaanzuur	72629-94-8
PFTeDA	Perfluor-n-tetradecaanzuur	376-06-7
PFHxDA	Perfluor-n-hexadecaanzuur	67905-19-5
PFODA	Perfluor-n-octadecaanzuur	16517-11-6
PFBS	Perfluor-n-butaansulfonzuur	375-73-5
PFPeS	Perfluor-n-pentaansulfonzuur	2706-91-4
PFHxS	Perfluor-n-hexaansulfonzuur	355-46-4
PFHpS	Perfluor-n-heptaansulfonzuur	375-92-8
PFOS	Perfluor-n-octaansulfonzuur	1763-23-1
PFNS	Perfluor-n-nonaansulfonzuur	68259-12-1
PFDS	Perfluor-n-decaansulfonzuur	335-77-3
PFUnDS	Perfluor-n-undecaansulfonzuur	749786-16-1
PFDoDS	Perfluor-n-dodecaansulfonzuur	79780-39-5
PFTriDS	Perfluor-n-tridecaansulfonzuur	791563-89-8
4:2 FTS	4:2 fluortelomeersulfonzuur	757124-72-4
6:2 FTS	6:2 fluortelomeersulfonzuur	27619-97-2
8:2 FTS	8:2 fluortelomeersulfonzuur	39108-34-4
10:2 FTS	10:2 fluortelomeersulfonzuur	120226-60-0
PFOSA	perfluor-n-octaansulfonamide	754-91-6
MePFOSA	N-methylperfluor-n-octaansulfonamide	31506-32-8
EtPFOSA	N-ethylperfluor-n-octaansulfonamide	4151-50-2
MePFOSAA	N-methylperfluor-n-octaansulfonamido-azijnzuur	2355-31-9
EtPFOSAA	N-ethylperfluor-n-octaansulfonamido-azijnzuur	2991-50-6
6:2 diPAP	6:2 fluortelomeerfosfaat diester	57677-95-9
6:2/8:2 diPAP	6:2/8:2 fluortelomeerfosfaat diester	943913-15-3
8:2 diPAP	8:2 fluortelomeerfosfaat diester	678-41-1

PFBSA	perfluor-n-butaansulfonamide	30334-69-1
MePFBSA	N-methylperfluor-n-butaansulfonamide	68298-12-4
MePFBSAA	N-methylperfluor-n-butaansulfonylamide azijnzuur	159381-10-9
PFHxSA	perfluor-n-hexaansulfonamide	41997-13-1
HFPO-DA	perfluor-2-propoxypropaanzuur	13252-13-6
DONA	4,8-dioxa-3H-perfluornonaanzuur	919005-14-4
PFECHS	perfluor-4-ethylcyclohexaansulfonzuur	646-83-3

Om het gedrag van de verschillende PFAS in de onverzadigde zone te beschrijven, maakt F-LEACH gebruik van verschillende inputparameters die de fysico-chemische eigenschappen van PFAS beschrijven. Deze lijst van stof-specifieke parameters bestaat uit:

- Bodem adsorptiecoëfficiënt (Koc) (l/kg)
- Henry coëfficiënt (H) (dimensieloos)
- Oplosbaarheid (S) (µg/l)
- Vervalfactor (µ) (dimensieloos)
- Diffusie coëfficiënt lucht (Da) (m²/jaar)

In deze studie wordt de aanname gemaakt dat PFAS niet afbreekt in bodem of grondwater, waardoor de vervalfactor steeds gelijk is gesteld aan 0. Hierbij wordt afbraak in de brede zin van het woord geïnterpreteerd. Zowel finale afbraak van de PFAS-molecule als transformatie van de ene PFAS naar een andere (bv. van precursor naar eindproduct) worden in deze studie niet in rekening gebracht. Bijgevolg werd er voor deze modelparameter geen oplijsting gemaakt van de beschikbare literatuurwaarden.

2.3 Relatie depositie en bodem- en grondwaterconcentraties voor standaardscenario

Met F-LEACH werden in het kader van deze studie verschillende sets van simulaties uitgevoerd voor de 42 PFAS meegenomen in deze studie. Omwille van het grote aantal simulaties dat in sommige gevallen vereist is, wordt voor een aantal delen van deze studie het aantal onderzochte PFAS gereduceerd naar de 20 PFAS opgenomen in de EU Drinkwaterrichtlijn, bestaande uit de PFAS families van de carbon- en sulfonzuren met ketenlengtes tussen de 4 en 13 koolstofatomen.

2.3.1 Evaluatie van de bodemconcentraties ten gevolge van depositie

In deze reeks van simulaties werd nagegaan wat de maximale PFAS depositie mag zijn om bepaalde toetsingswaarden in de bodem niet te overschrijden. Het gekozen evaluatie-criterium voor het bepalen van maximale toetsingswaarde voor depositie is de gemiddelde bodemconcentratie over 30 cm (toplaag bodem) na een tijdsperiode van 100 jaar. Anders geformuleerd werd er nagegaan bij welke depositie de concentratie van PFAS in de toplaag van de bodem na 100 jaar, gelijk is aan de te evalueren toetsingswaarde. Zoals eerder aangegeven kan deze analyse uitgevoerd worden voor eender welke waarde als toetsingswaarde, omwille van de lineaire relatie tussen de atmosferische depositie van PFAS en de bodemconcentratie (zie verder). Aangezien in deze simulaties elke PFAS afzonderlijk gesimuleerd wordt, diende een toetsingswaarde gekozen te worden om onderlinge vergelijking tussen PFAS mogelijk te maken. Daarom werd als toetsingswaarde in bodem gekozen voor de waarde van 8 µg/kg droge stof. Voor PFOA en PFOS, waarvoor wel specifieke toetsingswaarden bestaan, werden de depositiewaarden bijkomend bepaald voor de toetsingswaarden van 2 en 3 µg per kilogram droge stof respectievelijk. Aangezien de simulaties telkens slechts één PFAS simuleren wordt de assumptie gemaakt dat de

gesimuleerde PFAS de volledige beschikbare hoeveelheid PFAS voorstelt. Mengsels van verschillende PFAS worden hier dus niet verder gesimuleerd. Bijkomend wordt de assumptie gemaakt dat de atmosferische depositie aan het oppervlak constant is over de volledige simulatieperiode.

Voor de berekening van het transport van PFAS doorheen het bodemprofiel, dienen verschillende input-parameters meegegeven te worden aan F-LEACH. Dit zijn zowel stof-specifieke parameters, als generieke parameters die de bodemkolom beschrijven. De stof-specifieke parameters meegenomen in de simulaties worden beschreven in sectie 3.1, en werden bepaald op basis van de resultaten van de literatuurstudie. De generieke parameters die het bodemprofiel beschrijven worden weergegeven in Tabel 2.

Tabel 2: F-LEACH parameters onverzadigde zone

Parameter	Omschrijving	Symbool	Eenheid	Standaardwaarde
droge stofdichtheid	droge stofdichtheid van de bodem	ρ	kg/l	1,5
vochtgehalte	volumetrisch vochtgehalte van de bodem	θ_w	cm ³ /cm ³	0,2
dikte toplaag	dikte van de toplaag	d_1	m	0,3
concentratie in toplaag	startconcentratie pollutant in de toplaag	C_1	mg/kg ds	0
dikte onderliggende bodemlaag	dikte van de laag tussen toplaag en grondwatertafel	d_0	m	0,7
concentratie in onderliggende laag	startconcentratie pollutant in de laag tussen de toplaag en de grondwatertafel	C_{AW}	mg/kg ds	0
fractie organische koolstof	gehalte organische koolstof (=gehalte organische stof *0,58)	f_{oc}	kg/kg	Afhankelijk van toegepaste scenario's
Neerslagoverschot	Gemiddeld verschil tussen neerslag en gewasverdamping, stelt hoeveelheid neerslag voor dat effectief infiltreert in de bodem	q	m/jaar	0,265
Lengte bronzone		L	m	100

F-LEACH geeft als output de concentratie van opgeloste stoffen in het bodemwater langsheen het bodemprofiel. Een contaminant verdeelt zich in de onverzadigde bodem echter over drie fasen: de vaste fase, het bodemwater, en de bodemlucht. De totaalconcentratie kan dan beschouwd worden als de som van de concentraties in de onderscheiden bodemfasen. Via onderstaande formule werden de opgeloste concentraties in bodemwater omgezet naar totale bodemconcentraties (uitgedrukt in µg/kg droge stof) (Seuntjens *et al.*, 2005).

$$C_b = C_w \times \left(K_d + \frac{H' \theta_a + \theta_w}{\rho} \right) \quad \text{Vgl. 1}$$

met: C_b is de totaalconcentratie (µg/kg ds), C_w is de concentratie in het bodemwater (µg/l), θ_w is het volumetrisch vochtgehalte (cm³/cm³), θ_a is het volumetrisch luchtgehalte (cm³/cm³), ρ is de schijnbare droge stofdichtheid (kg droge stof/l) en H' de dimensieloze Henry coëfficiënt. De K_d -waarde geeft de verdeling van PFAS tussen bodemwater en vaste stof en wordt afgeleid op basis van de K_{oc} -waarde.

$$K_d = \frac{c_s}{c_w} = f_{oc} K_{oc} \quad \text{Vgl. 2}$$

Met f_{oc} de fractie organische stof in de bodem, en K_{oc} de verdelingscoëfficiënt tussen de organische stof en het bodemwater. In de simulaties werd voor de bovenste 30 cm van de bodem een organisch koolstofgehalte van 2,9% gebruikt. Dit is de P90-waarde (90^{ste} percentiel) van het organisch koolstofgehalte in de toplaag van de bodem. Dit is dus een vrij hoge waarde wat zal leiden tot hoge gesimuleerde PFAS-concentraties in de bodem. Zo wordt rekening gehouden met een 'worst case scenario'. Tenslotte wordt de assumptie gemaakt dat de bodem bij de start van de simulatie nog geen PFAS bevat en dat de achtergrondwaarde dus gelijk is aan 0 µg/kg droge stof. Deze assumptie is in zekere mate strijdig met de realiteit, aangezien op veel locaties reeds een zekere achtergrondconcentratie van PFAS in de bodem en het grondwater aanwezig is. Echter, uit eerdere studies is reeds gebleken dat de huidige achtergrondconcentraties in de bodem reeds op termijn voor overschrijding van de huidige toetsingswaarde voor grondwater van 100 ng/l kan zorgen. Hieruit zou dan de conclusie moeten volgen dat er geen atmosferische depositie voor alle PFAS mogelijk is. Door de assumptie te maken dat er geen achtergrondconcentratie van PFAS in de bodem of het grondwater aanwezig is kan de relatie tussen de atmosferische depositie en de bodem- en grondwaterconcentraties in een geïsoleerde modelsetting onderzocht worden, zonder interferentie van andere processen zoals achtergrondconcentraties. Deze modelresultaten tonen dus het netto effect van atmosferische depositie van PFAS op de bodem- en grondwaterconcentraties. De eventuele aanwezigheid van achtergrondconcentraties kan nog steeds in rekening gebracht worden in een volgende stap bij bijvoorbeeld normstelling.

2.3.2 Evaluatie van de concentraties die uitlogen naar grondwater ten gevolge van depositie

Naast de evolutie van de PFAS concentraties in de bodem kan ook gekeken worden naar de uitlogging uit de onverzadigde zone naar het grondwater. Daarbij wordt de assumptie gemaakt dat het grondwater zich op 1 meter diepte bevindt.

In de simulaties werd voor de bovenste 30 centimeter van de bodem een organisch koolstofgehalte van 0,7% gebruikt, in de bodemlaag tussen 30 centimeter en 1 meter bedroeg het organisch koolstofgehalte 0,1%, in analogie met andere normeringskaders (Broos et al., 2015). Merk op dat het organisch koolstofgehalte hier lager ligt vergeleken met de evaluatie van bodemconcentraties. Dit zal leiden tot een lagere adsorptie van PFAS aan de vaste fase van de bodem, met een hogere uitlogging van PFAS als gevolg. Ook hier wordt dus uitgegaan van een 'worst case scenario' voor het grondwater, in analogie met andere normeringskaders.

Belangrijk is hierbij te melden dat de concentratie in het grondwater berekend wordt op basis van de uitgeloopte concentraties onderaan het de onverzadigde zone (het bodemprofiel), vermenigvuldigd met een verdunningsfactor. Deze factor simuleert een zekere mate van verversing van het grondwater aan de onderzijde van het bodemprofiel, waardoor de PFAS concentratie in het grondwater niet steeds blijft stijgen bij een constante influx vanuit het bodemprofiel, maar na verloop van tijd een evenwicht bereikt. Deze factor wordt berekend als volgt:

$$M_z = \min \left\{ \sqrt{0.0112 * L^2 + D_g(1 - e^{\frac{-L*q}{K*g*D_g}})} \right. \\ \left. D_g \right. \quad \text{Vgl. 3}$$

$$d_l = 1 + \left(\frac{K*g*M_z}{L*q} \right) \quad \text{Vgl. 4}$$

De gebruikte waarden voor de verschillende parameters zijn weergegeven in Tabel 3:

Tabel 3: F-LEACH parameters verzadigde zone

Parameter	Omschrijving	Symbool	Eenheid	Standaardwaarde
verhang	hydraulische gradiënt of verhang in de freatische laag	g	m/m	0.001
verzadigde doorlaatbaarheid	verzadigde doorlaatbaarheid van de freatische laag	K	m/j	365
dikte freatische laag	dikte van de freatische laag	D_g	m	10
initiële concentratie grondwater	Initiële concentratie in het grondwater	$C_{gw,0}$	µg/l	0
mengdiepte	dikte van de laag waarbinnen volledige menging van infiltrerend water en grondwater optreedt	M_z	m	Berekend als Vgl. 3
dilutiefactor	verhouding tussen de concentratie in het bodemwater en de concentratie in het grondwater	d_l	-	Berekend als Vgl. 4

2.3.3 Effect van gesimuleerde periode op depositiewaarden

De periode waarover de F-LEACH simulatie uitgevoerd wordt kan een belangrijk effect hebben op de bekomen resultaten. De simulaties in deze studie maken allen de assumptie dat de influx van PFAS (atmosferische depositie) constant is. Anderzijds zijn er in het model ook processen aanwezig die de PFAS opnieuw verwijderen uit het gemodelleerde systeem. In de onverzadigde zone is dit uitloging naar het grondwater en in het grondwater is dit de dilutiefactor. Dit is echter niet te verwarren met afbraak van PFAS. De PFAS breekt in het model niet af en zet ook niet om naar andere PFAS, maar verdwijnt uit het modeldomein. Hierbij is het voornamelijk voor het grondwater belangrijk om een voldoende lange simulatieperiode te hanteren. Indien binnen de simulatieperiode de PFAS die aan het maaiveld wordt afgezet het grondwater nog niet heeft bereikt via uitloging kan er nog geen uitspraak gedaan worden over het effect van een bepaalde depositieflux op de grondwaterconcentraties. De lengte van de simulatieperiode die nodig is om hierover de nodige conclusies te kunnen trekken is sterk afhankelijk van de eigenschappen van de onverzadigde zone en de PFAS in kwestie, aangezien deze de snelheid van uitloging controleren. Daarom wordt in deze studie voor de bodem een simulatieperiode van 100 jaar gehanteerd in analogie met andere normeringskaders. Voor grondwater worden bijgevolg voor alle PFAS identieke modelsimulaties uitgevoerd, enerzijds met een simulatieperiode van 100 jaar in overeenstemming met de simulatieperiode voor de bodem en anderzijds met een simulatieperiode van 500 jaar. Deze laatste zeer lange simulatieperiode laat toe om per PFAS te evalueren of 100 jaar een voldoende lange tijdsperiode is om de relatie tussen de atmosferische depositie van PFAS en de grondwaterconcentratie te beoordelen.

2.3.4 Effect van de duur van PFAS depositie op depositiewaarden

De hierboven beschreven simulaties gaan allen uit van een constante depositie van PFAS aan het maaiveld gedurende de volledige simulatieperiode. De modelsimulaties kunnen echter ook zo opgezet worden dat de PFAS depositie slechts plaatsvindt gedurende een gedeelte van deze periode. Om het effect van een kortere depositieperiode op de maximale depositiewaarden te bepalen werden bijkomende simulaties uitgevoerd voor zowel bodem als grondwater waarbij depositieperiodes van 10 en 20 jaar gehanteerd werden. De totale gesimuleerde periode blijft echter behouden op 100 jaar.

2.3.5 Effect van de gehanteerde toetsingswaarden

Op basis van de F-LEACH simulaties kan voor elke PFAS afzonderlijk nagegaan worden wat de maximaal mogelijke atmosferische depositie is zonder de toetsingswaarde in bodem of grondwater te overschrijden. Hierbij kan het interessant zijn om de relatie tussen de bekomen depositiewaarde en de gehanteerde toetsingswaarde verder te bestuderen. Indien de PFAS concentratie in het bestudeerde medium (bodem of grondwater) in evenwicht is met de constante atmosferische PFAS depositie aan het maaiveld is de relatie tussen de maximaal mogelijke depositie en de gehanteerde toetsingswaarde een lineair verband. Door per PFAS enkele F-LEACH simulaties uit te voeren met verschillende toetsingswaarden kan een rechte lijn gefit worden die de relatie tussen de depositiewaarde en de toetsingswaarde weergeeft in de volgende vorm:

$$MD = aT + b \quad \text{Vgl. 5}$$

waarbij MD de maximaal mogelijke depositie (in $\mu\text{g}/\text{m}^2$ jaar) en T de gehanteerde toetsingswaarde (in $\mu\text{g}/\text{kg}$ droge stof of $\mu\text{g}/\text{l}$). a en b zijn hierbij de te fitten coëfficiënten, maar aangezien deze relatie lineair van aard is bedraagt de r^2 -waarde logischerwijs 1. Daarnaast zal coëfficiënt b steeds gelijk zijn aan 0 indien de PFAS concentratie binnen de gesimuleerde tijdsperiode in evenwicht is met de depositieflux, aangezien een gehanteerde toetsingswaarde van 0 $\mu\text{g}/\text{kg}$ droge stof of ng/l logischerwijs leidt tot een maximaal mogelijke depositiewaarde van 0 $\mu\text{g}/\text{m}^2$ jaar. In deze studie werden deze relaties bepaald voor alle bestudeerde PFAS voor zowel toetsingswaarden in bodem en grondwater.

2.4 Sensitiviteitsanalyse omgevingsfactoren en bodemeigenschappen

Naast het beoordelen van de fysicochemische eigenschappen van de PFAS zoals bijvoorbeeld de Koc-waarden kan ook de gevoeligheid van de maximale depositie zonder de toetsingswaarde te overschrijden (hieronder depositiewaarde genoemd) voor verschillende omgevingsfactoren en bodemeigenschappen bestudeerd worden. Hiervoor werd de gevoeligheid bepaald voor twee bodemeigenschappen (gehalte organische koolstof in de bodem en de droge stofdichtheid) en twee omgevingsfactoren (neerslagoverschot en de diepte van het grondwater onder het maaiveld, hetgeen gelijk is aan de dikte van de onverzadigde zone). Voor elk van deze parameters werden simulaties uitgevoerd met de standaardwaarden zoals in eerdere simulaties toegepast, aangevuld met simulaties met een verhoogde en een verlaagde waarde. Voor het gehalte organische koolstof in de bodem werd

voor de standaardwaarde niet gewerkt met de waarden uit eerdere simulaties, maar werd gebruik gemaakt van het 10e, 50e en 90e percentiel van de verdeling aan organische koolstofgehalten uit de Aardewerk-databank (Broos et al., 2015). Een overzicht van deze waarden wordt gegeven in tabel 4. De andere modelparameters blijven ongewijzigd en behouden hun standaardwaarden.

De bodemtextuur wordt niet opgenomen in deze sensitiviteitsanalyse. Dit niet omwille van het feit dat bodemtextuur geen effect zou kunnen hebben op het uitlogingsgedrag van PFAS, maar wel omdat de bodemtextuur niet expliciet vertegenwoordigd is als modelparameter in F-LEACH. De bodemtextuur wordt in F-LEACH op een onrechtstreekse manier vertegenwoordigd door andere modelparameters zoals bijvoorbeeld de adsorptiecoëfficiënt (Koc-waarde). Bijgevolg wordt de bodemtextuur niet expliciet opgenomen in deze sensitiviteitsanalyse, maar wel ten dele geanalyseerd via de evaluatie van het effect van verschillende Koc-waarden op het uitlooggedrag van PFAS.

Tabel 4: Overzicht van de lage, standaard en hoge waarde voor de modelparameters opgenomen in de sensitiviteitsanalyse voor omgevingsfactoren en bodemeigenschappen. De standaardwaarden voor deze parameters (zoals toegepast in andere simulaties) zijn in het vet aangegeven.

Parameter	Lage waarde	Standaard waarde	Hoge waarde	Bron/duiding
Gehalte organische koolstof bodem (%)	0,7% (toplaag) 0,1% (onderliggende laag)	1,6% (toplaag) 0,5% (onderliggende laag)	2,9% (toplaag) 1% (onderliggende laag)	Minimale, gemiddelde en maximale waarden komen overeen met het 10 ^e , 50 ^e en 90 ^e percentiel van de verdeling aan organische koolstofgehalten volgens de Aardewerk-databank (Van Orshoven, 1988) zoals beschreven in Broos et al. (2015).
Neerslagoverschot (meter per jaar)	0,199 meter (25% lager dan gemiddelde waarde)	0,265 meter	0,331 meter (25% hoger dan gemiddelde waarde)	
Droge stofdichtheid bodem (g/cm ³)	1,25 g/cm ³	1,5 g/cm³	1,75 g/cm ³	
Diepte grondwater onder maaiveld/dikte onverzadigde zone (meter)	0,5 meter	1 meter	2 meter	

3 RESULTATEN

3.1 Literatuuronderzoek modelparameters

Op basis van de beschikbare literatuur werden voor nodige fysico-chemische eigenschappen van de verschillende PFAS waarden verzameld (EPA, 2016; Pancras et al., 2018; Van Holderbeke et al., 2024; EPA, 2025; ITRC, 2025). Voor elke PFAS die beschouwd werd in deze oefening kunnen de waarden voor de Henry coëfficiënt, oplosbaarheid en diffusie coëfficiënt in Bijlage A worden teruggevonden. Aangezien in deze studie de aanname gemaakt wordt dat PFAS niet afbreekt in bodem of grondwater, zijn geen literatuurwaarden voor de vervalfactor opgenomen. Voor de diffusiecoëfficiënt naar lucht konden uit de literatuur slechts waarden bekomen worden voor twee PFAS (PFBA en PFOS). Aangezien het daardoor niet mogelijk is om een correcte vergelijking te maken tussen de verschillende PFAS opgenomen in deze studie wordt diffusie naar de lucht niet mee opgenomen in de simulaties en is de diffusie-coëfficiënt voor lucht gelijk aan 0 m²/jaar. De F-LEACH simulaties waarvan de resultaten verderop in dit rapport opgenomen zijn maken steeds gebruik van deze waarden voor de stofspecifieke inputparameters zoals opgenomen in bijlage A, tenzij anders vermeld in de tekst.

3.1.1 Literatuuronderzoek Koc-waarden

In tegenstelling tot de andere fysico-chemische eigenschappen van de verschillende PFAS is er wel meer informatie beschikbaar over de adsorptiecoëfficiënt in bodem (Koc-waarde). De Koc-waarde per PFAS is één van de meest invloedrijke modelparameters in F-LEACH omwille van het sterke effect van de gekozen Koc-waarde op de uitloognelheid van PFAS in de bodem. Uit het literatuuronderzoek kwamen voor de Koc-waarden twee datasets naar voren. Enerzijds de ITRC-database die Koc-waarden uit de internationale literatuur bundelt en online ter beschikking stelt. Anderzijds de Koc-waarden die in een nog lopende OVAM studie bepaald werden voor 25 locaties verspreid over Vlaanderen. Een volledig overzicht van de bekomen Koc-waarden kan teruggevonden worden in Bijlage B.

De ITRC-database wordt onderhouden door de Amerikaanse Interstate Technology Regulatory Council (ITRC) en is een initiatief van de Environmental Research Institute of the States (ERIS) om de beschikbare data over PFAS uit de wetenschappelijke literatuur te bundelen in één database (ITRC, 2025). In deze databank zijn Koc-waarden beschikbaar voor 24 van de 42 bestudeerde PFAS, waaronder 15 van de 20 PFAS uit de EU Drinkwaterrichtlijn. De ontbrekende PFAS in deze laatste groep zijn allen sulfonzuren, meer specifiek PFPeS, PFNS, PFUnDS, PFDoDS en PFTrDS. Voor PFPeS en PFNS kon deze database aangevuld worden met Koc-waarden op basis van Nguyen et al., 2020. Aangezien deze databank de beschikbare informatie uit de wetenschappelijke literatuur bundelt zijn de opgelijste waarden voor een bepaalde PFAS meestal afkomstig uit verschillende bronnen. Bijgevolg werden ook verschillende methodologieën gehanteerd om deze waarden te bekomen (ITRC, 2025). Ondanks de beperkte aanvulling op basis van één bijkomende bron (Nguyen et al., 2020) zal omwille van de éénvoud naar deze dataset verwezen worden als de ITRC-dataset. Deze dataset omvat echter Koc-waarden uit verschillende milieumedia (bodem, sediment en waterbodem). Bijgevolg kan er eveneens een subselectie uit deze dataset gemaakt worden die enkel de Koc-waarden voor bodem omvat en dus beschouwd kan worden als een meer accurate subset voor gebruik in de context van dit rapport.

Naast deze (internationale) ITRC dataset is er ook een bijkomende dataset met Kd-waarden, specifiek voor Vlaanderen, beschikbaar. Deze ongepubliceerde dataset is afkomstig van een lopend onderzoeksproject dat VITO uitvoert in opdracht van de OVAM om specifieke Kd-waarden voor PFAS te bepalen voor Vlaanderen. In deze studie werden 26 bodemstalen, afkomstig van 25 locaties, geanalyseerd op PFAS. Hierbij werd de PFAS-concentratie bepaald op de bodemstalen, het eluaat na een 24u schudproef en het vaste residu na de schudproef. Op basis van de bekomen PFAS concentraties in bodem, eluaat en residu konden twee groepen Kd-waarden berekend worden. Enerzijds op basis van de bodem- en eluaat concentraties en anderzijds op basis van de residu- en eluaatconcentraties. In deze dataset zijn Kd-waarden beschikbaar voor 30 van de 42 bestudeerde PFAS, waaronder 19 van de 20 EU Drinkwaterrichtlijn PFAS. Voor deze laatste groep kon enkel voor PFTrDA (lange keten carbonzuur) geen waarde berekend worden omwille van het feit dat deze PFAS niet gedetecteerd werd in het eluaat. Op basis van het gemeten gehalte aan organische koolstof dat in deze studie voor elk bodemstaal beschikbaar is kan de bepaalde Kd-waarde omgerekend worden naar een Koc-waarde volgens vergelijking 2 (zie eerder).

Indien de Koc-waarde berekend wordt op basis van de bodemconcentraties wordt een gedeelte van de PFAS dubbel gemeten. De PFAS concentratie in bodem wordt namelijk bepaald en vervolgens wordt de schudproef uitgevoerd. Een deel van deze PFAS zal tijdens de schudproef naar het eluaat migreren, waar het opnieuw gemeten wordt. Daardoor zal de bekomen Koc-waarde hoger uitvallen. Voor de Koc-waarden op basis van de residuconcentraties worden de PFAS concentraties in het residu en het eluaat na de schudproef gebruikt. Hierbij worden PFAS niet dubbel gemeten, waardoor de PFAS concentraties in de vaste fase lager zullen zijn, hetgeen leidt tot lagere Koc-waarden. Deze tweede methode (op basis van de residuconcentraties) kan worden beschouwd als meer geschikt voor de doeleinden van deze studie omwille van het feit PFAS niet dubbel gemeten worden en omdat de aanwezige PFAS gedurende de schudproef in evenwicht is kunnen komen tussen vloeibare en vaste fase.

Figuur 1 geeft een visueel overzicht van de Koc-waarden voor de 42 target PFAS, afkomstig uit enerzijds de waarden voor bodem uit de ITRC-dataset (lichtblauwe balkjes) en anderzijds de Koc-waarden uit de lopende OVAM-studie op basis van de residuconcentraties (rode balkjes). Hieruit blijkt dat beide datasets in zekere mate overlappen, waarbij steeds een stijgende Koc-waarde zichtbaar is met toenemende ketenlengte. Deze stijgende Koc-waarden bij langere PFAS ketens zorgen voor een tragere uitloging van de lange keten PFAS in vergelijking met de korte keten PFAS.

Daarnaast kan uit figuur 1 afgeleid worden dat de OVAM-data voor veel PFAS een kleinere range vertonen. Dit kan verklaard worden door het feit dat de ITRC dataset bestaat uit een verzameling Koc-waarden uit verschillende studies. Daardoor bevat de dataset Koc-waarden uit verschillende geografische gebieden en verschillende labo-procedures. De OVAM-data omvatten slechts 26 bodemstalen, zijn afkomstig uit een kleine regio (Vlaanderen) en werden allen met dezelfde procedure geanalyseerd. Dit leidt logischerwijs tot een kleinere, maar meer coherente dataset.

Voor een aantal PFAS kon zowel uit de ITRC dataset als de OVAM dataset geen Koc-waarde bekomen worden. Om voor deze PFAS alsnog een Koc-waarde te bekomen voor gebruik in de F-LEACH simulaties werd gebruikt gemaakt van een empirische relatie tussen de Kd-waarde en het moleculair gewicht van de PFAS molecule (Nguyen et al., 2020). Deze relatie heeft de vorm van een log-lineair verband:

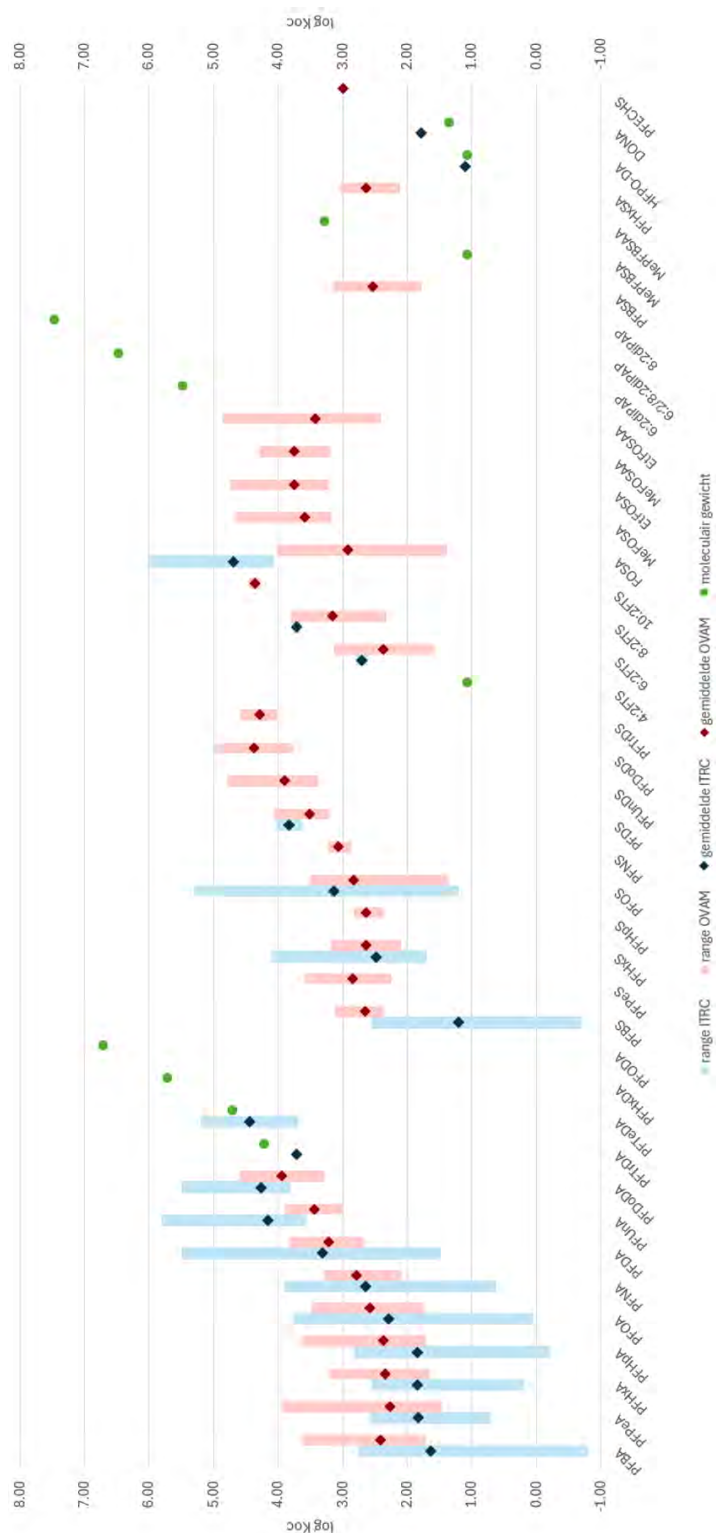
$$\text{Log}(Kd) = (0,01 * M) - 4,182$$

12

Dit rapport is de weerslag van een onafhankelijk wetenschappelijk onderzoek op basis van de stand van de kennis van wetenschap en techniek beschikbaar bij VITO op het moment van het onderzoek. Alle intellectuele eigendomsrechten, waaronder het auteursrecht, op dit rapport berusten bij de Vlaamse Instelling voor Technologisch Onderzoek ("VITO"), Boeretang 200, BE-2400 Mol, RPR Turnhout BTW BE 0244.195.916. Dit rapport kan zonder de voorafgaande schriftelijke toestemming van VITO niet geheel of gedeeltelijk worden gereproduceerd of worden gebruikt voor het instellen van claims, voor het voeren van gerechtelijke procedures, voor reclame of antireclame en ten behoeve van werving in meer algemene zin. Tenzij uitdrukkelijk anders bepaald is de informatie zoals verstrekt in dit rapport van vertrouwelijk aard en kan dit rapport, of delen ervan, niet worden verspreid aan derden. In het geval dat reproductie of verspreiding wel is toegestaan, vb. door de vermelding "algemene verspreiding", is bronvermelding verplicht.

met M het molair gewicht van de PFAS (in g/mol). De bekomen $\log(K_d)$ -waarden werden omgezet naar $\log(K_{oc})$ -waarden op basis van het gemiddelde gehalte organische koolstof uit de OVAM-dataset (1,793%) (zie bijlage B). Voor PFAS met een moleculair gewicht lager dan 350 g/mol werd een gewicht van 350 g/mol gehanteerd. Deze methode werd gehanteerd om voor target PFAS waarvoor geen Koc-waarde bekomen kon worden uit de ITRC- of OVAM-datasets een Koc-waarde te schatten (figuur 1).

In een eerste reeks modelsimulaties werd het effect van de verschillende Koc-datasets op de F-LEACH resultaten geëvalueerd. Voor de andere modelsimulaties (zoals de sensitiviteitsanalyse) dient er echter een keuze gemaakt te worden voor één bepaalde set aan Koc-waarden. Hierbij werd gekozen voor de waarden uit de lopende OVAM-studie op basis van de residuconcentraties. Hoewel deze Vlaamse dataset gebaseerd is op een kleiner aantal bodemstalen zijn alle Koc-waarden in deze dataset wel volgens hetzelfde protocol bekomen. Binnen de ITRC dataset zijn soms verschillende bronnen gehanteerd voor verschillende PFAS, waardoor verschillen in Koc-waarden tussen PFAS eventueel ook gedeeltelijk veroorzaakt kunnen zijn door verschillen in het gehanteerde protocol om de Koc-waarde te bepalen. Aangezien dit probleem zich niet voordoet in de OVAM studie heeft deze dataset de voorkeur. Aangezien de Koc-waarden op basis van de residuconcentraties als representatief kunnen beschouwd worden voor de evenwichtssituatie tussen de vloeibare en vaste fase wordt in deze studie de voorkeur gegeven aan de Koc-waarden op basis van de residuconcentraties.



Figuur 1: Overzicht van de Koc-waarden per PFAS parameter. De balkjes geven de range weer tussen de minimale en maximale Koc-waarden uit de ITRC dataset met bodem als matrix (blauw) en uit de dataset van de OVAM-studie op basis van de residu- en eluaatconcentraties (rood). Het diamantje geeft de gemiddelde waarde weer voor deze beide studies. Voor PFAS waarvoor geen Koc-waarden bekomen konden worden uit zowel de ITRC- als OVAM-datasets geeft de groene cirkel de geschatte Koc-waarde weer op basis van het moleculair gewicht.

Algemeen kan uit de literatuurstudie (met uitzondering van de Koc-waarden) geconcludeerd worden dat hoewel er voor alle PFAS voor de benodigde modelparameters de nodige waarden teruggevonden konden worden in de literatuur of geschat konden worden op basis van een statistische relatie, deze voornamelijk gebaseerd zijn op een beperkt aantal bronnen. Bovendien zijn voor vele parameterwaarden slechts één bron beschikbaar, waardoor het niet mogelijk is om te bepalen wat de mate van onzekerheid is op deze waarde en om de sensitiviteit van de relatie tussen atmosferische depositie en bodem- en grondwaterconcentraties voor deze modelparameter te bepalen.

3.2 Relatie PFAS deposities en bodem- en grondwaterconcentraties

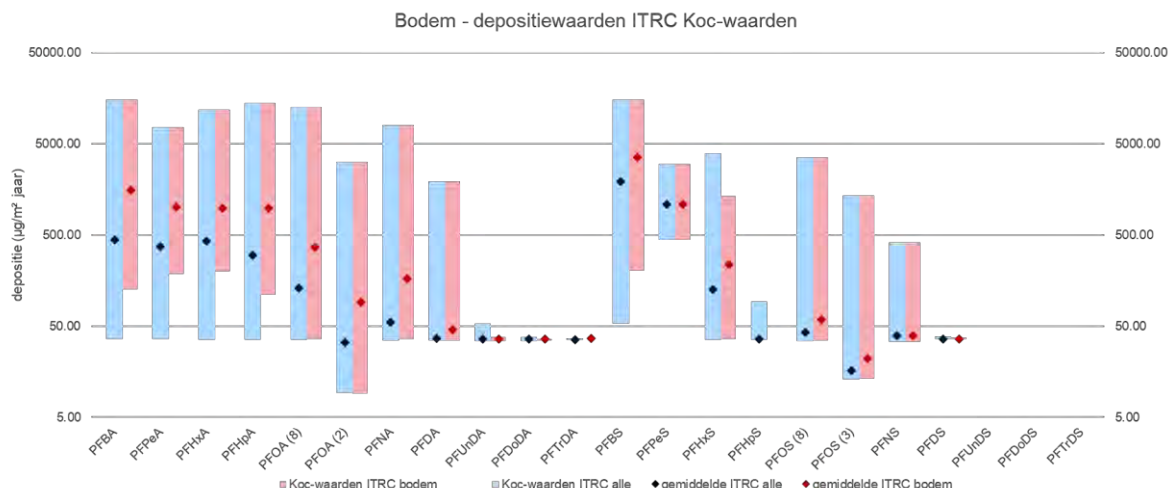
3.2.1 Effect van Koc-waarden op depositiewaarden

De verzamelde beschikbare informatie over Koc-waarden voor de verschillende PFAS vertoont een relatief grote variatie. Aangezien de keuze voor een bepaalde Koc-waarde een groot effect heeft op het uitlooggedrag wordt in een eerste stap een vergelijking gemaakt tussen de verschillende Koc datasets om het effect op de bekomen depositiewaarden te duiden. Voor deze analyse wordt de groep van 20 PFAS uit de EU Drinkwaterrichtlijn gebruikt aangezien voor de meeste van deze PFAS uit zowel de ITRC als OVAM datasets Koc-waarden bekomen konden worden.

3.2.1.1 Koc-waarden ITRC

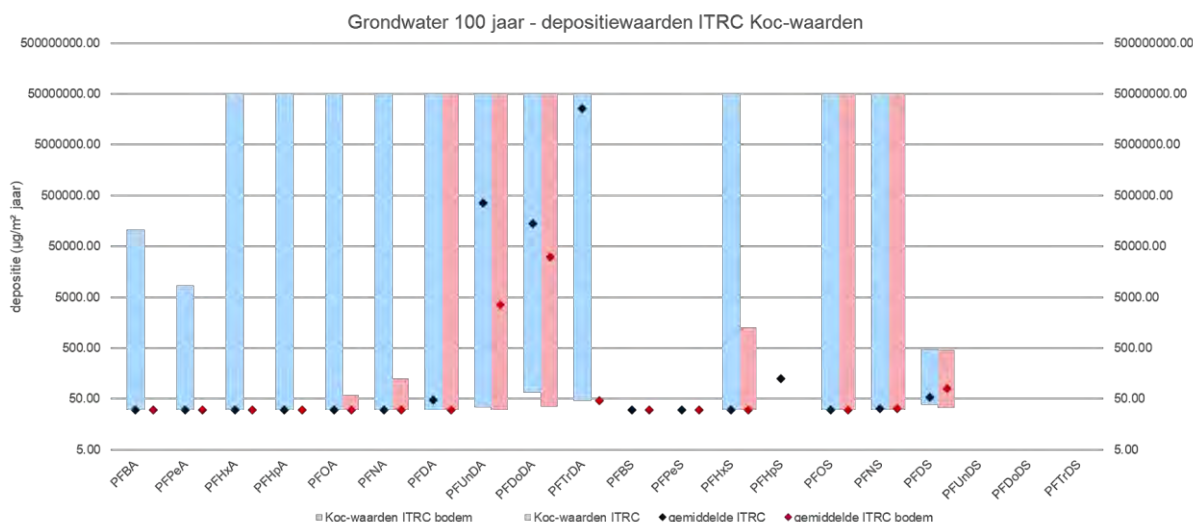
In een eerste reek simulaties werden de Koc-waarden uit de ITRC dataset gebruikt. De F-LEACH simulaties bepalen de maximaal mogelijke atmosferische depositie ($\mu\text{g}/\text{m}^2$ jaar) (hierna depositiewaarde genoemd), waarbij de gekozen toetsingswaarde in bodem ($8 \mu\text{g}/\text{kg}$ droge stof) of grondwater ($100 \text{ ng}/\text{l}$) niet overschreden wordt. Voor PFOA en PFOS worden de depositiewaarden bijkomend bepaald voor de toetsingswaarden van 2 en $3 \mu\text{g}/\text{kg}$ droge stof respectievelijk. Voor deze simulaties wordt per PFAS gebruik gemaakt van de standaardwaarden (zie sectie 2.1.2), waarbij enkel de Koc-waarde gevarieerd wordt. Voor elke PFAS wordt de depositiewaarde bepaald voor de minimale, gemiddelde en maximale Koc-waarde zoals opgelijst in Bijlage B.

Figuur 2 geeft de bekomen depositiewaarden voor bodem weer per PFAS, opgesplitst tussen de simulaties op basis van alle ITRC-waarden en enkel deze bepaald voor bodem als matrix. Hieruit blijkt dat de mogelijke depositie afneemt met toenemende ketenlengte voor zowel carbon- en sulfonzuren. Aangezien de korte keten PFAS relatief sneller uitlogten in vergelijking met de langere ketens zijn hogere depositiewaarden mogelijk voor deze PFAS zonder de toetsingswaarde in bodem te overschrijden. Voor de lange keten PFAS wordt ongeacht de gekozen Koc-waarde quasi dezelfde depositiewaarde bekomen. De hoge Koc-waarden van deze PFAS zorgen voor een zeer beperkte uitloging uit het bodemprofiel, waarbij slechts een beperkte depositie mogelijk is zonder de toetsingswaarde in bodem te overschrijden over een periode van 100 jaar. Daarnaast vertonen de simulaties waarbij enkel de Koc-waarden op basis van bodem als matrix in rekening gebracht werden hogere depositiewaarden in vergelijking met de Koc-waarden voor alle matrices (bodem en sediment), voornamelijk voor korte keten carbonzuren. Dit omwille van de lagere Koc-waarden die een hogere depositie mogelijk maken. Tenslotte blijkt uit figuur 2 dat de depositiewaarden variëren over meerdere grootteordes, afhankelijk van de gekozen Koc-waarde. Deze resultaten tonen aan dat de Koc-waarde een zeer invloedrijke parameter is om het uitlooggedrag van PFAS in bodem te karakteriseren.



Figuur 2: Depositiewaarden ($\mu\text{g}/\text{m}^2$ jaar) per PFAS (logaritmische schaal) waarbij de gehanteerde toetsingswaarde in bodem ($8 \mu\text{g}/\text{kg}$ droge stof) niet overschreden wordt in een tijdspanne van 100 jaar voor verschillende Koc-waarden op basis van de ITRC dataset. Voor PFOA en PFOS worden de depositiewaarden bijkomend bepaald voor de toetsingswaarden van 2 en 3 $\mu\text{g}/\text{kg}$ droge stof respectievelijk. De gekleurde balkjes bevatten de mogelijke range in depositiewaarden tussen de minimale en maximale Koc-waarde. Het diamantje geeft de depositiewaarde die overeenkomt met de gemiddelde Koc-waarde (zie bijlage B). De blauwe balkjes omvatten alle Koc-waarden uit de ITRC dataset. De rode balkjes nemen enkel de observaties in rekening die bepaald werden op bodem als matrix.

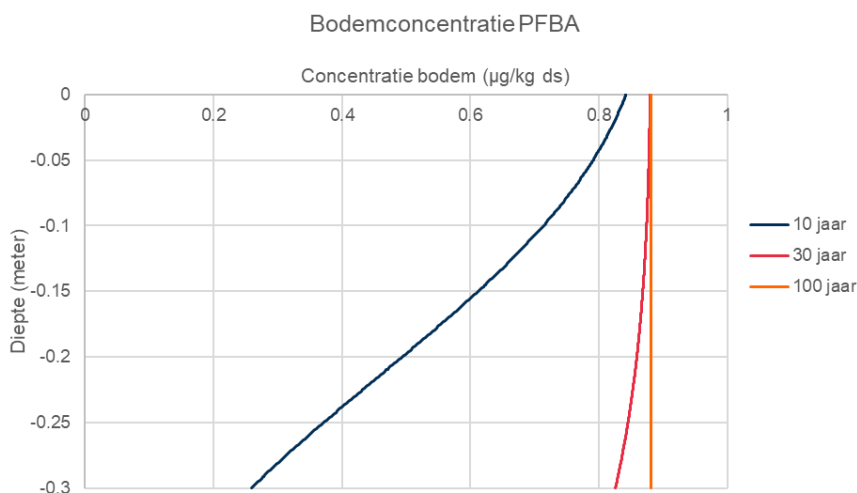
Op basis van dezelfde Koc-waarden kunnen ook depositiewaarden bepaald voor de toetsingswaarde van 100 ng/l in grondwater (figuur 3). Deze resultaten tonen aan dat voor de korte keten PFAS de keuze van de Koc-waarde weinig verschil maakt, tenzij een hoge Koc-waarde gebruikt wordt. Dit kan verklaard worden door het feit dat voor deze PFAS de snelheid van uitloging over een tijdspanne van 100 jaar voldoende is om de concentratie PFAS in het bodemprofiel in evenwicht te brengen met de hoeveelheid atmosferische depositie aan het oppervlak. Daardoor is de hoeveelheid PFAS die het grondwater bereikt gelijk aan de hoeveelheid atmosferische depositie, waardoor de gekozen Koc-waarde voor de bodem geen effect heeft op de hoeveelheid PFAS die het grondwater bereikt. Bijgevolg is de mogelijke depositiewaarde gelijk aan de hoeveelheid PFAS die jaarlijks van het bodemprofiel naar het grondwater kan migreren zonder de toetsingswaarde van 100 ng/l te overschrijden. Voor de gekozen parameterwaarden van het standaardscenario komt dit overeen met een atmosferische depositie van $30,15 \mu\text{g}/\text{m}^2$ jaar.



Figuur 3: Depositiewaarden ($\mu\text{g}/\text{m}^2$ jaar) per PFAS (logaritmische schaal) waarbij de gehanteerde toetsingswaarde in grondwater (100 ng/l) niet overschreden wordt in een tijdsperiode van 100 jaar voor verschillende Koc-waarden op basis van de ITRC dataset. De gekleurde balkjes bevatten de mogelijke range in depositiewaarden tussen de minimale en maximale Koc-waarde. Het diamantje geeft de depositiewaarde die overeenkomt met de gemiddelde Koc-waarde (zie bijlage B). De blauwe balkjes omvatten alle Koc-waarden uit de ITRC dataset. De rode balkjes nemen enkel de observaties in rekening die bepaald werden op bodem als matrix.

Deze dynamiek kan verder verduidelijkt worden aan de hand van de tijdsevolutie van de concentratie van een PFAS-verbinding in de bodem. Figuur 4 geeft deze evolutie weer voor de korte keten PFAS PFBA over een tijdsperiode van 100 jaar. Hieruit blijkt dat na 10 jaar de verhoogde PFAS concentraties zich dicht aan het maaiveld bevinden, terwijl deze concentratie sterk afneemt met de diepte. Na enkele decennia evolueert het profiel naar een gelijke concentratie doorheen de volledige bodemtoplaag, waarbij de uitloging in evenwicht komt met de depositieflux aan het maaiveld.

De lange keten PFAS hebben hogere Koc-waarden, waardoor de uitloging veel trager verloopt. Bijgevolg zijn hogere depositiewaarden mogelijk zonder de toetsingswaarde in grondwater te overschrijden.

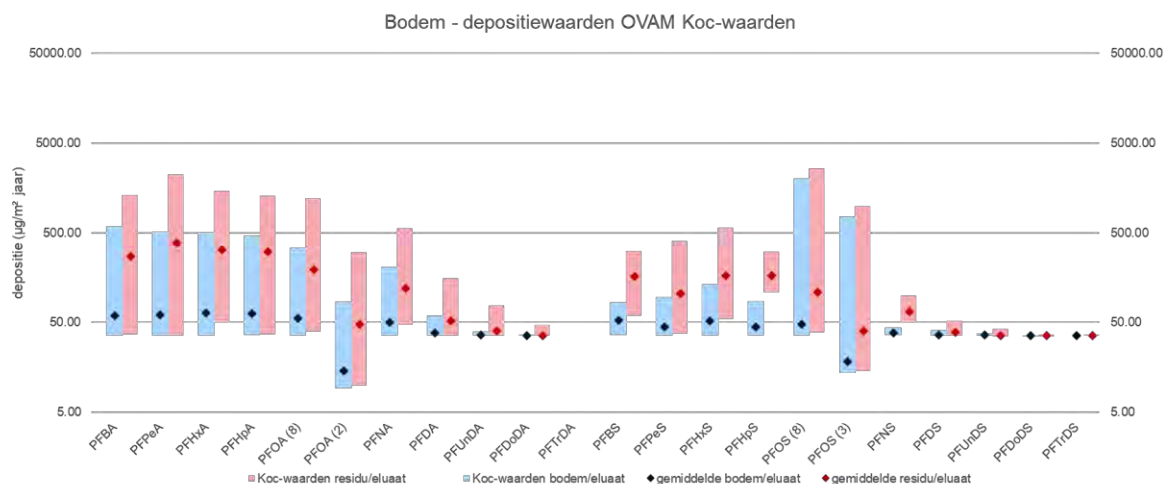


Figuur 4: Diepteprofiel van de concentratie PFBA in de toplaag van de bodem (0 – 30 centimeter onder maaiveld) bij een atmosferische depositie van 30,15 $\mu\text{g}/\text{m}^2$ jaar na simulatieperiodes van 10, 30 en 100 jaar. Deze simulaties maken gebruik van de parameterwaarden voor het standaardscenario.

3.2.1.2 Koc-waarden OVAM studie

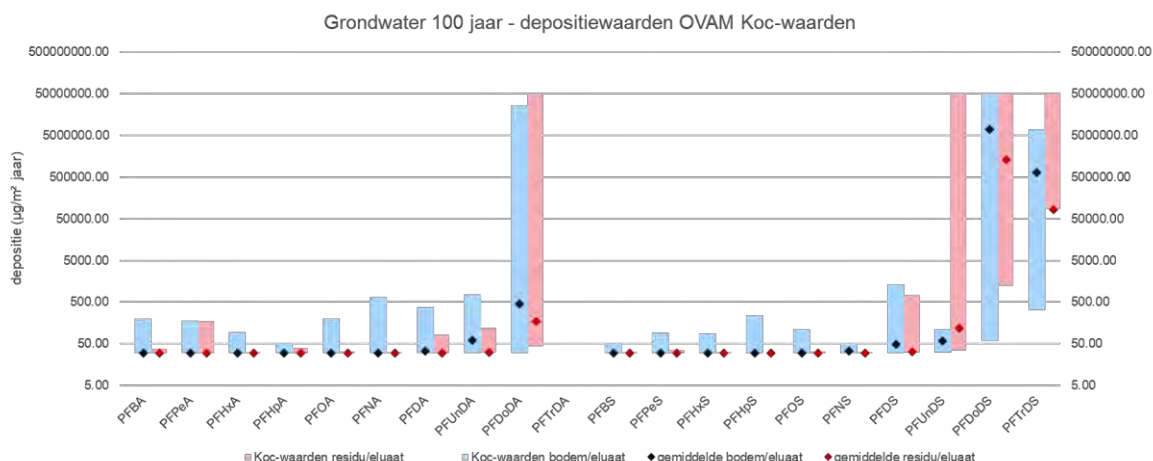
Ook voor de Koc-waarden op basis van de lopende OVAM-studie werd dezelfde analyse gemaakt. Hierbij wordt een onderscheid gemaakt tussen enerzijds de Koc-waarden op basis van de bodem- en eluaatconcentraties en anderzijds op basis van de residu- en eluaatconcentraties. De bekomen depositiewaarden ten opzichte van de toetsingswaarde in bodem (figuur 5) vertonen in grote lijnen dezelfde trends, waarbij hogere depositiewaarden mogelijk zijn voor korte keten PFAS ten opzichte van de langere ketens. Dit effect is minder uitgesproken ten opzichte van de ITRC dataset, voornamelijk voor de sulfonzuren en is eveneens minder aanwezig voor de Koc-waarden op basis van de bodem- en eluaatconcentraties. Voor de lange keten PFAS heeft de gekozen Koc-waarde zeer weinig impact op de bekomen depositiewaarde. Dit omdat de hoge Koc-waarde voor deze PFAS zorgt voor een beperkte uitloging, waardoor slechts een relatief lage depositie mogelijk is zonder de toetsingswaarde te overschrijden.

De depositiewaarden voor de Koc-waarden op basis van de residu- en eluaatconcentraties liggen steeds hoger dan deze voor de Koc-waarden op basis van de bodem- en eluaatconcentraties. Dit omwille van het feit dat de Koc-waarden op basis van de residuconcentratie lager liggen dan deze op basis van de bodemconcentraties (zie eerder). Deze lagere Koc-waarden leiden tot een snellere uitloging van de PFAS in het bodemprofiel, waardoor hogere depositiewaarden mogelijk zijn zonder de toetsingswaarde in bodem te overschrijden.



Figuur 5: Depositiewaarden ($\mu\text{g}/\text{m}^2$ jaar) per PFAS (logaritmische schaal) waarbij de gehanteerde toetsingswaarde in bodem ($8 \mu\text{g}/\text{kg}$ droge stof) net niet overschreden wordt in een tijdsperiode van 100 jaar voor verschillende Koc-waarden op basis van de dataset uit de lopende OVAM studie. Voor PFOA en PFOS worden de depositiewaarden bijkomend bepaald voor de toetsingswaarden van 2 en $3 \mu\text{g}/\text{kg}$ droge stof respectievelijk. De gekleurde balkjes bevatten de mogelijke range in depositiewaarden tussen de minimale en maximale Koc-waarde. Het diamantje geeft de depositiewaarde die overeenkomt met de gemiddelde Koc-waarde (zie bijlage B). De blauwe balkjes omvatten de Koc-waarden op basis van de bodem- en eluaatconcentraties. De rode balkjes omvatten de Koc-waarden op basis van de residu- en eluaatconcentraties.

Net als voor de simulaties op basis van de ITRC data vertonen de depositiewaarden ten opzichte van de toetsingswaarde in grondwater een spiegelbeeld in vergelijking met de toetsing in bodem (figuur 6). Voor PFAS met een ketenlengte van tien koolstofatomen of lager heeft de gekozen Koc-waarde een zeer beperkt effect op de depositiewaarden. Enkel voor de lange keten PFAS van elf koolstofatomen of meer zal de keuze van een bepaalde Koc-waarde sterk bepalen in welke mate de PFAS die aan het bodemoppervlak afgezet wordt het grondwater kan bereiken over een tijdsperiode van 100 jaar. Daardoor is er een grote variatie in mogelijke depositiewaarden zonder de toetsingswaarde te overschrijden. Voor de hoogste Koc-waarden zijn extreem hoge depositiewaarden mogelijk omwille van het feit dat de uitloging zo traag verloopt dat de PFAS het grondwater niet of nauwelijks bereiken. Voor deze situaties kan aangenomen worden dat indien de simulatie een langere tijdsperiode beschouwt (bv. 500 jaar in plaats van 100 jaar), deze zeer hoge depositiewaarden niet meer mogelijk zijn zonder de toetsingswaarde in grondwater te overschrijden. Dit omdat de zeer hoge Koc-waarden de uitloging naar het grondwater sterk vertragen, maar niet voorkomen.



Figuur 6: Depositiewaarden ($\mu\text{g}/\text{m}^2$ jaar) per PFAS (logaritmische schaal) waarbij de gehanteerde toetsingswaarde in grondwater (100 ng/l) niet overschreden wordt in een tijdspanne van 100 jaar voor verschillende Koc-waarden op basis van de dataset uit de lopende OVAM studie. De gekleurde balkjes bevatten de mogelijke range in depositiewaarden tussen de minimale en maximale Koc-waarde. Het diamantje geeft de depositiewaarde die overeenkomt met de gemiddelde Koc-waarde (zie bijlage B). De blauwe balkjes omvatten de Koc-waarden op basis van de bodem- en eluaatconcentraties. De rode balkjes omvatten de Koc-waarden op basis van de residu- en eluaatconcentraties.

3.2.2 Maximale depositie in bodem en grondwater op basis van best estimate Koc-waarden voor target PFAS

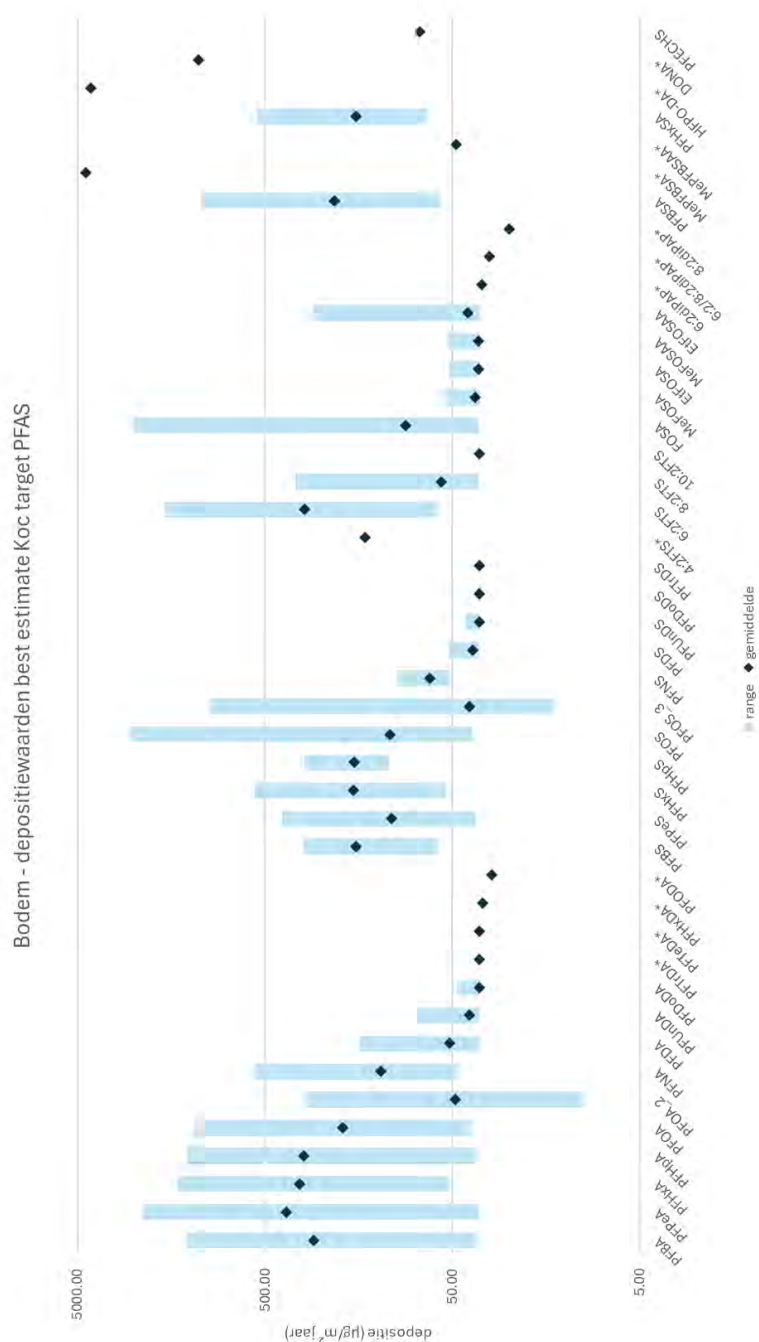
Voorgaande analyses werden uitgevoerd voor de 20 PFAS uit de Drinkwaterrichtlijn, waarvoor over het algemeen robuuste waarden voor de modelparameters gevonden kunnen worden in zowel de ITRC als OVAM datasets. Anderzijds bestaat de lijst met target PFAS zoals opgenomen in de CMA/3/D-procedure voor PFAS-analyse in bodem en de WAC/IV/A/025-procedure voor PFAS-analyse in grondwater uit 42 verschillende PFAS. Voor al deze 42 PFAS zouden maximale depositiewaarden bepaald kunnen worden indien de nodige parameterwaarden in de wetenschappelijke literatuur gevonden kunnen worden. Op basis van de literatuur konden voor alle 42 PFAS waarden voor de oplosbaarheid en Henry-coëfficiënt bekomen worden (zie bijlage A). Voor de Koc-waarden werd maximaal gebruik gemaakt van de Koc-waarden uit de lopende OVAM-studie op basis van de residu- en eluaatconcentraties. Zoals geargumenteed in sectie 3.1.1 kan deze dataset als meest geschikt beschouwd worden uitlogingsmodellering in een Vlaamse setting. Echter, voor de 12 PFAS waarvoor in deze dataset geen waarden beschikbaar zijn, wordt de Koc-waarde geschat op basis van het molecuulair gewicht zoals beschreven in sectie 3.1.1.

Op basis van deze gegevens werd voor alle target PFAS de maximaal mogelijke depositie bepaald zonder de toetsingswaarden in bodem of grondwater te overschrijden, analoog aan de hierboven beschreven analyses. Figuur 7 geeft deze resultaten weer voor bodem, waarbij de bekomen waarden voor de 20 PFAS uit de Drinkwaterrichtlijn identiek zijn aan de waarden uit figuur 5. De resultaten voor de bijkomende PFAS bevestigen het eerder beschreven sterke verband met de ketenlengte, waarbij de laagste maximale depositiewaarden bekomen worden voor de zeer lange keten carbonzuren (bv. PFHxDA, PFODA) en de diPAP-familie. De laagste depositiewaarde van 24,80 $\mu\text{g}/\text{m}^2$ jaar wordt bekomen voor 8:2 diPAP, die omwille van de

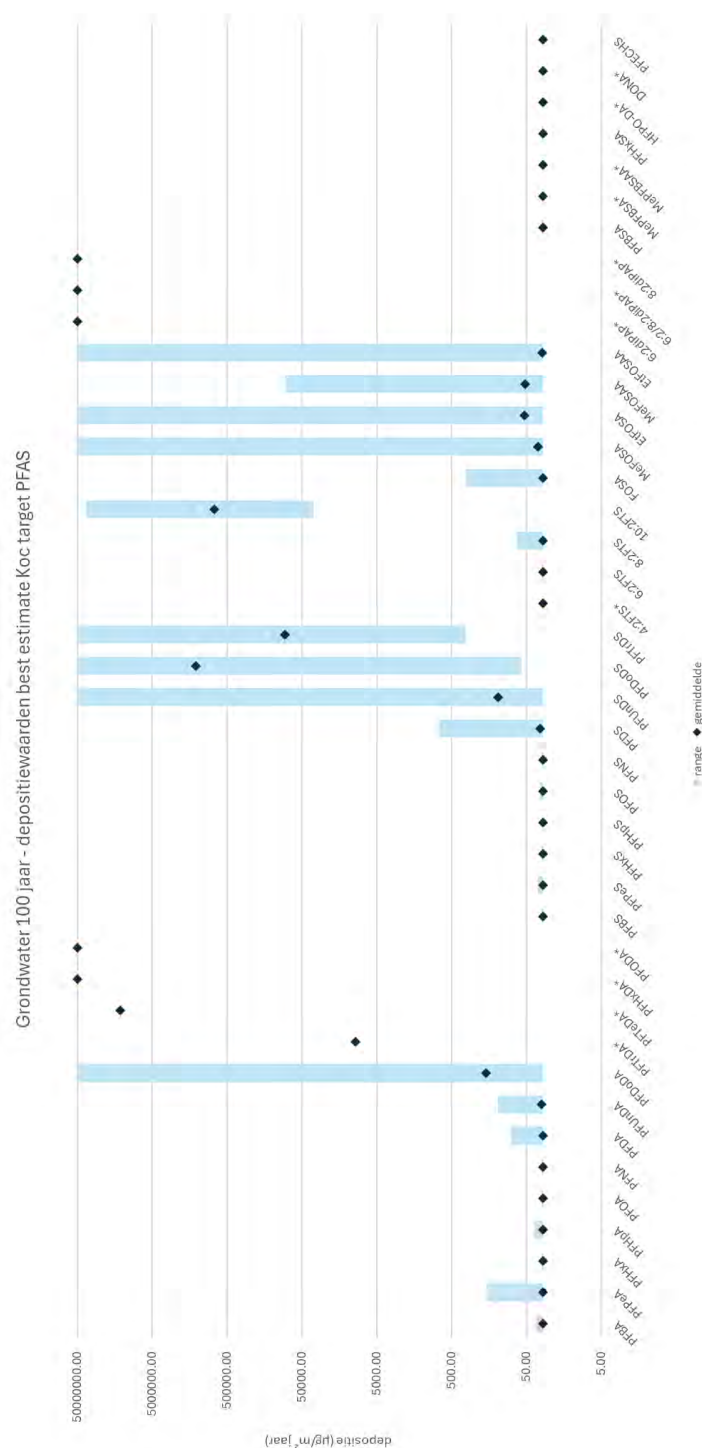
zeer hoge Koc-waarde quasi geen uitlooggedrag vertoont. Hierbij dient opgemerkt te worden dat deze Koc-waarde geschat werd op basis van het moleculaire gewicht en dus eventueel als minder robuust kan beschouwd worden dan de Koc-waarden op basis van schudproeven. Het omgekeerde kan geobserveerd worden voor MePFBSA en HFPO-DA, waarbij het lage moleculaire gewicht resulteert in een lage geschatte Koc-waarde. Hierdoor treedt zeer snelle uitloging op waardoor hoge depositiewaarden tot meer dan 4000 $\mu\text{g}/\text{m}^2$ jaar mogelijk zijn zonder de toetsingswaarde van 8 $\mu\text{g}/\text{kg}$ droge stof in bodem te overschrijden.

De resultaten voor het grondwater met een simulatieperiode van 100 jaar geven aan dat voor de overgrote meerderheid van PFAS de maximale depositiewaarde naar de ondergrens van 30,15 $\mu\text{g}/\text{m}^2$ jaar evolueert naar het einde van simulatieperiode toe (figuur 8). Enkel voor de lange keten carbonzuren, diPAPs en in mindere mate de lange keten sulfonzuren en FASA-familie worden hogere depositiewaarden bekomen omdat de uitloging van deze PFAS doorheen het bodemprofiel nog niet in evenwicht is met de influx in het grondwater. Voor de PFAS met de laagste Koc-waarden worden zo onrealistisch hoge depositiewaarden bekomen zonder de toetsingswaarde in het grondwater te overschrijden.

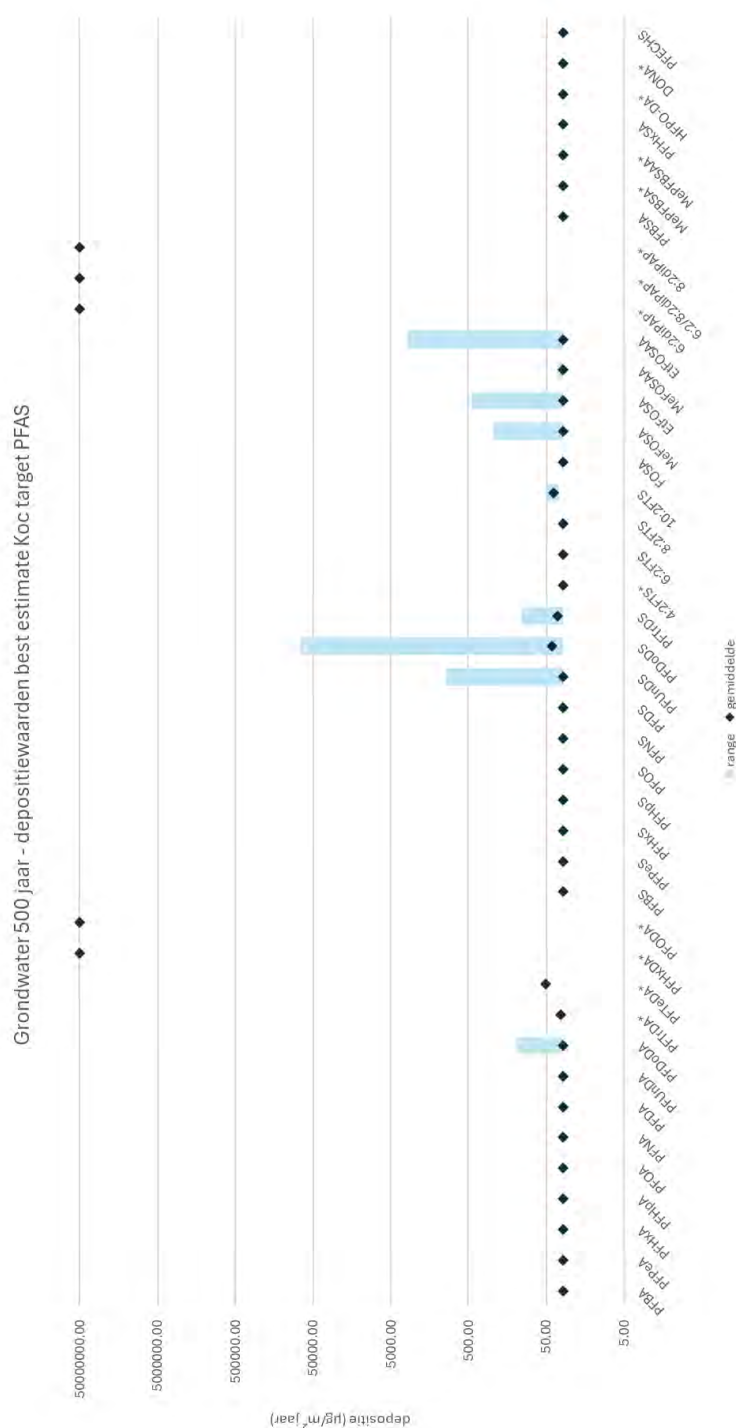
Indien de simulatieperiode verlengd wordt naar 500 jaar wordt dit beeld versterkt, waarbij voor de simulaties met een gemiddelde Koc-waarde enkel voor de lange keten carbon- en sulfonzuren, de diPAPs en 10:2 FTS de maximale depositiewaarde hoger ligt dan 30,15 $\mu\text{g}/\text{m}^2$ jaar (figuur 9). Voor 5 PFAS (langste keten carbonzuren en diPAPs) bedraagt de maximale depositiewaarde nog steeds een onrealistisch hoge waarde omdat deze PFAS door de zeer hoge Koc-waarden zich nog steeds quasi uitsluitend in het bodemprofiel bevinden.



*Figuur 7: Depositiewaarden ($\mu\text{g}/\text{m}^2$ jaar) per PFAS (logaritmische schaal) waarbij de gehanteerde toetsingswaarde in bodem ($8 \mu\text{g}/\text{kg}$ droge stof) net niet overschreden wordt in een tijdsperiode van 100 jaar met de Koc-waarden uit de lopende OVAM studie op basis van de residu- en eluaatconcentraties. Voor de PFAS aangeduid met een * bevat deze dataset geen Koc-waarden en werd deze geschat op basis van het moleculair gewicht (zie sectie 3.1.1). Voor PFOA en PFOS worden de depositiewaarden bijkomend bepaald voor de toetsingswaarden van 2 en $3 \mu\text{g}/\text{kg}$ droge stof respectievelijk. De gekleurde balkjes bevatten de mogelijke range in depositiewaarden tussen de minimale en maximale Koc-waarde. Het diamantje geeft de depositiewaarde die overeenkomt met de gemiddelde Koc-waarde (zie bijlage B).*



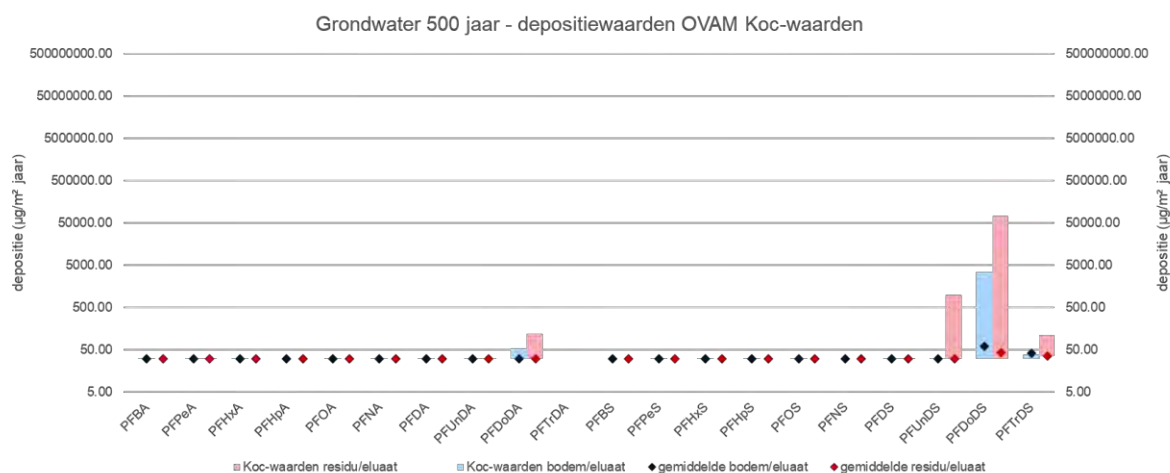
*Figuur 8: Depositiewaarden ($\mu\text{g}/\text{m}^2$ jaar) per PFAS (logaritmische schaal) waarbij de gehanteerde toetsingswaarde in grondwater (100 ng/l) niet overschreden wordt in een tijdsperiode van 100 jaar met de Koc-waarden uit de lopende OVAM studie op basis van de residu- en eluaatconcentraties. Voor de PFAS aangeduid met een * bevat deze dataset geen Koc-waarden en werd deze geschat op basis van het moleculair gewicht (zie sectie 3.1.1). De gekleurde balkjes bevatten de mogelijke range in depositiewaarden tussen de minimale en maximale Koc-waarde. Het diamantje geeft de depositiewaarde die overeenkomt met de gemiddelde Koc-waarde (zie bijlage B).*



Figuur 9: Depositiewaarden ($\mu\text{g}/\text{m}^2$ jaar) per PFAS (logaritmische schaal) waarbij de gehanteerde toetsingswaarde in grondwater (100 ng/l) niet overschreden wordt in een tijdspanne van 500 jaar met de Koc-waarden uit de lopende OVAM studie op basis van de residu- en eluaatconcentraties. Voor de PFAS aangeduid met een * bevat deze dataset geen Koc-waarden en werd deze geschat op basis van het moleculair gewicht (zie sectie 3.1.1). De gekleurde balkjes bevatten de mogelijke range in depositiewaarden tussen de minimale en maximale Koc-waarde. Het diamantje geeft de depositiewaarde die overeenkomt met de gemiddelde Koc-waarde (zie bijlage B).

3.2.3 Effect van gesimuleerde periode op depositiewaarden

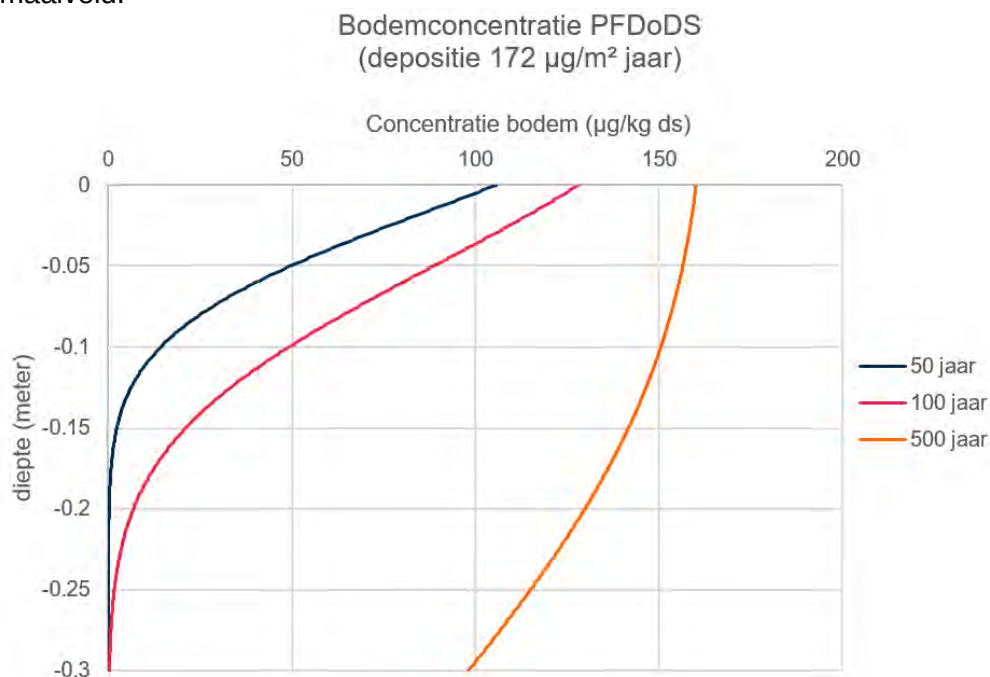
Uit voorgaande analyses blijkt dat voor de lange keten PFAS (voornamelijk vanaf ketenlengtes van 10 koolstofatomen of meer) hogere depositiewaarden mogelijk zijn omdat omwille van de hoge Koc-waarden de uitlogende PFAS het grondwater nog niet of in beperkte mate bereikt in een tijdsperiode van 100 jaar. De vraag kan dus gesteld worden wat het effect zou zijn op de bekomen depositiewaarden indien de gesimuleerde tijdsperiode verlengd zou worden. Bijgevolg werden de simulaties uit de 3.2.1 die gebruik maken van de Vlaamse Koc-waarden uit de lopende OVAM studie herhaald voor grondwater, maar met een gesimuleerde tijdsperiode van 500 jaar in plaats van 100 jaar. Figuur 10 geeft de bekomen depositiewaarden weer bij toetsing aan de waarde van 100 ng/l voor grondwater. Uit deze figuur blijkt dat voor het merendeel van de geëvalueerde PFAS, de depositiewaarde 30,15 $\mu\text{g}/\text{m}^2$ jaar bedraagt voor de gekozen parameterwaarden van het standaardscenario, maar ongeacht de gekozen Koc-waarde. Aangezien de PFAS concentratie in het bodemprofiel in evenwicht is met de atmosferische depositie, is de depositiewaarde gelijk aan de flux naar het grondwater aan de onderzijde van de onverzadigde zone. Voor de lange keten PFAS is er een duidelijk verschil merkbaar tussen de simulaties met een tijdsperiode van 100 jaar (figuur 6) en deze met een tijdsperiode van 500 jaar (figuur 10). Waar bij een periode van 100 jaar de lange keten PFAS nog hoge depositiewaarden mogelijk waren zonder de toetsingswaarde van 100 ng/l in grondwater te overschrijden is dit amper het geval bij een simulatieperiode van 500 jaar. Enkel voor de hoogste Koc-waarden voor enkele lange keten sulfonzuren (PFUnDS en PFDoDS) zijn nog depositiewaarden boven de 500 $\mu\text{g}/\text{m}^2$ jaar mogelijk.



Figuur 10: Depositiewaarden ($\mu\text{g}/\text{m}^2$ jaar) per PFAS (logaritmische schaal) waarbij de gehanteerde toetsingswaarde in grondwater (100 ng/l) net niet overschreden wordt in een tijdsperiode van 500 jaar voor verschillende Koc-waarden op basis van de dataset uit de lopende OVAM studie. De gekleurde balkjes bevatten de mogelijke range in depositiewaarden tussen de minimale en maximale Koc-waarde. Het diamantje geeft de depositiewaarde die overeenkomt met de gemiddelde Koc-waarde (zie bijlage B). De blauwe balkjes omvatten de Koc-waarden op basis van de bodem- en eluaatconcentraties. De rode balkjes omvatten de Koc-waarden op basis van de residu- en eluaatconcentraties.

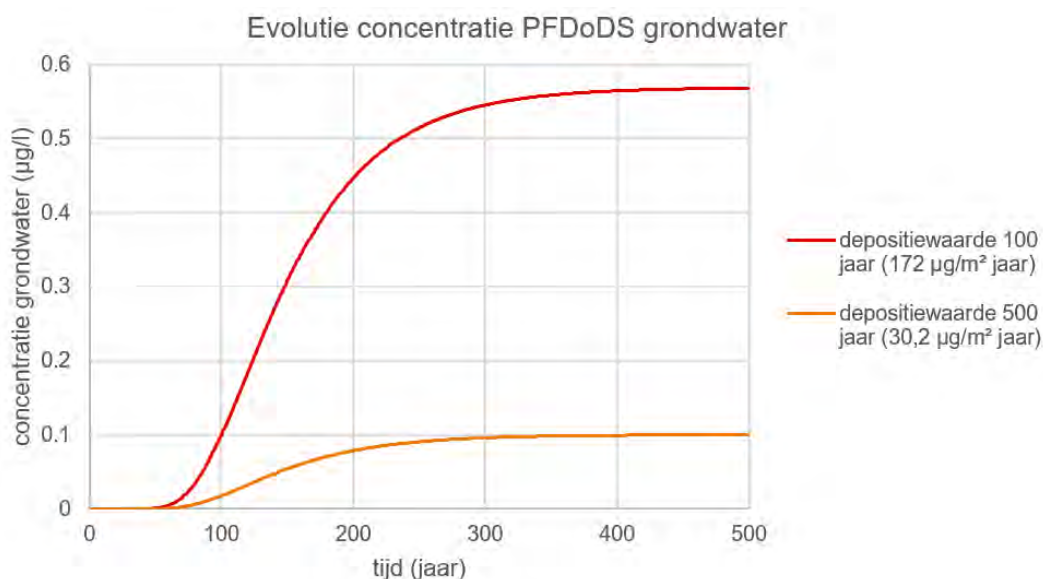
Het effect van de gekozen simulatieperiode kan nog duidelijker gedemonstreerd worden aan de hand van een voorbeeld voor één specifieke PFAS. Hiervoor werden F-LEACH simulaties uitgevoerd voor het lange keten sulfonzuur PFDoDS over tijdsperiodes van 100 en 500 jaar voor vergelijking met de toetsingswaarde voor grondwater en met de gemiddelde Koc-waarde

uit de Vlaamse dataset op basis van de residu- en eluaatconcentraties. Figuur 11 geeft de evolutie van de PFD_oDS concentratie weer in het bodemprofiel na simulatieperiodes van 50, 100 en 500 jaar voor een constante depositie van 172 µg/m² jaar. Na 50 en 100 jaar bevindt de PFAS zich nog voornamelijk in de bovenste 10 centimeter van het bodemprofiel doordat de hoge Koc-waarde een uitloging naar de diepere lagen en grondwater afremt. Na een simulatieperiode van 500 jaar is de concentratie in de bodemtoplaag toegenomen tot meer dan 150 µg/kg droge stof aan het maaiveld, maar ook dieper in het bodemprofiel. Na 500 jaar is de concentratie in het bodemprofiel echter nog steeds niet in evenwicht met de depositie aan het maaiveld.



Figuur 11: Diepteprofiel van de concentratie PFD_oDS in de toplaag van de bodem (0 – 30 centimeter onder maaiveld) bij een atmosferische depositie van 172 µg/m² jaar na simulatieperiodes van 50, 100 en 500 jaar. Deze simulaties maken gebruik van de parameterwaarden voor het standaardscenario en gebruiken de gemiddelde Koc-waarde uit de Vlaamse dataset van de lopende OVAM studie op basis van de residu- en eluaatconcentraties.

Voor bovenstaande simulatie kan eveneens gekeken worden naar de evolutie van de PFD_oDS concentratie in het grondwater over een tijdsperiode van 500 jaar (figuur 12). Voor de depositiewaarde van 172 µg/m² jaar blijft de PFD_oDS concentratie net onder de toetsingswaarde van 100 ng/l voor grondwater binnen een tijdsperiode van 100 jaar. Indien de gesimuleerde tijdsperiode echter verlengd wordt naar 500 jaar blijkt dat de concentratie in het grondwater nog sterk doorstijgt tot meer dan 500 ng/l. Indien de grondwaterconcentratie ook over een tijdsperiode van 500 jaar onder de toetsingswaarde van 100 ng/l dient te blijven daalt de maximaal mogelijke depositiewaarde naar 30,15 µg/m² jaar (oranje curve op de figuur). Hierbij dient vermeld te worden dat dit effect van de simulatietijd enkel een effect heeft op de bekomen depositiewaarden bij de lange keten PFAS. Voor de korte keten PFAS is 100 jaar voldoende om tot een evenwichtssituatie te komen en ook voor langere periodes onder de toetsingswaarde te blijven.



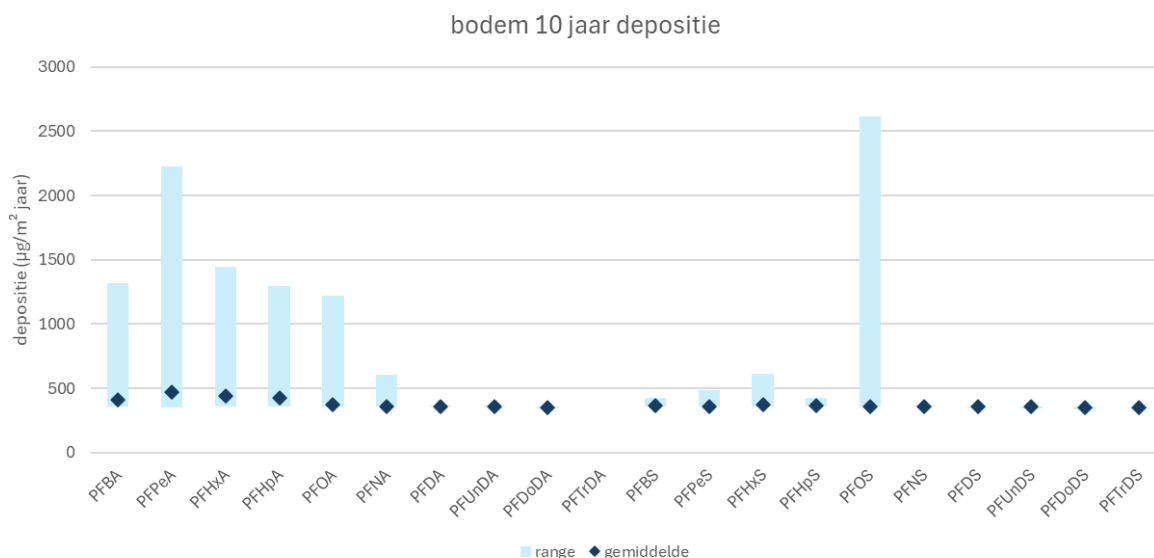
Figuur 12: Tijdsevolutie (tot 500 jaar) van de concentratie PFD0DS in het grondwater bij een atmosferische depositie van 172 en 30,15 µg/m² jaar. Deze simulaties maken gebruik van de parameterwaarden voor het standaardscenario en gebruiken de gemiddelde Koc-waarde uit de Vlaamse dataset van de lopende OVAM studie op basis van de residu- en eluaatconcentraties.

3.2.4 Effect van de duur van PFAS depositie op depositiewaarden

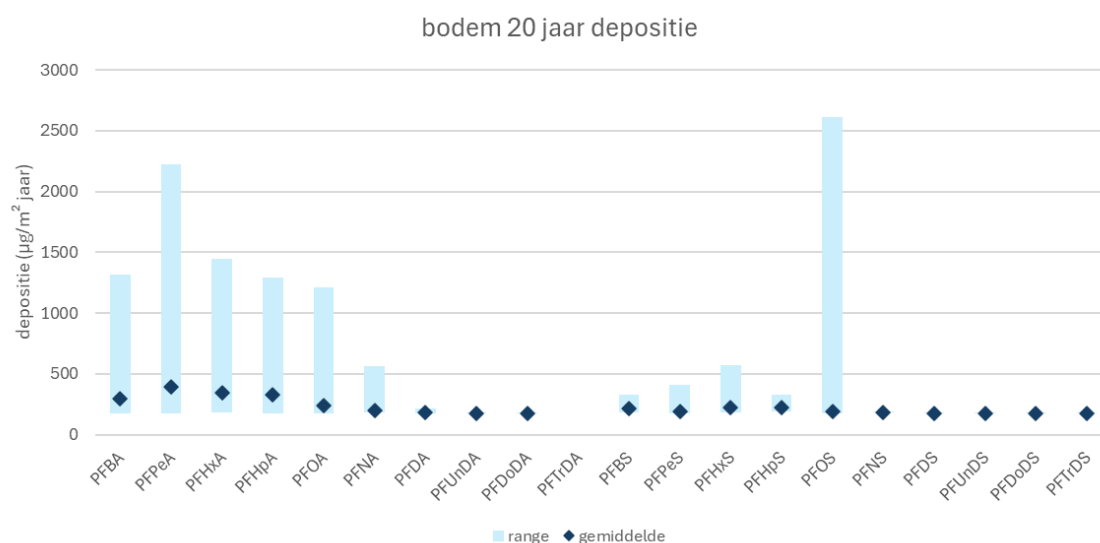
Alle voorgaande modelsimulaties werden uitgevoerd onder de assumptie dat de PFAS depositie constant is gedurende de volledige simulatieperiode. Daarnaast is het eveneens mogelijk om te evalueren hoe de maximale depositiewaarde verandert indien er slechts gedurende een relatief korte periode van bijvoorbeeld 10 of 20 jaar atmosferische depositie van PFAS plaatsvindt, waarna de atmosferische depositie wegvalt tot het einde van de simulatieperiode van 100 jaar. Hierbij wordt het criterium gehanteerd dat de concentratie de toetsingswaarde gedurende de volledige simulatieperiode van 100 jaar niet mag overschrijden. Deze analyse werd net als de vergelijking tussen de verschillende Koc-datasets uitgevoerd voor de carbon- en sulfonzuren waarvoor Koc-waarden beschikbaar zijn uit de dataset van de lopende OVAM-studie.

De resultaten voor bodem met een depositieperiode van 10 jaar tonen een gelijkaardige maximale depositie van iets minder dan 500 µg/m² jaar voor de korte keten PFAS tot ongeveer 350 µg/m² jaar voor de lange keten PFAS indien een gemiddelde Koc-waarde gehanteerd wordt (figuur 13). Deze waarden zijn beduidend hoger dan de depositiewaarden voor een depositieperiode van 100 jaar (figuur 5). Aangezien de PFAS depositie zich over een kortere tijdsperiode afspeelt is een hogere depositie mogelijk zonder de toetsingswaarde in de bodem te overschrijden.

Indien de periode van depositie verlengd wordt naar 20 jaar wordt het verschil in depositiewaarden tussen de korte en lange keten PFAS groter, waarbij de depositiewaarden voor een gemiddelde Koc-waarde lager ligt dan bij een depositieperiode van 10 jaar (figuur 14). Gezien de snelle uitloging van de korte ketens is voor deze PFAS een hogere depositie mogelijk zonder de toetsingswaarde te overschrijden, zelfs als de depositieperiode slechts 20 jaar duurt.

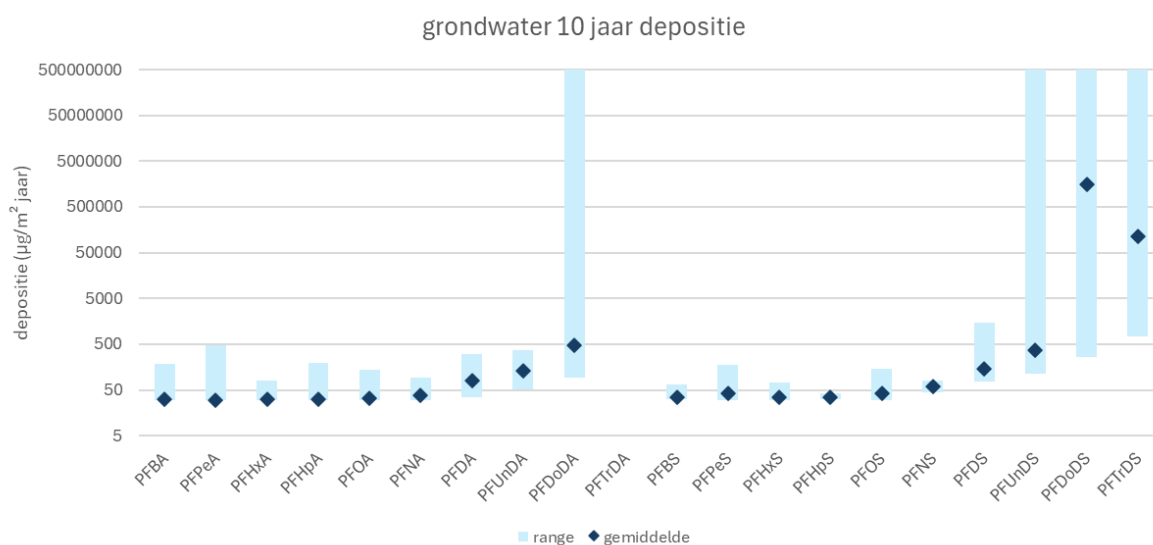


Figuur 13: Depositiewaarden ($\mu\text{g}/\text{m}^2$ jaar) per PFAS waarbij de gehanteerde toetsingswaarde in bodem ($8 \mu\text{g}/\text{kg}$ droge stof) niet overschreden wordt in een tijdsperiode van 100 jaar met de Koc-waarden uit de lopende OVAM studie op basis van de residu- en eluaatconcentraties. Voor PFTtDA werd de Koc-waarde geschat op basis van het moleculair gewicht (zie sectie 3.1.1). Enkel gedurende de eerste 10 jaar van de simulatie vindt er depositie van PFAS plaats. De gekleurde balkjes bevatten de mogelijke range in depositiewaarden tussen de minimale en maximale Koc-waarde. Het diamantje geeft de depositiewaarde die overeenkomt met de gemiddelde Koc-waarde (zie bijlage B).

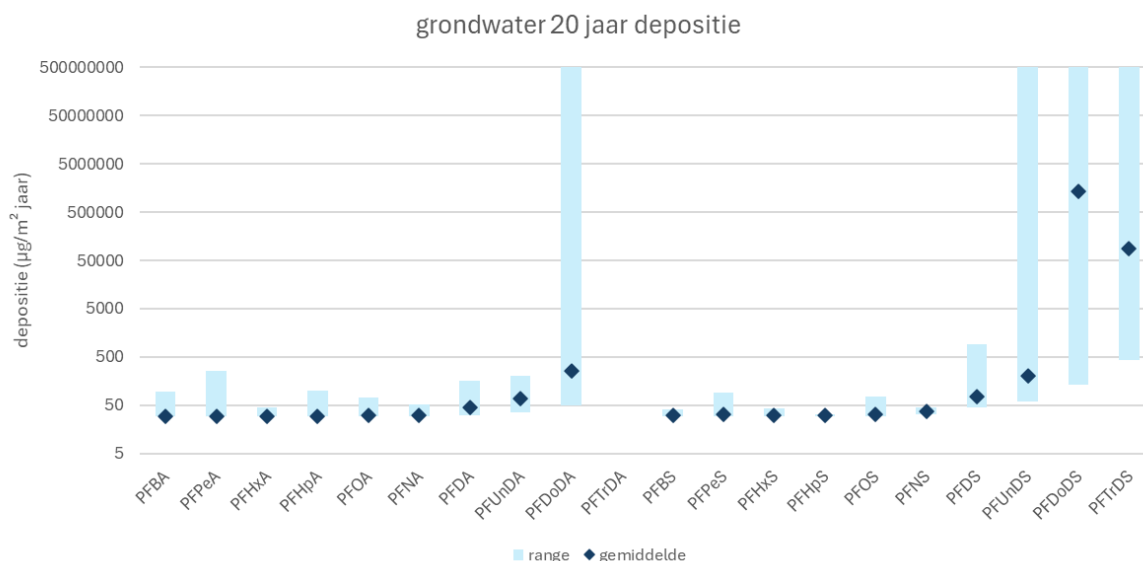


Figuur 14: Depositiewaarden ($\mu\text{g}/\text{m}^2$ jaar) per PFAS waarbij de gehanteerde toetsingswaarde in bodem ($8 \mu\text{g}/\text{kg}$ droge stof) niet overschreden wordt in een tijdsperiode van 100 jaar met de Koc-waarden uit de lopende OVAM studie op basis van de residu- en eluaatconcentraties. Voor PFTtDA werd de Koc-waarde geschat op basis van het moleculair gewicht (zie sectie 3.1.1). Enkel gedurende de eerste 20 jaar van de simulatie vindt er depositie van PFAS plaats. De gekleurde balkjes bevatten de mogelijke range in depositiewaarden tussen de minimale en maximale Koc-waarde. Het diamantje geeft de depositiewaarde die overeenkomt met de gemiddelde Koc-waarde (zie bijlage B).

Voor grondwater zijn de bekomen depositiewaarden in zekere mate vergelijkbaar met de waarden zoals bekomen voor een depositieperiode van 100 jaar (figuur 6, figuur 15, figuur 16), al zijn de maximale depositiewaarden iets hoger voor kortere depositieperiodes. Dit kan verklaard worden door het feit dat ondanks een kortere depositieperiode een zekere piek in PFAS concentraties in het bodemprofiel ontstaan is, die naar het grondwater zal migreren. De snelheid van deze migratie wordt bepaald door de Koc-waarde, maar deze uitlopende piek zal tot een verhoging van de PFAS-concentraties in het grondwater leiden, ook wanneer de depositie aan het maaiveld reeds weggevallen is. Voor de lange keten PFAS worden afhankelijk van de gekozen Koc-waarde onrealistisch hoge depositiewaarden bekomen. Dit omwille van het feit dat door de zeer hoge Koc-waarden, de PFAS het grondwater nog quasi niet bereikt hebben binnen de simulatieperiode van 100 jaar.



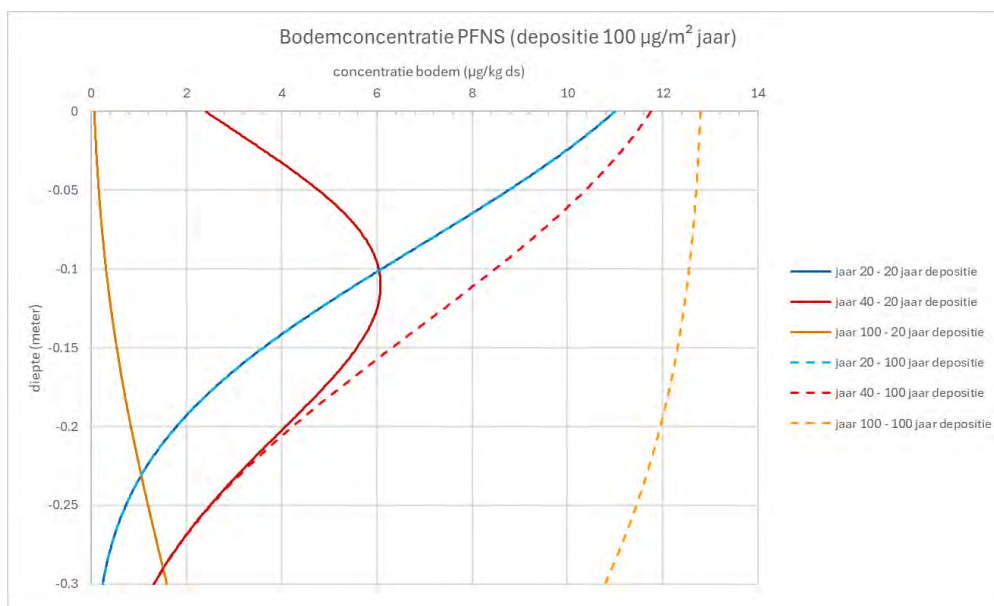
Figuur 15: Depositiewaarden ($\mu\text{g}/\text{m}^2$ jaar) per PFAS (logaritmische schaal) waarbij de gehanteerde toetsingswaarde in grondwater (100 ng/l) niet overschreden wordt in een tijdsperiode van 100 jaar met de Koc-waarden uit de lopende OVAM studie op basis van de residu- en eluaatconcentraties. Voor PFTTrDA werd de Koc-waarde geschat op basis van het moleculair gewicht (zie sectie 3.1.1). Enkel gedurende de eerste 10 jaar van de simulatie vindt er depositie van PFAS plaats. De gekleurde balkjes bevatten de mogelijke range in depositiewaarden tussen de minimale en maximale Koc-waarde. Het diamantje geeft de depositiewaarde die overeenkomt met de gemiddelde Koc-waarde (zie bijlage B).



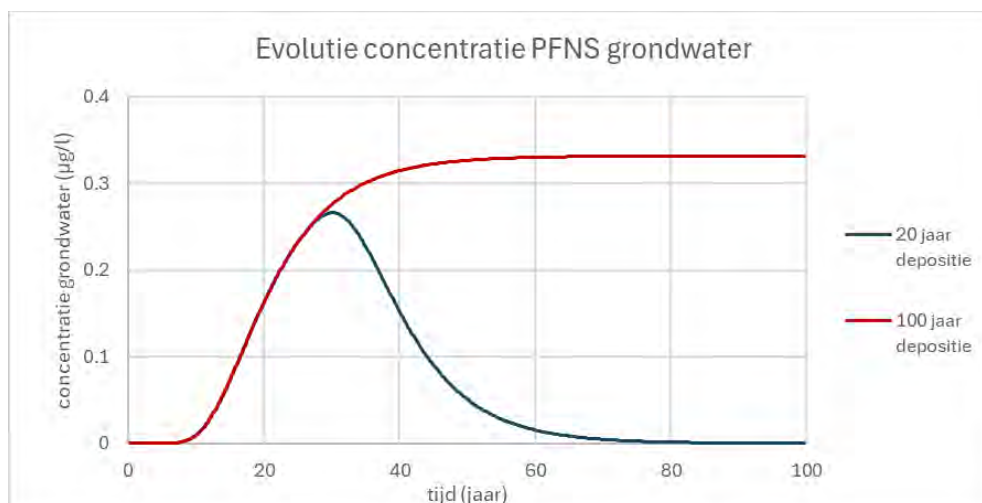
Figuur 16: Depositiewaarden ($\mu\text{g}/\text{m}^2$ jaar) per PFAS (logaritmische schaal) waarbij de gehanteerde toetsingswaarde in bodem ($8 \mu\text{g}/\text{kg}$ droge stof) niet overschreden wordt in een tijdsperiode van 100 jaar met de Koc-waarden uit de lopende OVAM studie op basis van de residu- en eluaatconcentraties. Voor PFTtDA werd de Koc-waarde geschat op basis van het moleculair gewicht (zie sectie 3.1.1). Enkel gedurende de eerste 20 jaar van de simulatie vindt er depositie van PFAS plaats. De gekleurde balkjes bevatten de mogelijke range in depositiewaarden tussen de minimale en maximale Koc-waarde. Het diamantje geeft de depositiewaarde die overeenkomt met de gemiddelde Koc-waarde (zie bijlage B).

Om het effect van een verkorte depositieperiode te verduidelijken wordt een voorbeeld gegeven van twee situaties waarbij atmosferische depositie van $100 \mu\text{g}/\text{m}^2$ jaar PFNS plaatsvindt aan het maaiveld, gedurende periodes van enerzijds 20 jaar (scenario 1) en anderzijds 100 jaar (scenario 2). Na 20 jaar zijn de bodemconcentraties in de bodem onder beide situaties logischerwijs identiek (blauwe curves figuur 17). Ook in het tijdsverloop van de PFNS-concentratie in het grondwater (figuur 18) is er na 20 jaar nog geen verschil tussen de scenario's zichtbaar. Aangezien in scenario 1 de atmosferische depositie hierna stopt is er na 40 jaar simulatietijd al een duidelijke daling in de PFNS-concentratie in het bodemprofiel zichtbaar. In scenario 2 gaat de depositie door en stijgt de PFNS-concentraties over het volledige bodemprofiel in vergelijking met de blauwe curve. In het grondwater wordt het verschil tussen beide scenario's na ongeveer 30 jaar zichtbaar, waarbij de concentratie duidelijk afneemt in scenario 1 en doorstijgt in scenario 2.

Na 100 jaar simulatieperiode is de PFNS-concentratie in de bodem zeer sterk afgenomen in scenario 1, waarbij de concentraties nog langzaam hoger worden met de diepte in het bodemprofiel. In scenario 2 vindt nog steeds atmosferische depositie plaats en ligt de gemiddelde bodemconcentratie ongeveer een grootteorde hoger. In het grondwater is de PFNS-concentratie in scenario 1 zeer sterk teruggevallen naar lage concentraties. In scenario 2 heeft de PFNS-concentratie een evenwicht bereikt van $0,33 \mu\text{g}/\text{l}$.



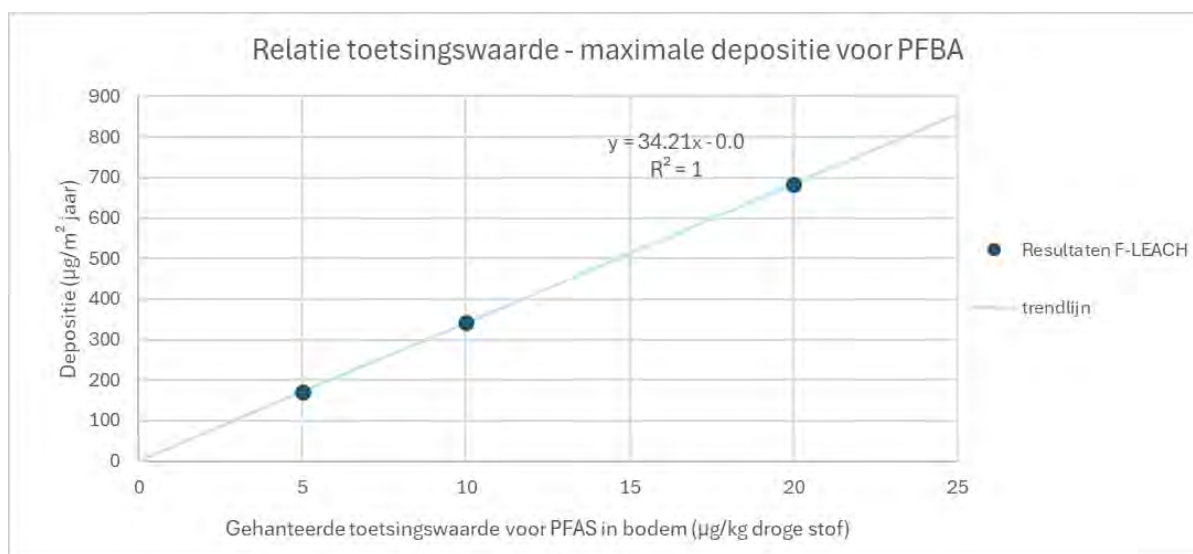
Figuur 17: Diepteprofiel van de concentratie PFNS in de toplaag van de bodem (0 – 30 centimeter onder maaiveld) bij een atmosferische depositie van 100 µg/m² jaar na simulatieperiodes van 20, 40 en 100 jaar. Deze simulaties maken gebruik van de parameterwaarden voor het standaardscenario en gebruiken de gemiddelde Koc-waarde uit de Vlaamse dataset van de lopende OVAM studie op basis van de residu- en eluaatconcentraties. De volle lijnen geven de concentratieprofielen weer voor het scenario waarbij slechts in de eerste 20 jaar van de simulatie PFAS depositie plaatsvindt. De stippellijnen geven de profielen weer voor het scenario waarbij depositie plaatsvindt gedurende de volledige simulatie.



Figuur 18: Tijdsevolutie (tot 100 jaar) van de concentratie PFNS in het grondwater bij een atmosferische depositie van 100 µg/m² jaar. Deze simulaties maken gebruik van de parameterwaarden voor het standaardscenario en gebruiken de gemiddelde Koc-waarde uit de Vlaamse dataset van de lopende OVAM studie op basis van de residu- en eluaatconcentraties. De blauwe lijn geeft het tijdsverloop van de maximale grondwaterconcentratie weer voor het scenario waarbij slechts in de eerste 20 jaar van de simulatie PFAS depositie plaatsvindt. De rode lijn geeft dit tijdsverloop weer voor het scenario waarbij depositie plaatsvindt gedurende de volledige simulatie.

3.2.5 Effect van de gehanteerde toetsingswaarden

Om de relatie tussen de gehanteerde toetsingswaarden en de maximaal mogelijke depositiewaarde zonder overschrijding te bepalen werden F-LEACH simulaties uitgevoerd. Hierbij werden per PFAS en per milieumedium (bodem of grondwater) drie simulaties uitgevoerd met verschillende toetsingswaarden. Voor deze simulaties werden de standaardscenario's voor bodem en grondwater gehanteerd in combinatie met de Vlaamse Koc-dataset op basis van de residu-/eluaatconcentraties (zie eerder). Deze drie datapunten laten vervolgens toe om een lineaire trendlijn te fitten. Figuur 19 geeft bij wijze van voorbeeld de bekomen depositiewaarden voor PFBA met drie verschillende toetsingswaarden voor bodem (in casu 5, 10 en 20 µg/kg droge stof) en de daaruit voortkomende trendlijn. Aangezien de depositiewaarde en de gehanteerde toetsingswaarde een lineair verband vertonen indien de bodemconcentratie in evenwicht is met de depositie bedraagt de r^2 -waarde 1 (een perfecte fit).



Figuur 19: Depositiewaarde (in µg/m² jaar) in functie van de gehanteerde toetsingswaarde in bodem (in µg/kg droge stof) voor PFBA over een tijdsperiode van 100 jaar. De blauwe bollen geven de resultaten van de individuele F-LEACH simulaties weer. De lichtblauwe lijn geeft de bekomen trendlijn doorheen deze punten weer.

Deze analyse kan herhaald worden voor alle 42 target PFAS waarbij op basis van F-LEACH simulaties met verschillende toetsingswaarden steeds een trendlijn afgeleid kan worden die de relatie tussen de depositiewaarde en de toetsingswaarde weergeeft. De bekomen a- en b-coëfficiënten van de trendlijn voor elke PFAS wordt samengevat in tabellen 5 en 6 voor bodem en grondwater respectievelijk. Ter volledigheid werd aan deze tabel eveneens de bekomen maximale depositiewaarde toegevoegd voor de gehanteerde toetsingswaarden van 8 µg/kg droge stof in bodem en 100 ng/l voor grondwater. Uit de bekomen coëfficiënten voor grondwater kan afgeleid worden dat, in tegenstelling tot de resultaten voor bodem, vijf PFAS (lange keten carbonzuren en de diPAP's) een waarde voor de b-coëfficiënt hebben die zeer sterk afwijkt van 0. Dit zou betekenen dat voor een toetsingswaarde van 0 ng/l (nultolerantie) er toch een depositiewaarde afwijkend van 0 µg/m² jaar mogelijk zou zijn. Dit is uiteraard niet realistisch en wordt veroorzaakt door het feit dat over de gesimuleerde tijdsperiode de PFAS die aan het maaiveld afgezet wordt het grondwater nog niet of slechts gedeeltelijk bereikt heeft omwille van de hoge adsorptie van lange keten PFAS aan de bodem. Bijgevolg zijn de

concentraties in het grondwater nog niet in evenwicht met de depositie aan het maaiveld. Bij een simulatieperiode van 100 jaar was dit artefact bij een groter aantal PFAS aanwezig. Echter, bij het verlengen van de simulatieperiode tot 500 jaar was het voor de meeste van deze PFAS (behalve de eerder vermeldde vijf) mogelijk om tot een lineaire relatie te komen met een b-coëfficiënt die de 0 benadert. De PFAS waarvoor de simulatieperiode verlengd werd zijn aangeduid in tabel 6 met een asterisk. Aangezien voor vijf PFAS zelfs na 500 jaar geen betekenisvolle relatie kon afgeleid worden voor het grondwater zijn deze niet opgenomen in tabel 6. Omwille van de zeer trage uitloging van deze PFAS en dus de sterke accumulatie in de bodem kan echter gesteld worden dat de bodem het meer gevoelige medium is.

Bij deze analyse dient benadrukt te worden dat de bodem- en grondwater-componenten afzonderlijk beoordeeld worden. Zo is het bijvoorbeeld mogelijk dat een bepaalde PFAS sterk uitloogt, waardoor een hoge atmosferische depositie mogelijk is zonder de gehanteerde toetsingswaarde in bodem te overschrijden. Gezien de sterke uitloging is het mogelijk dat deze PFAS echter in het grondwater al bij een lagere atmosferische depositie de gehanteerde toetsingswaarde overschrijdt. Gezien de verschillen in uitlooggedrag tussen de PFAS dient voor een volledige analyse steeds zowel de bodem als het grondwater geëvalueerd te worden zodat het meest gevoelige medium bepaald kan worden.

Tabel 5: Bekomen a- en b-coëfficiënten voor de relatie tussen de maximale depositiewaarde (in $\mu\text{g}/\text{m}^2$ jaar) en de gehanteerde toetsingswaarde voor bodem (in $\mu\text{g}/\text{kg}$ droge stof). Daarnaast bevat de laatste kolom de maximale depositiewaarde voor een toetsingswaarde van 8 $\mu\text{g}/\text{kg}$ droge stof.

PFAS	gehanteerde log(Koc)-waarde	a-coëfficiënt	b-coëfficiënt	Maximale depositie voor een toetsingswaarde (T) van 8 $\mu\text{g}/\text{kg}$ droge stof (in $\mu\text{g}/\text{m}^2$ jaar)
PFBA	2.42	34.21	0.00	273.67
PFPeA	2.27	47.91	0.00	383.31
PFHxA	2.34	40.76	0.00	326.08
PFHpA	2.36	38.73	0.00	309.88
PFOA	2.57	24.08	0.00	192.62
PFNA	2.78	14.98	0.00	119.80
PFDA	3.21	6.50	0.00	51.97
PFUnDA	3.44	5.06	0.00	40.46
PFDODA	3.94	4.49	0.00	35.96
PFTTrDA	4.21	4.48	0.00	35.85
PFTeDA	4.44	4.47	0.00	35.75
PFHxDA	5.71	4.29	0.00	34.32
PFODA	6.71	3.83	0.00	30.68
PFBS	2.65	20.39	0.00	163.14
PFPeS	2.84	13.21	0.00	105.66
PFHxS	2.63	20.98	0.00	167.85
PFHpS	2.64	20.82	0.00	166.52
PFOS	2.83	13.49	0.00	107.90
PFNS	3.07	8.24	0.00	65.94
PFDS	3.51	4.86	0.00	38.85

PFUnDS	3.89	4.50	0.00	36.00
PFDoDS	4.38	4.47	0.00	35.78
PFTTrDS	4.29	4.48	0.00	35.82
4:2FTS	2.69	18.31	0.00	146.46
6:2FTS	2.37	38.32	0.00	306.59
8:2FTS	3.15	7.19	0.00	57.48
10:2FTS	4.36	4.47	0.00	35.79
FOSA	2.92	11.11	0.00	88.87
MeFOSA	3.58	4.70	0.00	37.61
EtFOSA	3.75	4.54	0.00	36.30
MeFOSAA	3.75	4.54	0.00	36.31
EtFOSAA	3.42	5.15	0.00	41.20
6:2diPAP	5.47	4.35	0.00	34.76
6:2/8:2diPAP	6.47	3.99	0.00	31.89
8:2diPAP	7.47	3.10	0.00	24.80
PFBSA	2.53	26.55	0.00	212.40
MePFBSA	1.06	564.16	0.00	4513.27
MePFBSAA	3.28	5.94	0.00	47.53
PFHxSA	2.64	20.50	0.00	164.03
HFPO-DA	1.10	529.76	0.00	4238.12
DONA	1.78	140.88	0.00	1127.06
PFECHS	3.00	9.32	0.00	74.59

*Tabel 6: Bekomen a- en b-coëfficiënten voor de relatie tussen de maximale depositiewaarde (in $\mu\text{g}/\text{m}^2$ jaar) en de gehanteerde toetsingswaarde voor grondwater (in $\mu\text{g}/\text{l}$). Daarnaast bevat de laatste kolom de maximale depositiewaarde voor een toetsingswaarde van 0,1 $\mu\text{g}/\text{l}$. Voor de PFAS aangeduid met een * werd de simulatietijd verhoogd van 100 naar 500 jaar omwille van de hoge Koc-waarden voor deze PFAS. Voor de PFAS aangeduid met ** kon ook na een simulatieperiode van 500 jaar geen bruikbare relatie bekomen worden, waardoor deze niet opgenomen zijn in deze tabel.*

PFAS	gehanteerde log(Koc)-waarde	a-coëfficiënt	b-coëfficiënt	Maximale depositie voor een toetsingswaarde (T) van 0,1 $\mu\text{g}/\text{l}$ (in $\mu\text{g}/\text{m}^2$ jaar)
PFBA	2.42	301.52	0.00	30.15
PFPeA	2.27	301.52	0.00	30.15
PFHxA	2.34	301.52	0.00	30.15
PFHpA	2.36	301.52	0.00	30.15
PFOA	2.57	301.52	0.00	30.15
PFNA	2.78	301.52	0.00	30.15
PFDA	3.21	301.81	-0.01	30.18
PFUnDA	3.44	312.42	0.00	31.24
PFDODA*	3.94	301.91	0.01	30.19
PFTTrDA*	4.21	323.65	0.00	32.37
PFTeDA*	4.44	510.83	-0.01	51.08

PFHxDA**				
PFODA**				
PFBS	2.65	301.52	0.00	30.15
PFPeS	2.84	301.52	0.00	30.15
PFHxS	2.63	301.52	0.00	30.15
PFHpS	2.64	301.52	0.00	30.15
PFOS	2.83	301.52	0.00	30.15
PFNS	3.07	301.52	0.00	30.15
PFDS	3.51	324.59	0.00	32.46
PFUnDS*	3.89	301.52	0.00	30.14
PFDnDS*	4.38	422.22	-0.01	42.22
PFTnDS*	4.29	355.01	0.05	35.50
4:2FTS	2.69	301.52	0.00	30.15
6:2FTS	2.37	301.52	0.00	30.15
8:2FTS	3.15	301.57	-0.01	30.16
10:2FTS*	4.36	405.30	0.00	40.53
FOSA	2.92	301.52	0.00	30.15
MeFOSA	3.58	351.00	-0.01	35.10
EtFOSA*	3.75	301.52	0.00	30.15
MeFOSAA*	3.75	301.52	0.00	30.12
EtFOSAA	3.42	309.59	0.00	30.96
6:2diPAP**				
6:2/8:2diPAP**				
8:2diPAP**				
PFBSA	2.53	301.52	0.00	30.15
MePFBSA	1.06	301.52	0.00	30.15
MePFBSAA	3.28	302.51	-0.01	30.25
PFHxSA	2.64	301.52	0.00	30.15
HFPO-DA	1.10	301.52	-0.01	30.15
DONA	1.78	301.52	-0.01	30.15
PFECHS	3.00	301.52	-0.01	30.15

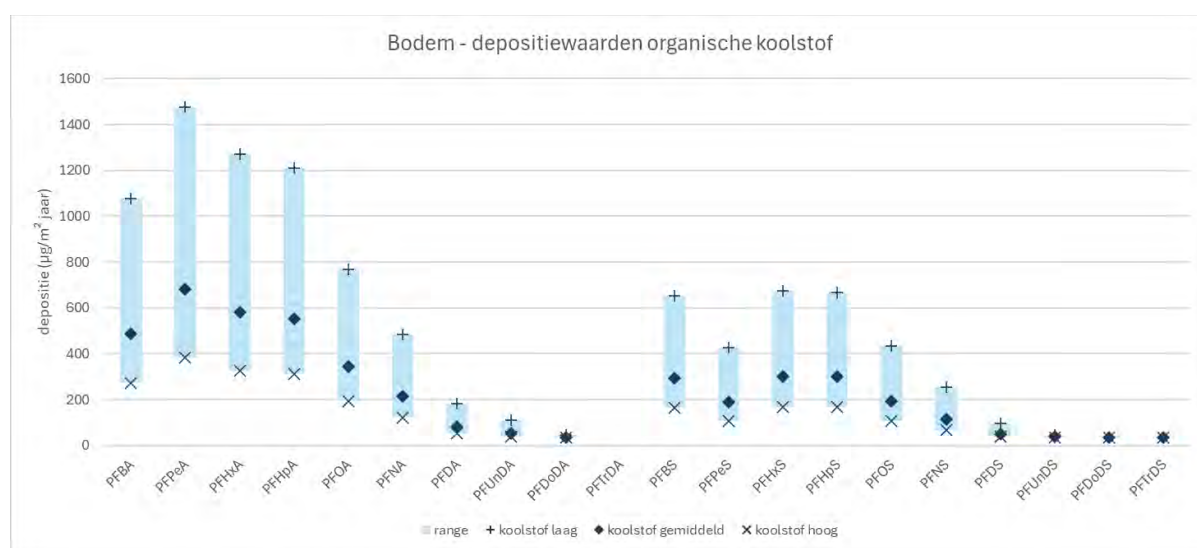
3.3 Sensitiviteitsanalyse omgevingsfactoren en bodemeigenschappen

Om de gevoeligheid van de mogelijke depositiewaarden voor wijzigingen in de omgevingsfactoren en bodemeigenschappen te bepalen werden F-LEACH simulaties uitgevoerd voor de parameterwaarden opgelijst in tabel 4. Voor elk van deze waarden kan de depositiewaarde bepaald worden per PFAS verbinding die mogelijk is zonder dat de toetsingswaarden van 8 µg/kg ds in bodem of 100 ng/l in grondwater overschreden worden binnen een tijdsperiode van 100 jaar.

3.3.1.1 Gehalte organische koolstof bodem

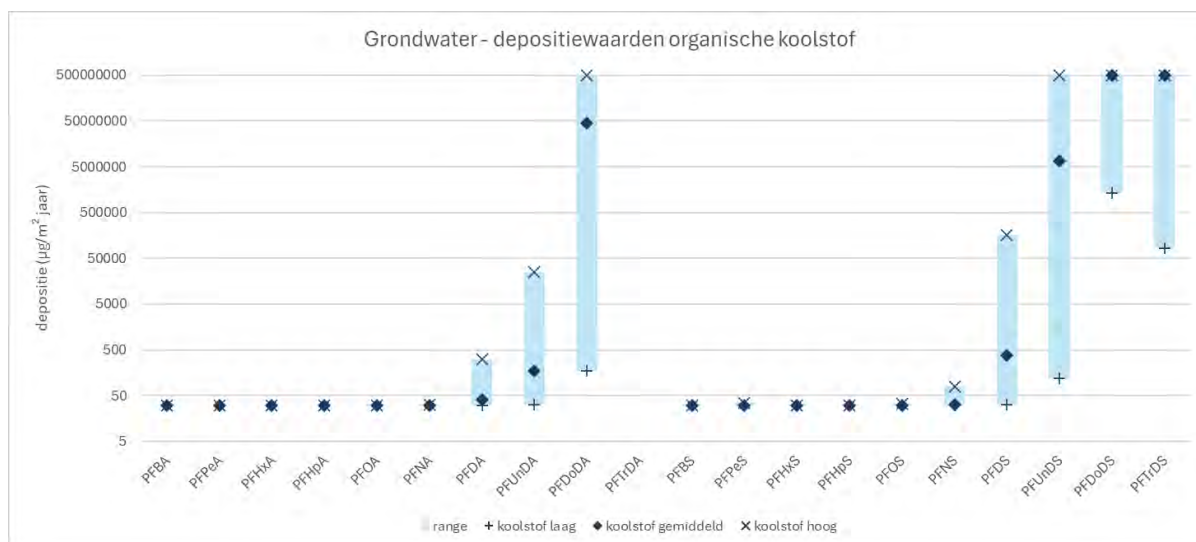
Voor het compartiment bodem blijkt het aanwezige gehalte organische koolstof voornamelijk een grote invloed te hebben op de depositiewaarde voor de korte keten PFAS. Dit effect is bovendien sterker voor de carbonzuren, in vergelijking met de sulfonzuren, met depositiewaarden van meer dan 1000 $\mu\text{g}/\text{m}^2$ jaar voor PFBA, PFPeA, PFHxA en PFHpA in het geval van een laag koolstofgehalte in de bodem (figuur 20). Omwille van de relatief zwakke adsorptie van de korte keten PFAS aan de bodemdeeltjes en dus een snellere uitloging naar het grondwater zijn hogere depositiewaarden mogelijk. Omwille van het positieve effect van organische koolstof op de adsorptie van PFAS zorgt een laag koolstofgehalte in de bodem voor de laagste adsorptie, hetgeen leidt tot de hoge depositiewaarden.

Voor de lange keten PFAS heeft het koolstofgehalte van de bodem weinig effect op de depositiewaarden. Dit kan verklaard worden doordat lange keten PFAS sterk adsorberen aan de bodemdeeltjes en dus ongeacht het koolstofgehalte van de bodem sterk accumuleren in de bodemtoplaag, waardoor slechts een beperkte depositieflux mogelijk is zonder de toetsingswaarde te overschrijden.



Figuur 20: Depositiewaarden ($\mu\text{g}/\text{m}^2$ jaar) per PFAS voor verschillende gehalten organische koolstof in de bodem, waarvoor de bodemconcentratie net onder de gehanteerde toetsingswaarde van 8 $\mu\text{g}/\text{kg}$ droge stof blijft over een gesimuleerde tijdsperiode van 100 jaar. De specifieke minimale, standaard en maximale waarden voor organische koolstof in de bodem die in de simulaties gehanteerd worden, zijn opgelijst in tabel 4.

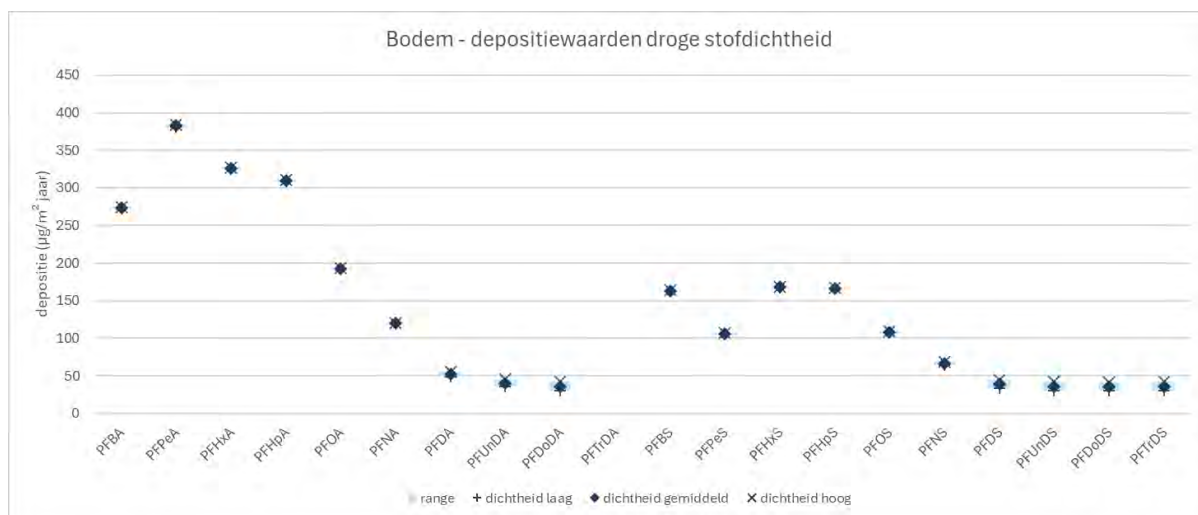
Voor grondwater heeft het gehalte organische koolstof in de bodem min of meer het inverse effect. Voor de kortere keten PFAS tot een ketenlengte van negen koolstofatomen (PFNA en PFNS) heeft het gehalte organische koolstof een beperkte invloed op de depositiewaarden. Gezien de relatief beperkte adsorptie van deze kortere ketens heeft het gehalte organische koolstof een bescheiden effect op de uitloging naar het grondwater binnen de bestudeerde tijdsperiode van 100 jaar (figuur 21). Voor de langere keten PFAS, die een sterke adsorptie aan de bodemdeeltjes vertonen heeft het gehalte organische koolstof in de bodem een zeer sterk effect op de depositiewaarden. Hier bepaalt het gehalte organische koolstof in welke mate de PFAS het grondwater bereiken binnen de tijdsperiode van 100 jaar. Indien het grondwater niet of in beperkte mate bereikt wordt zijn namelijk zeer hoge depositiefluxen aan het oppervlak mogelijk zonder dat de toetsingswaarde in het grondwater overschreden wordt (figuur 21).



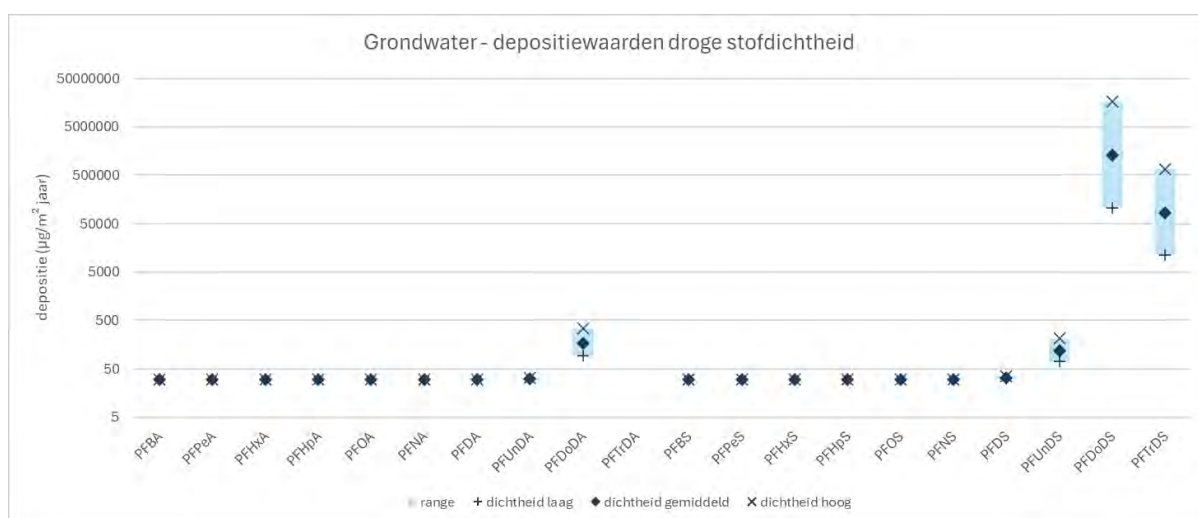
Figuur 21: Depositiewaarden ($\mu\text{g}/\text{m}^2$ jaar) per PFAS (logaritmische schaal) voor verschillende gehalten organische koolstof in de bodem, waarvoor de grondwaterconcentratie net onder de gehanteerde toetsingswaarde van 100 ng/l blijft over een gesimuleerde tijdsperiode van 100 jaar. De specifieke minimale, standaard en maximale waarden voor organische koolstof in de bodem die in de simulaties gehanteerd worden, zijn opgelijst in tabel 4.

3.3.1.2 Droge stofdichtheid

Naast het gehalte organische koolstof werd ook het effect van een tweede bodemeigenschap, namelijk de droge stofdichtheid, geanalyseerd. Voor de depositiewaarden in bodem blijkt de droge stofdichtheid een zeer beperkt effect te hebben in vergelijking met andere modelparameters. Dit effect is iets meer uitgesproken voor de lange keten PFAS, maar grotendeels verwaarloosbaar (figuur 22). Voor grondwater is er wel een duidelijk effect merkbaar, maar enkel voor PFAS met een ketenlengte van 11 koolstofatomen of meer. Voor deze PFAS zorgt een hogere droge stofdichtheid voor een toegenomen adsorptie aan de bodemdeeltjes, waardoor de PFAS binnen de bestudeerde tijdsperiode van 100 jaar in beperkte mate het grondwater bereikt. Daardoor zijn hogere depositiewaarden mogelijk zonder de toetsingswaarde voor grondwater te overschrijden (figuur 23).



Figuur 22: Depositiewaarden ($\mu\text{g}/\text{m}^2$ jaar) per PFAS voor verschillende droge stofdichtheden, waarvoor de bodemconcentratie net onder de gehanteerde toetsingswaarde van $8 \mu\text{g}/\text{kg}$ droge stof blijft over een gesimuleerde tijdsperiode van 100 jaar. De specifieke minimale, standaard en maximale waarden voor de droge stofdichtheid die in de simulaties gehanteerd worden, zijn opgelijst in tabel 4.

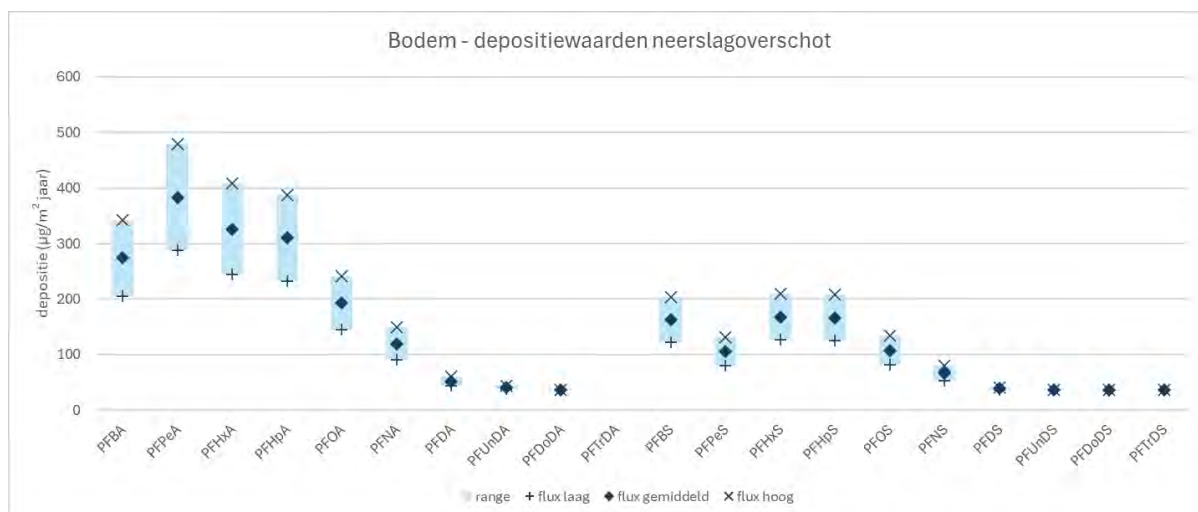


Figuur 23: Depositiewaarden ($\mu\text{g}/\text{m}^2$ jaar) per PFAS (logaritmische schaal) voor verschillende droge stofdichtheden, waarvoor de grondwaterconcentratie net onder de gehanteerde toetsingswaarde van $100 \text{ ng}/\text{l}$ blijft over een gesimuleerde tijdsperiode van 100 jaar. De specifieke minimale, standaard en maximale waarden voor de droge stofdichtheid die in de simulaties gehanteerd worden, zijn opgelijst in tabel 4.

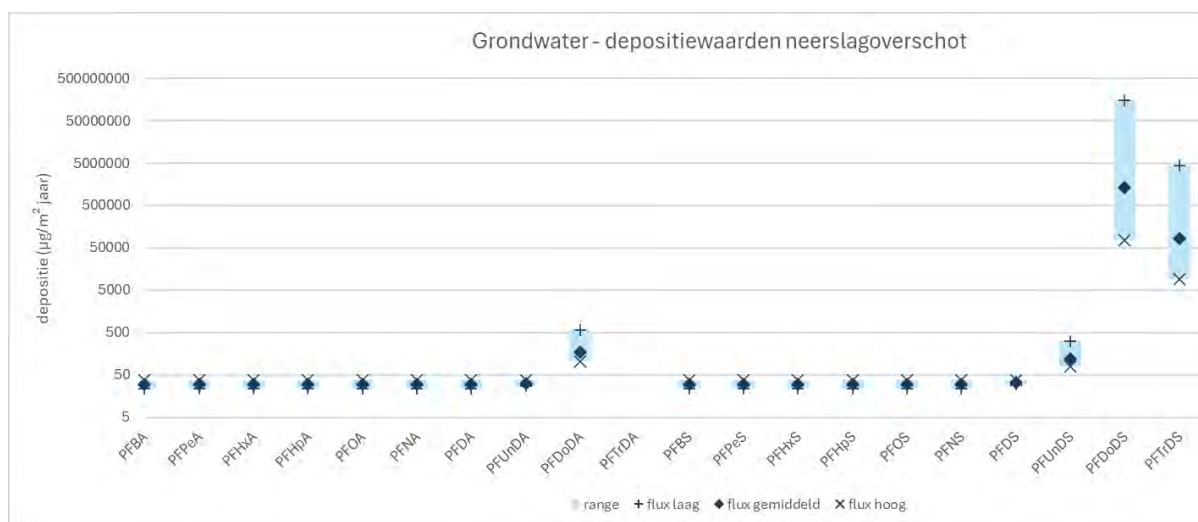
3.3.1.3 Neerslagoverschot

Eenzelfde dynamiek als voor het gehalte organische koolstof in de bodem is merkbaar voor het effect van het neerslagoverschot op de depositiewaarden (figuren 24 en 25). Hierbij kan algemeen gesteld worden dat een groter neerslagoverschot zal zorgen voor een sterkere neerwaartse waterflux doorheen de onverzadigde zone naar het grondwater en dus ook een snellere uitloging van de PFAS naar het grondwater. Door dit effect zijn hogere depositiewaarden mogelijk bij een groter neerslagoverschot voor voornamelijk de korte keten

PFAS zonder de toetsingswaarde in bodem te overschrijden. Ook hier is dit effect duidelijk sterker voor de carbonzuren in vergelijking met de sulfonzuren. Door de sterkere adsorptie van de lange keten PFAS aan de bodemdeeltjes heeft het neerslagoverschot slechts een zeer beperkt effect op de depositiewaarden voor lange keten PFAS. Het omgekeerde beeld kan gezien worden bij het grondwater, waar enkel voor PFAS met een ketenlengte van elf koolstofatomen of meer beduidend hogere depositiewaarden mogelijk zijn over een tijdsperiode van 100 jaar.



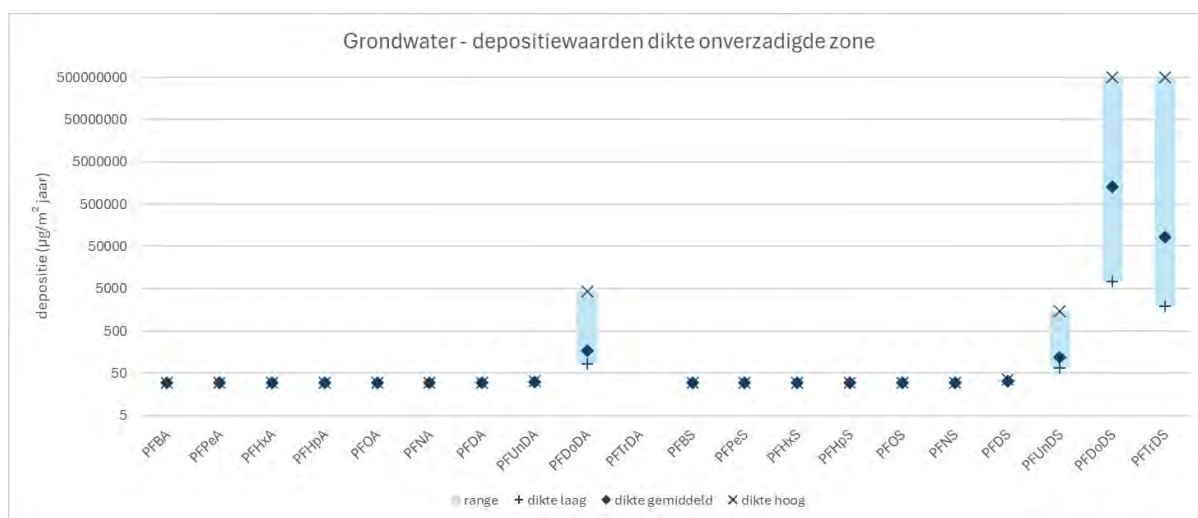
Figuur 24: Depositiewaarden ($\mu\text{g}/\text{m}^2$ jaar) per PFAS voor verschillende waarden van het neerslagoverschot, waarvoor de bodemconcentratie net onder de gehanteerde toetsingswaarde van $8 \mu\text{g}/\text{kg}$ droge stof blijft over een gesimuleerde tijdsperiode van 100 jaar. De specifieke minimale, standaard en maximale waarden voor het neerslagoverschot die in de simulaties gehanteerd worden, zijn opgelijst in tabel 4.



Figuur 25: Depositiewaarden ($\mu\text{g}/\text{m}^2$ jaar) per PFAS (logaritmische schaal) voor verschillende waarden van het neerslagoverschot, waarvoor de grondwaterconcentratie net onder de gehanteerde toetsingswaarde van $100 \text{ ng}/\text{l}$ blijft over een gesimuleerde tijdsperiode van 100 jaar. De specifieke minimale, standaard en maximale waarden voor het neerslagoverschot die in de simulaties gehanteerd worden, zijn opgelijst in tabel 4.

3.3.1.4 Dikte onverzadigde zone/diepte grondwatertafel

Tenslotte werd ook het effect van de dikte van de onverzadigde zone, hetgeen gelijk is aan de diepte van de grondwatertafel onder het maaiveld, op de depositiewaarden geëvalueerd. Aangezien de dikte van de bodemtoplaag (waarin de bodemconcentratie geëvalueerd wordt) steeds gelijk blijft aan 30 centimeter ongeacht de dikte van de onverzadigde zone, heeft een variatie in de dikte van de onverzadigde zone geen effect op de berekende depositiewaarden voor bodem. Bijgevolg wordt enkel het effect voor grondwater geëvalueerd. Hier blijkt duidelijk dat er enkel voor lange keten PFAS met een ketenlengte van meer dan 10 koolstofatomen er een duidelijk effect van de dikte van de onverzadigde zone op de bekomen depositiewaarden zichtbaar is (figuur 26). Voor deze lange keten PFAS is de adsorptie aan de bodemdeeltjes hoog, waardoor afhankelijk van de dikte van de onverzadigde zone de PFAS depositie nog niet of in beperkte mate het grondwater bereikt binnen een termijn van 100 jaar. Bijgevolg zijn hoge depositiefluxen mogelijk zonder de toetsingswaarde in het grondwater te overschrijden. Voor de kortere keten PFAS geldt dit effect niet of nauwelijks aangezien de adsorptie voor deze PFAS lager ligt, waardoor de grondwaterconcentratie reeds in evenwicht is met de depositieflux aan het maaiveld.



Figuur 26: Depositiewaarden ($\mu\text{g}/\text{m}^2$ jaar) per PFAS (logaritmische schaal) voor verschillende diktes van de onverzadigde zone, waarvoor de grondwaterconcentratie net onder de gehanteerde toetsingswaarde van 100 ng/l blijft over een gesimuleerde tijdsperiode van 100 jaar. De specifieke minimale, standaard en maximale waarden voor de dikte van de onverzadigde zone die in de simulaties gehanteerd worden, zijn opgelijst in tabel 4.

4 BESLUIT

In deze studie werd de relatie bestudeerd tussen de atmosferische depositie van PFAS aan het maaiveld en het effect hiervan op de PFAS concentraties in bodem en grondwater op lange termijn. Door gebruik te maken van een modellering met het F-LEACH model kon afgeleid worden welke depositiefluxen voor een bepaalde PFAS-verbinding onder bepaalde gegeven omstandigheden maximaal kunnen toegelaten worden zonder een gekozen toetsingswaarden in bodem en/of grondwater te overschrijden.

In een eerste fase van de studie werd een literatuuronderzoek uitgevoerd om voor de verschillende PFAS de nodige parameterwaarden voor de fysico-chemische eigenschappen van de PFAS te bekomen. Algemeen kan hieruit besloten worden dat de beschikbare informatie in de internationale wetenschappelijke literatuur momenteel nog steeds beperkt is. Hoewel voor alle 42 bestudeerde PFAS de nodige parameterwaarden gevonden of geschat konden worden zijn de waarden voor een aantal modelparameters voor sommige PFAS gebaseerd op slechts één bron. Bijgevolg is het voor deze waarden niet mogelijk om de onzekerheid of variatie op deze parameterwaarden en het effect daarvan op de relatie tussen depositie en concentraties in bodem of grondwater te begroten. Indien de bekomen parameterwaarden gebaseerd zouden kunnen worden op een grotere onderliggende dataset zouden meer robuuste schattingen voor deze modelparameters bekomen kunnen worden.

Deze conclusie geldt eveneens voor de adsorptiecoëfficiënt (Koc-waarde) die bepaalt in welke mate de PFAS die aan het maaiveld afgezet wordt adsorbeert aan de bodemdeeltjes en dus de snelheid van uitloging doorheen het bodemprofiel zeer sterk bepaalt. Voor deze modelparameter kon enerzijds informatie uit de internationale literatuur geëxtraheerd worden en anderzijds gebruik gemaakt worden van een (beperkte) dataset die specifiek bepaald werd op Vlaamse bodems voor een lopende studie van OVAM. Uit deze datasets blijkt dat er inherent een relatief grote variatie aanwezig is in de Koc-waarden die voor een bepaalde PFAS teruggevonden worden. Gezien de grote impact van de Koc-waarde op het uitlooggedrag van PFAS werden specifieke modelsimulaties opgezet om het effect van de keuze voor bepaalde Koc-waarden op de relatie tussen depositie en PFAS concentraties in bodem en grondwater te begroten. Uit alle verzamelde Koc-waarden komt wel de reeds gekende relatie tussen de uitloogsnelheid en de ketenlengte van de PFAS sterk en duidelijk naar voren, ongeacht de gehanteerde bron voor de Koc-waarden.

In een tweede fase van deze studie werd het F-LEACH model gebruikt om de relatie tussen de depositie en de bodem en grondwaterconcentraties te kwantificeren. Als evaluatiecriterium werd hierbij de maximaal mogelijke depositiewaarde bepaald die mogelijk is aan het maaiveld zonder de gehanteerde toetsingswaarden in bodem of grondwater te overschrijden. Hierbij werd steeds elke PFAS en elk milieucompartment (bodem en grondwater) afzonderlijk geëvalueerd.

Omwille van de beschikbaarheid van verschillende datasets van Koc-waarden en het grote effect van deze modelparameter op de depositiewaarde werd in een eerste stap het effect van de keuze voor een bepaalde Koc-dataset op de bekomen depositiewaarden geëvalueerd. Uit deze analyse blijkt dat ongeacht de gekozen Koc-dataset duidelijk hogere depositiewaarden mogelijk zijn voor korte keten PFAS ten opzichte van de langere ketens omwille van de lagere Koc-waarden, al is dit effect is minder uitgesproken voor de Vlaamse Koc-waarden ten opzichte van de waarden uit de internationale literatuur. Voor de lange keten PFAS heeft de gekozen Koc-waarde zeer weinig impact op de bekomen depositiewaarde omdat de hoge

Koc-waarde steeds zorgt voor een beperkte uitloging, waardoor de toetsingswaarde in bodem snel overschreden wordt. De depositiewaarden voor de toetsingswaarde in grondwater vertonen min of meer het spiegelbeeld van de toetsingswaarde in bodem. Voor de PFAS met een ketenlengte van tien koolstofatomen of lager heeft de Koc-waarde amper een effect. Voor de langere keten PFAS heeft de gekozen Koc-waarde wel een sterk effect op de depositiewaarde. Hier zijn in sommige gevallen extreem hoge depositiewaarden mogelijk zonder de toetsingswaarde in grondwater te overschrijden omwille van het feit dat de uitloging zo traag verloopt dat deze lange keten PFAS het grondwater niet of nauwelijks bereiken binnen de gesimuleerde periode.

Deze resultaten geven aan dat indien de simulatie een langere tijdsperiode van bijvoorbeeld 500 jaar beschouwt, deze hoge depositiewaarden niet meer mogelijk zullen zijn omdat de uitlopende PFAS zonder de toetsingswaarde in grondwater te overschrijden. Dit werd bevestigd door een bijkomende reeks simulaties waarbij de gesimuleerde tijdsperiode werd opgetrokken tot 500 jaar. Uit deze resultaten blijkt dat deze zeer hoge depositiewaarden voor de lange keten PFAS niet meer mogelijk zijn bij een langere simulatieperiode omdat ondanks de trage uitloging deze PFAS het grondwater toch bereiken over een periode van 500 jaar. Enkel bij het hanteren van de maximale Koc-waarden uit de literatuur voor de langste keten PFAS is dit effect nog in (beperkte) mate aanwezig in de bekomen depositiewaarden.

De maximale depositiewaarde die mogelijk is zonder de toetsingswaarden in bodem of grondwater te overschrijden is logischerwijs ook sterk afhankelijk van de gekozen toetsingswaarde. In deze studie werden voor de onderlinge vergelijkingen tussen de PFAS waarden van 2, 3 en 8 µg/kg droge stof gehanteerd voor bodem en 100 ng/l voor grondwater om de onderlinge vergelijking in uitlooggedrag tussen de verschillende PFAS te kunnen maken. Daarnaast werden echter ook de statistische relaties tussen de maximale depositie en de gehanteerde toetsingswaarde afgeleid per PFAS en per milieumedium (bodem of grondwater). Deze relaties zijn lineair en laten toe om de depositiewaarde om te rekenen naar een nieuwe waarde indien er voor een andere toetsingswaarde gekozen wordt zonder dat de F-LEACH simulaties herhaald dienen te worden. Bijgevolg maken deze statistische relaties de bevindingen van dit rapport onafhankelijk van de gekozen toetsingswaarde aangezien de bekomen modelresultaten steeds omgerekend kunnen worden voor een wijziging in de gekozen toetsingswaarde.

In tabel 6 valt op dat de a-coëfficiënt voor de meerderheid van de PFAS gelijk is aan 301,52, hetgeen bij een toetsingswaarde van 100 ng/l in grondwater overeenkomt met een maximale depositiewaarde van 30,15 µg/m² jaar. Ook voor vele andere PFAS ligt de waarde voor deze coëfficiënt slechts een klein beetje hoger dan deze waarde. Hieruit kan geconcludeerd worden dat, indien er een zeer lange simulatietijd gehanteerd wordt, de grondwaterconcentratie voor alle PFAS in evenwicht zal zijn met de atmosferische depositie aan het oppervlak, waardoor deze coëfficiënten voor alle PFAS gelijk zouden worden. Het feit dat dit voor heel wat PFAS zelfs na een simulatietijd van 500 jaar nog niet het geval is toont aan dat de PFAS met een hoog moleculair gewicht en lange ketens een zeer traag uitlooggedrag vertonen. Aangezien deze maximale depositiewaarde voor een toetsing in het grondwater lager ligt dan de maximale depositiewaarden voor een toetsing in de bodem kan het grondwater over het algemeen gezien worden als de meer gevoelige receptor van PFAS depositie aan het maaiveld.

In de laatste fase van deze studie werd de sensitiviteit van de depositiewaarden voor wijzigingen in omgevingsfactoren en bodemeigenschappen gekwantificeerd. Hierbij lag de focus op twee bodemeigenschappen (droge stofdichtheid en het gehalte organische koolstof) en twee omgevingsfactoren (het neerslagoverschot en de dikte van de onverzadigde zone).

De bodemtextuur die ook als een bodemeigenschap gezien kan worden werd hierin niet opgenomen omdat deze niet expliciet aanwezig is in de modelstructuur van F-LEACH. Onrechtstreeks wordt de bodemtextuur onder andere vertegenwoordigd door de adsorptiecoëfficiënt, waarvan de modelsensitiviteit wel uitgebreid geanalyseerd werd in sectie 3.2.1. Ook in deze analyse komt sterk de verschillende respons van bodem en grondwater naar voren, waarbij ze qua sensitiviteit elkaars spiegelbeeld vormen. In bodem heeft een verandering in bodem- of omgevingseigenschappen voornamelijk een effect op de depositiewaarden voor de korte keten PFAS, terwijl voor de lange ketens de depositiewaarden steeds laag zijn. De lange keten PFAS logen traag uit in de bodem, waardoor slechts beperkte depositiewaarden mogelijk zijn zonder de toetsingswaarde te overschrijden. Variatie in bodem- of omgevingseigenschappen zal deze uitloging wel beïnvloeden, maar niet in die mate dat er significant hogere depositiewaarden mogelijk zijn.

In grondwater heeft een verandering in deze eigenschappen quasi uitsluitend een effect op de lange keten PFAS met ketenlengtes van meer dan 10 koolstofatomen. Dit omdat de korte keten PFAS voldoende snel uitlogen om over de gesimuleerde periode van 100 jaar het grondwater aan een constante hoeveelheid te bereiken. Veranderingen in bodemeigenschappen zullen de snelheid van uitloging wel beïnvloeden, maar niet in die mate dat de uitlogende PFAS het grondwater nog niet bereiken over een periode van 100 jaar. Voor de lange keten PFAS kan een verandering in deze eigenschappen wel het verschil maken tussen het wel of niet bereiken van het grondwater door de uitlogende PFAS, waardoor sterk verschillende maximale depositiewaarden bekomen worden afhankelijk van de aanwezige bodem- en omgevingseigenschappen.

In bodem blijken voornamelijk het gehalte organische stof en in beperktere mate het neerslagoverschot de depositiewaarden te beïnvloeden, waarbij een kleiner neerslagoverschot en hogere koolstofgehaltes de maximale depositie negatief beïnvloeden. Over het algemeen neemt het effect van deze eigenschappen af met toenemende ketenlengte. De droge stofdichtheid van de bodem en de dikte van de onverzadigde zone hebben nauwelijks een effect op de depositiewaarden voor bodem.

In grondwater hebben de bodem- en omgevingseigenschappen enkel een noemenswaardig effect op de bekomen depositiewaarden voor de lange keten PFAS, waarbij het gehalte organische stof van de bodem en de dikte van de onverzadigde zone (diepte grondwatertafel) als meest invloedrijke parameters geïdentificeerd kunnen worden. Hoge gehalten organische koolstof in de bodem en dieperliggende grondwatertafels zorgen er dan voor dat de uitlogende PFAS het grondwater trager bereiken, waardoor aan het maaiveld hogere depositiewaarden mogelijk zijn zonder de toetsingswaarde in het grondwater te overschrijden over een tijdsperiode van 100 jaar.

Algemeen kan besloten worden dat een modelmatige aanpak op basis van het F-LEACH model toelaat om de relatie tussen de atmosferische depositie aan het maaiveld en de concentraties in bodem en grondwater adequaat te evalueren voor verschillende PFAS onder een variatie aan bodem- en omgevingseigenschappen. Hierbij dient de kanttekening geplaatst te worden dat deze modelsimulaties steeds uitgaan van een geïdealiseerde situatie, waarbij eveneens aannames dienen te gebeuren over een aantal bodemprocessen en PFAS-eigenschappen. De resultaten uit deze studie kunnen dus niet zomaar gezien worden als representatief voor een bepaalde specifieke case study of locatie in Vlaanderen. Deze simulaties zijn dus gebaseerd op een generiek scenario maar wel met conservatieve aannames zoals hoge of lage gehalten aan organisch materiaal (afhankelijk van het geëvalueerde medium), een ondiepe grondwatertafel en een lage verdunning in het

grondwater. In de meeste locatiespecifieke berekeningen kan dus verwacht worden dat hogere depositie mogelijk zou zijn.

Daarnaast geven de resultaten wel een duidelijk inzicht in de dynamieken die de relatie tussen depositie en bodem- en grondwaterconcentraties bepalen en geven ze een bepaalde bandbreedte aan mogelijke depositiewaarde die mogelijk zijn onder bepaalde gegeven (zij het geïdealiseerde) omstandigheden. Eén van de bijkomende positieve aspecten in deze studie is het feit dat dit type analyses voor het eerst uitgevoerd kon worden voor een dataset van adsorptiecoëfficiënten die specifiek op Vlaamse bodems bepaald werd, waardoor ze zeer geschikt is om gebruikt te worden in de F-LEACH simulaties.

Daarnaast zorgt het opstellen van de relaties tussen de gehanteerde toetsingswaarde en de maximaal mogelijke depositiewaarde voor elke PFAS ervoor dat het mogelijk is om de modelresultaten uit deze studie te blijven gebruiken als leidraad, zelfs indien andere toetsingswaarden gehanteerd worden.

LITERATUURLIJST

Broos, K., Dierckx, P., Joris, I., Quaghebeur, M., Nielsen, P., Debaene, L., Dedecker, D. 2015. Afleiding en onderbouwing gemeenschappelijk normenkader voor grondstoffen en uitgraven bodem in Vlaanderen. Rapport in opdracht van OVAM. 111 p.

EMIS (2025). Compendium voor monsterneming en analyse in uitvoering van het Materialendecreet en het Bodemdecreet: CMA/3/D: Per- en polyfluorverbindingen (PFAS). Versie januari 2025.

EMIS (2025). Compendium voor de monsterneming, meting en analyse van water WAC/IV/A/025: Bepaling van per- en polyfluoralkylverbindingen (PFAS) in water met LC-MS/MS. Versie juni 2024.

Expertisecentrum PFAS. 2018. Poly- en PerFluor Alkyl Stoffen (PFAS). Kennisdocument over stofeigenschappen, gebruik, toxicologie, onderzoek en sanering van PFAS in grond en grondwater. Expertisecentrum PFAS, pp. 86.

ITRC. 2017. History and Use of Per- and Polyfluoroalkyl Substances (PFAS). Interstate Technology and Regulatory Council, Washington DC, USA, pp. 8.

ITRC. 2018. Environmental Fate and Transport for Per- and Polyfluoroalkyl Substances. Interstate Technology and Regulatory Council, Washington DC, USA, pp. 18.

ITRC. 2025. PFAS — Per- and Polyfluoroalkyl Substances. Section 4: Physical and Chemical Properties Table 4-1 Excel File. Laatst geraadpleegd op 21/04/2025. <https://pfas-1.itrcweb.org/external-data-tables/>.

Joris, I., Seuntjens, P., Cornelis, C., Bronders, J., Vanermen, G., Tirez, K., Lookman, R., Gemoets, J. 2005. Bepaling van risico's door uitloging en beschrijving evolutie van de bodemkwaliteit – Deel 2: Handleiding uitloging. Rapport in opdracht van OVAM. 79 pp.

Nguyen, T. M. H., Bräunig, J., Thompson, K., Thompson, J., Kabiri, S., Navarro, D. A., Kookana, R. S., Grimison, C., Barnes, C. M., Higgins, C. P., McLaughlin, M. J., Mueller, J. F. 2020. Influences of Chemical Properties, Soil Properties, and Solution pH on Soil-Water Partitioning Coefficients of Per- and Polyfluoroalkyl Substances (PFASs). *Environmental Science & Technology*, 54:24. 15883-15892. doi: 10.1021/acs.est.0c05705.

OECD. 2013. Synthesis paper on per- and polyfluorinated chemicals (PFCs)-OECD/UNEP Global PFC Group. OECD/UNEP Global PFC Group, Paris, France, pp. 60.

OECD. 2018. Toward a new comprehensive global database of Per- and Polyfluoroalkyl substances (PFASs): Summary report on updating the OECD 2007 list of Per- and Polyfluoroalkyl substances (PFASs) *Series on Risk Management*. Organisation for Economic Co-operation and Development, Paris, France, pp. 24.

Pancras, T., van Bentum, E., Slenders, H. 2018. Poly- en PerFluor Alkyl Stoffen (PFAS). Kennisdocument over stofeigenschappen, gebruik, toxicologie, onderzoek en sanering van PFAS in grond en grondwater. Expertisecentrum PFAS in opdracht van Gemeente Dordrecht en Ministerie van Infrastructuur en Waterstaat. DDT219-1/18-009.764. 85 pp.

Seuntjens, P., Joris, I., Patyn, J., Bronders, J., Cornelis, C. 2005. Bepaling van risico's door uitloging en beschrijving evolutie van de bodemkwaliteit: Deel 1: opstellen methodiek. Rapport in opdracht van OVAM. 158 pp.

Toride, N., Leij, F., Van Genuchten, M. 1995. The CXTFIT Code for Estimating Transport Parameters from Laboratory or Field Tracer Experiments. Salinity Laboratory, 137.

United States Environmental Protection Agency (EPA). 2016. Drinking Water Health Advisory for Perfluorooctanoic Acid (PFOA). Office of Water, EPA 822-R-16-005, 103 pp.

United States Environmental Protection Agency (EPA). 2025. CompTox Chemicals Dashboard, versie 2.5.3. Laatst geraadpleegd op 21/04/2025. <https://comptox.epa.gov/dashboard/>.

Van Holderbeke, M., Vanderbeke, A., Purece, A., Geerts, L., Joris, I., Maertens, M., De Brouwere, K., Touchant, K., Peters, J., Berghmans, P., Vanhooren, H., Vangheluwe, M. 2024. Bepalen toetsingswaarden voor PFAS in omgevingslucht en in depositie – *depositie*. Studie uitgevoerd in opdracht van VMM. 147 pp.

Van Orshoven, J., Maes, J., Vereecken, H., Feyen, J., Dudal, R. 1988. A structured database of Belgian soil profile data, *Pedologie* XXXVIII, 2:191-206.

BIJLAGE A

Tabel 7: Overzicht van de parameterwaarden van de Henry-coëfficiënt, oplosbaarheid en diffusiecoëfficiënt van de verschillende PFAS. Deze waarden worden gebruikt in de standaardscenario's van de F-LEACH simulaties. Indien meerdere waarden beschikbaar zijn voor een parameterwaarden werd steeds de mediane waarde geselecteerd.

PFAS	Henry-coëfficiënt (dimensieloos)	Bron Henry-coëfficiënt	Oplosbaarheid (µg/l)	Bron oplosbaarheid	Diffusie-coëfficiënt lucht-water (m²/jaar)	Bron diffusie-coëfficiënt
PFBA	1,53E-03	Van Holderbeke et al., 2024	306000	Van Holderbeke et al., 2024	182,865	Van Holderbeke et al., 2024
PFPeA	9,32E-04	ITRC, 2025	120226443,5	ITRC, 2025		
PFHxA	2,63E-03	ITRC, 2025	22000000	Pancras et al., 2018		
PFHpA	5,62E-03	ITRC, 2025	4200000	Pancras et al., 2018		
PFOA	2,04E-02	Pancras et al., 2018	9500000	EPA, 2016		
PFNA	7,59E-02	ITRC, 2025	9500000	Pancras et al., 2018		
PFDA	3,55E-01	ITRC, 2025	9500000	Pancras et al., 2018		
PFUnDA	1,35E-08	EPA, 2025	2389365,536	ITRC, 2025		
PFDoDA	1,63E-01	ITRC, 2025	520000	ITRC, 2025		
PFTTrDA	1,41E-08	EPA, 2025	16801,9577	EPA, 2025		
PFTeDA	1,45E-08	EPA, 2025	3619	ITRC, 2025		
PFHxDA	1,52E-08	EPA, 2025	7172,50292	EPA, 2025		
PFODA	5,62E-09	EPA, 2025	7662,82284	EPA, 2025		
PFBS	1,38E-03	ITRC, 2025	50000000	Pancras et al., 2018		
PFPeS	8,83E-09	ITRC, 2025	460206450	ITRC, 2025		
PFHxS	2,48E-03	ITRC, 2025	2300000	Pancras et al., 2018		
PFHpS	7,32E-09	ITRC, 2025	234434585	ITRC, 2025		
PFOS	1,80E-07	Van Holderbeke et al., 2024	370000	Van Holderbeke et al., 2024	122,93	Van Holderbeke et al., 2024
PFNS	7,52E-10	ITRC, 2025	383969800	ITRC, 2025		
PFDS	3,54E-02	ITRC, 2025	73200000	ITRC, 2025		
PFUnDS	1,38E-08	EPA, 2025	34718,01	EPA, 2025		
PFDoDS	1,41E-08	EPA, 2025	16033,664	EPA, 2025		

PFTTrDS	1,45E-08 EPA, 2025	2741749,992 ITRC, 2025	
4:2FTS	7,95E-07 ITRC, 2025	11216104,14 ITRC, 2025	
6:2FTS	7,04E-06 ITRC, 2025	557274,504 ITRC, 2025	
8:2FTS	1,49E-02 ITRC, 2025	104119,0771 ITRC, 2025	
10:2FTS	6,72E-05 ITRC, 2025	45314,85 EPA, 2025	
FOSA	5,13E-08 EPA, 2025	5166 ITRC, 2025	
MeFOSA	5,13E-08 EPA, 2025	373 ITRC, 2025	
EtFOSA	6,44E-09 EPA, 2025	193 ITRC, 2025	
MeFOSAA	3,05E-08 ITRC, 2025	987 ITRC, 2025	
EtFOSAA	1,19E-08 ITRC, 2025	672 ITRC, 2025	
6:2diPAP	5,91E-10 EPA, 2025	787,8294 Eichler & Little, 2020	
6:2/8:2diPAP	6,44E-10 EPA, 2025	4940,5656 EPA, 2025	
8:2diPAP	4,36E-09 EPA, 2025	1891,29537 EPA, 2025	
PFBSA	1,30E-08 ITRC, 2025	1626875,259 ITRC, 2025	
MePFBSA	1,29E-08 EPA, 2025	166590,48 EPA, 2025	
MePFBSAA	4,85E-09 EPA, 2025	3670871300 EPA, 2025	
PFHxSA	8,96E-09 ITRC, 2025	3707 ITRC, 2025	
HFPO-DA	1,15E-02 ITRC, 2025	5447000 ITRC, 2025	
DONA	2,21E-03 ITRC, 2025	1241400 ITRC, 2025	
PFECHS	1,12E-06 EPA, 2025	100282210 EPA, 2025	

BIJLAGE B

Tabel 8: Overzicht van de gemiddelde, minimale en maximale Log(Koc)-waarde voor de verschillende PFAS op basis van verschillende datasets. "ITRC alle data" omvat alle data die beschikbaar zijn in de ITRC dataset. "ITRC bodem" omvat enkel de data uit de ITRC dataset die op een bodemmatrix bepaald zijn. De dataset op basis van de OVAM studie zijn opgesplitst in de gegevens op basis van de bodem- en eluaatconcentraties enerzijds en de residu- en eluaatconcentraties anderzijds (zie rapport). Voor de PFAS met een * werd de ITRC-dataset aangevuld met de beschikbare waarden uit Nguyen et al., 2020. Voor de PFAS waarvoor in de OVAM dataset geen waarde beschikbaar is werd de Log(Koc)-waarde geschat op basis van het moleculair gewicht.

PFAS	ITRC alle data			ITRC bodem			data OVAM bodem/eluaat			data OVAM residu/eluaat			schatting o.b.v. moleculair gewicht
	gemiddelde	min	max	gemiddelde	min	max	gemiddelde	min	max	gemiddelde	min	max	gemiddelde
PFBA	2,21	-0,80	4,30	1,63	-0,80	2,76	3,12	2,08	3,95	2,42	1,71	3,62	4,21 4,71 5,71 6,71
PFPeA	2,28	0,70	4,20	1,83	0,70	2,59	3,11	2,14	3,94	2,27	1,45	3,94	
PFHxA	2,23	0,20	4,70	1,85	0,20	2,56	3,08	2,15	3,86	2,34	1,66	3,22	
PFHpA	2,38	-0,20	4,50	1,85	-0,20	2,82	3,10	2,18	3,74	2,36	1,71	3,64	
PFOA	2,74	0,04	5,00	2,29	0,04	3,77	3,16	2,32	3,95	2,57	1,74	3,47	
PFNA	3,17	0,62	5,40	2,64	0,62	3,90	3,23	2,54	4,06	2,78	2,10	3,29	
PFDA	3,72	1,50	5,50	3,31	1,50	5,50	3,52	3,12	4,01	3,21	2,67	3,84	
PFUnA	4,34	3,19	5,80	4,16	3,56	5,80	3,78	3,46	4,07	3,44	2,99	3,89	
PFDODA	4,31	3,57	5,60	4,26	3,80	5,50	4,03	3,68	4,46	3,94	3,28	4,60	
PFTTrDA	4,46	3,71	5,20	3,71	3,71	3,71							
PFTeDA	4,44	3,68	5,2	4,44	3,68	5,2							
PFHxDA													
PFODA													
PFBS	1,52	-0,70	3,20	1,20	-0,70	2,55	3,19	2,95	3,75	2,65	2,36	3,12	
PFPeS							3,33	2,88	3,85	2,84	2,25	3,58	
PFHxS	2,76	1,15	4,50	2,48	1,70	4,10	3,21	2,74	3,85	2,63	2,10	3,18	
PFHpS	3,90	2,90	4,50				3,33	2,93	3,97	2,64	2,37	2,83	
PFOS	3,38	1,20	5,60	3,13	1,20	5,30	3,28	1,50	3,88	2,83	1,37	3,51	

PFNS							3,53	3,34	3,73	3,07	2,87	3,22	
PFDS	3,75	3,53	4,03	3,83	3,63	4,03	3,72	3,42	4,10	3,51	3,21	4,06	
PFUnDS							3,77	3,58	3,89	3,89	3,37	4,78	
PFDoDS							4,48	4,10	4,86	4,38	3,77	4,99	
PFTTrDS							4,36	4,29	4,42	4,29	4,00	4,58	
4:2FTS													1,06
6:2FTS	3,55	2,20	4,90	2,71	2,62	2,80				2,37	1,58	3,13	
8:2FTS	3,71	3,65	3,77	3,71	3,65	3,77				3,15	2,32	3,80	
10:2FTS										4,36	4,26	4,46	
FOSA	4,50	3,30	6,00	4,69	4,07	6,00				2,92	1,39	4,00	
MeFOSA										3,58	3,17	4,67	
EtFOSA	3,90	3,90	3,90							3,75	3,21	4,73	
MeFOSAA	4,08	3,23	4,60							3,75	3,20	4,29	
EtFOSAA	4,34	3,23	4,80							3,42	2,41	4,85	
6:2diPAP													5,47
6:2/8:2diPAP													6,47
8:2diPAP													7,47
PFBSA										2,53	1,79	3,15	
MePFBSA													1,06
MePFBSAA													3,28
PFHxSA										2,64	2,11	3,05	
HFPO-DA	1,36	1,05	1,92	1,10	1,10	1,10							1,06
DONA	1,78	1,78	1,78	1,78	1,78	1,78							1,35
PFECHS										3,00	3,00	3,00	

vision on technology for a better world

