

**Fluorierte Verbindungen aus technischen Produkten der  
Papierindustrie – Evaluierung von Transformation,  
Verlagerung und Bildungspotential durch modernste  
analytische Methoden  
(FluorTECH)**

von

Frank Sacher<sup>1</sup>, Marc Guckert<sup>1</sup>, Birgit Körner<sup>1</sup>, Frank Thomas Lange<sup>1</sup>, Lukas Lesmeister<sup>1</sup>, Nadine Löffler<sup>1</sup>, Michael Merklinger<sup>1</sup>, Marco Scheurer<sup>1</sup>, Heico Schell<sup>1</sup>, Andreas Tiehm<sup>1</sup>, Nicole Zumbülte<sup>1</sup>, Christine Wernicke<sup>2</sup>, Theresa Döring<sup>2</sup>, Heidrun Paschke<sup>2</sup>, Jan Michael Kaesler<sup>2</sup>, Oliver Lechtenfeld<sup>2</sup>, Urs Berger<sup>2</sup>, Thorsten Reemtsma<sup>2</sup>, Rebecca Bauer<sup>3</sup>, Boris Bugsel<sup>3</sup>, Oliver Nied<sup>3</sup>, Markus Schmitt<sup>3</sup>, Melanie Schüßler<sup>3</sup>, Jonathan Zweigle<sup>3</sup>, Christian Zwiener<sup>3</sup>, Ludwig Gruber<sup>4</sup>, Christoph Sonnert<sup>4</sup>, Jörn Breuer<sup>5</sup>, Runa Boeddinghaus<sup>5</sup>, Maren Schultheiß<sup>5</sup>, Daniel Beiser<sup>5</sup>, Melanie Mechler<sup>5</sup>

<sup>1</sup>DVGW-Technologiezentrum Wasser (TZW), Karlsruhe

<sup>2</sup>Helmholtz Zentrum für Umweltforschung (UFZ), Leipzig

<sup>3</sup>Eberhard Karls Universität, Institut für Umweltanalytik, Tübingen

<sup>4</sup>Fraunhofer-Institut für Verfahrenstechnik und Verpackung (IVV), Freising

<sup>5</sup>Landwirtschaftliches Technologiezentrum Augustenberg (LTZ), Karlsruhe

Zuwendungsnummern: BWPFC19007 bis BWPFC19011

Laufzeit: 01.12.2018 – 30.11.2021

Die Arbeiten des Programms Lebensgrundlage Umwelt und ihre Sicherung werden mit  
Mitteln des Landes Baden-Württemberg gefördert

Juli 2022

## 1 Kurzbeschreibung der Forschungsergebnisse

Boden und Grundwasser im Raum Mittelbaden sind auf einer Fläche von weit über 1.000 Hektar mit per- und polyfluorierten Alkylsubstanzen (PFAS) verunreinigt. Durch die Kontamination sind Wasserversorger, die das Grundwasser in der Region zur Trinkwassergewinnung nutzen, ebenso beeinträchtigt wie landwirtschaftliche Betriebe, da PFAS auch in Produkten, die auf belasteten Flächen erzeugt wurden, nachgewiesen werden konnten. Nach derzeitigem Kenntnisstand ist die Ausbringung von mit Papierschlämmen vermischtem Kompost eine wichtige Ursache der Kontamination.

Übergeordnetes Ziel des Projekts FluorTECH war die Aufklärung und Zuordnung der möglichen Quellen der PFAS-Belastung im Raum Mittelbaden sowie eine Vorhersage der zukünftigen Entwicklungen der Kontamination von Grundwasser und landwirtschaftlichen Erzeugnissen. Hierzu wurden umfangreiche Versuche zur Untersuchung von Umwandlung, Transport und Transferverhalten von PFAS mit Papierschlämmen, die mit drei fluorhaltigen Papierhilfsmitteln dotiert wurden, durchgeführt. Es wurde jeweils ein technisches Produkt auf Basis von polyfluorierten Alkylphosphaten (PAP), Polyacrylaten und Polyethern eingesetzt. Die Papierhilfsmittel wurden in einem definierten Verhältnis mit Papierschlamm gemischt und für die Versuche genutzt, um die realen Verhältnisse möglichst gut abzubilden.

Die wesentlichen Erkenntnisse aus dem Projekt FluorTECH sind im Folgenden zusammengefasst:

- Versuche mit technischen Produkten liefern gegenüber Ansätzen mit kommerziellen Standards von Einzelstoffen einen deutlichen Mehrwert; durch die Kombination beider Ansätze lassen sich praxisrelevante Informationen zum Verständnis des Verhaltens von kommerziellen Stoffmischungen in der Umwelt und der ablaufenden Prozesse gewinnen.
- In Gefäßversuchen mit Salat und Sommerweizen wurde nachgewiesen, dass Vorläufer-substanzen aus technischen Produkten im Boden perfluorierte Carbonsäuren (PFCA) bilden, die in Pflanzen aufgenommen werden. Im Kulturpflanzenversuch zeigte sich über die drei Versuchsjahre hinweg eine dauerhafte Bildung von PFCA und ihre Aufnahme in Salat- und Sommerweizenpflanzen, die zum Ende des Versuchszeitraumes noch nicht abgeschlossen war. Es wurden insbesondere PFCA mit Kettenlängen zwischen C4 und C8 in den Pflanzen nachgewiesen, wobei die gemessenen Konzentrationen eine hohe zeitliche Variabilität aufwiesen. Dabei fand eine stärkere Einlagerung von PFCA in die Blätter und die Spindel/Spelzen des Sommerweizens statt als in die Halme und Körner. Sowohl beim Salat als auch beim Sommerweizen wurden die höchsten Konzentrationen an PFCA in den Versuchen mit dem PAP-basierten Produkt gefunden. Auch bei dem Polyacrylat-basierten Produkt wurden positive Befunde in den Pflanzen erhalten. Salat zeigte eine stärkere Anreicherung von PFCA als Sommerweizen, was bei der Kulturauswahl beim Anbau auf PFAS-belasteten Böden beachtet werden sollte.
- Durch die Anwendung des TOP-Assays konnte gezeigt werden, dass oxidierbare Vorläufer in verschiedenen Pflanzenteile aufgenommen wurden, die nicht durch die Targetanalytik erfasst werden. Allerdings sind die Konzentrationen sehr gering. Um welche PFAS es sich

bei den Vorläufern handelt und ob sie toxikologisch relevant sind, sollte Gegenstand zukünftiger Studien sein.

- Die Analyse von geschälten und ungeschälten Pfahlwurzeln von Rapspflanzen zeigte, dass eine Aufnahme von Vorläufersubstanzen ins Wurzelinnere nicht stattfindet. Die Gehalte an langkettigen PFAS und Vorläuferverbindungen in Wurzeln in verschiedenen Versuchen sind in erster Linie auf nicht mit bloßem Auge sichtbaren Bodenanhäufungen oder Einlagerung der Substanzen in die äußersten Zellschichten der Wurzel zurückzuführen.
- Im Phytotronversuch wurde ein deutlicher Temperatureinfluss auf die Transformation von Vorläuferverbindungen zu PFCA und die Aufnahme der PFCA in Weidelgras nachgewiesen. Mit einer höheren Umgebungstemperatur wurden höhere PFCA-Gehalte ermittelt. Der Bodenfeuchtegehalt erwies sich ebenfalls als relevant, war allerdings weniger einflussreich als die Temperatur. Im Gegensatz zum Phytotronversuch konnte im Inkubationsversuch kein Temperatureffekt nachgewiesen werden. Im Dunkeln und ohne Pflanzenbewuchs fand keine relevante Transformation der Vorläuferverbindungen zu PFCA statt. Dies deutet auf einen Einfluss der Pflanzenwurzeln auf die Transformation der Vorläufersubstanzen hin und gibt erste Hinweise auf co-metabolische Abbauprozesse. Die zahlreichen Einflussfaktoren machen Vorhersagen des Transfers Boden-Pflanze für PFAS schwierig.
- Bei der Untersuchung von Bodenproben aus dem Raum Mittelbaden konnte der deutliche Einfluss des Probennahmezeitpunktes auf die im Boden detektierten PFAS-Gehalte gezeigt werden. Für vergleichbare Ergebnisse empfiehlt sich daher die Entnahme der Bodenproben zu ähnlichen Zeitpunkten. Ein Einfluss von Bodeneigenschaften wie pH-Wert, austauschbare Kationen oder Gehalt an Eisen-, Mangan- und Aluminiumoxiden auf die Verlagerung von PFAS in tiefere Bodenschichten war ebenfalls ersichtlich. Die Einflüsse scheinen abhängig von der Kettenlänge der PFAS zu sein.
- Säulenversuche zum Transport von PFAS durch die ungesättigte Zone und ihrer Transformation zeigten eine signifikante Freisetzung von PFCA aus dem PAP-haltigen und dem Polyacrylat-haltigen Produkt über das Elutionswasser. Bei beiden Produkten wurden zunächst kurzkettige PFCA (C4 und C5), später auch länger-kettige PFCA (bis C8) freigesetzt. Bei dem Polyacrylat-haltigen Produkt erfolgte die PFCA-Freisetzung deutlich später als bei dem PAP-haltigen Produkt; die im Elutionswasser gemessenen Konzentrationen waren viel geringer. Bei dem Polyether-haltigen Produkt konnten keine PFAS im Elutionswasser detektiert werden. Bei niedrigen Temperaturen war die PFAS-Freisetzung signifikant reduziert. Die Untersuchung der Böden nach Versuchsende zeigte, dass auch nach einer Versuchsdauer von nahezu drei Jahren weiterhin ein großes Reservoir an Vorläuferverbindungen in den Böden enthalten ist. Aus diesem Ergebnis lässt sich eine lange Dauer der Belastung mit entsprechender PFAS-Freisetzung ableiten.
- Ergänzende Untersuchungen in Mikrokosmen mit Oberboden aus Mittelbaden bestätigten die Ergebnisse der Säulenversuche. In den Ansätzen mit dem PAP-haltigen und dem Polyacrylat-haltigen Produkt wurde jeweils eine Freisetzung von PFCA mit Kettenlängen zwischen C4 und C8 beobachtet, während bei dem Polyether-haltigen Produkt keine

signifikante PFCA-Bildung nachgewiesen werden konnte. Auch der Temperatureffekt konnte durch die Mikrokosmenstudien bestätigt werden. Zugesezte potentielle Co-Substrate zeigten keinen signifikanten Effekt auf die Freisetzung der PFCA. Vermutlich überlagert die komplexe Matrix des eingesetzten Oberbodens den Einfluss der Zusatzstoffe.

- Durch Abbauprobieren mit simuliertem Sonnenlicht konnte gezeigt werden, dass Vorläuferverbindungen wie diPAP auch durch indirekte Photolyse auf Bodenpartikeln transformiert werden. Die gebildeten Transformationsprodukte können sich dabei von den Produkten eines mikrobiellen Abbaus unterscheiden. Bei der Bestrahlung des PAP-haltigen und des Polyacrylat-haltigen Produkts werden PFCA gebildet, während bei dem Polyether-haltigen Produkt keine Bildung perfluorierter Carbonsäuren auftritt.
- Die elektrochemische Oxidation von Vorläufern kann für die Charakterisierung des Bildungspotenzials von PFCA eingesetzt werden. Bei PAP-haltigen und Polyacrylat-haltigen Produkten kommt es zur Bildung von PFCA. Die Versuche belegen die Bedeutung von OH-Radikalen für die Umwandlung von Vorläuferverbindungen.
- Das Non-Target-Screening stellt einen interessanten und neuen analytischen Ansatz dar, mit dem bislang unbekannte Gruppen von PFAS identifiziert oder zumindest charakterisiert werden können und der wertvolle Hinweise auf die Ursache einer Kontamination liefern kann. Die Analyse mittels Flüssigchromatographie und hochauflösender Massenspektrometrie wird dabei gekoppelt mit intelligenten Auswerteverfahren und der Nutzung von Datenbanken, die im Falle der PFAS bereits Informationen für eine Vielzahl an Einzelstoffen enthalten. So konnte durch Anwendung des Non-Target-Screenings auf Böden aus dem Raum Rastatt/Baden-Baden gezeigt werden, dass die Kontamination mit diPAP eine deutlich größere Palette an Einzelstoffen umfasst als bislang bekannt war. Ein wesentlicher Grund hierfür ist die eingeschränkte Verfügbarkeit von Referenzmaterialien, die für die Einzelstoffanalytik unverzichtbar sind. Mittels Non-Target-Analytik wurden in den Bodenproben diPAP-Homologe zwischen 4:2 6:2 und 12:2 14:2 identifiziert.
- In einer Bodenprobe aus dem Raum Mannheim wurden mittels Non-Target-Screening erstmals Vertreter aus der Substanzklasse der Fluortelomer-Mercapto-Alkylphosphate (FTMAP) identifiziert. Durch Synthese eines Standards für 6:2 6:2 FTMAP konnte die Identität dieser Verbindung eindeutig bestätigt werden.
- Das Non-Target-Screening ermöglicht auch den Vergleich von Verteilungsmustern für Homologe zwischen belasteten Bodenproben und imprägnierten Papieren. So konnte gezeigt werden, dass für verschiedene Substanzklassen vergleichbare Verteilungen erhalten werden, was einen wichtigen Hinweis auf die Ursache der Kontamination gibt.
- Die ultrahochauflösende Fouriertransformation-Ionencyklotronresonanz-Massenspektrometrie (FT-ICR-MS) ist eine moderne Analysetechnik, mit der sich eine Vielzahl an Einzelverbindungen in einer Messung erfassen lassen. Im Projekt wurden Multimethoden entwickelt, mit denen sich PFAS – beispielsweise Zwischenprodukte des biologischen Abbaus – in Wasser, Boden und Pflanzen identifizieren und semi-quantitativ bestimmen lassen. Darüber hinaus bietet die Technologie die Möglichkeit exakte Molekülmassen zu

ermitteln und in einem sogenannten Suspect-Screening mit Kandidaten aus einer umfassenden PFAS-Datenbank zu vergleichen. In dem optimierten Analyse- und Auswerteverfahren werden die Befunde mithilfe einer semi-automatisierten Validierung näher charakterisiert und mit unterschiedlichen Zuverlässigkeiten identifiziert.

- Die  $^{19}\text{F}$ -NMR-Spektroskopie bietet die interessante Möglichkeit den Gehalt an organischen Fluorverbindungen in Bodenproben zerstörungsfrei und ohne vorherige Extraktion und damit ohne Diskriminierung der Analyten zu bestimmen. Die Anwendung des Verfahrens auf eine Bodenprobe aus der Region Mittelbaden ergab, dass die Belastung mit organischen Fluorverbindungen deutlich höher ist als aufgrund der Ergebnisse der Einzelstoffanalytik oder anhand summarischer Parameter, die nach methanolischer Extraktion ermittelt wurden, anzunehmen war. In dem konkreten Anwendungsfall beträgt der nicht extrahierbare Organofluor-Anteil etwa 90 %. Über die Identität oder Relevanz dieses nicht-extrahierbaren Anteils liegen derzeit keine Erkenntnisse vor. Weitere Untersuchungen mit dieser zeit- und kostenintensiven Analysentechnik sollten folgen, um einen Überblick über die tatsächliche Belastung der Böden in der Region Mittelbaden zu erhalten und um die Relevanz der nicht-extrahierbaren Rückstände beurteilen zu können.
- Der TOP-Assay hat sich im FluorTECH-Projekt als wertvoller Parameter zur Beschreibung der Gehalte an Vorläuferverbindungen in Bodenproben erwiesen. Zur Analyse von Feststoffen wird standardmäßig zunächst ein methanolischer Extrakt hergestellt, der dann mit dem Oxidationsmittel in Kontakt gebracht wird. Diese Vorgehensweise hat den Nachteil, dass nur die mit Methanol extrahierbaren organischen Fluorverbindungen erfasst werden. Aus diesem Grund erfolgten Versuche zur direkten Oxidation der Feststoffproben. Diese zeigten allerdings, dass aufgrund der hohen Salzfracht, die bei der Anwendung des TOP-Assays entsteht, die Durchführung für jede Matrix und somit für jede Probe aufwendig angepasst werden muss, da ansonsten die Ergebnisse nicht miteinander vergleichbar sind. Aus diesem Grund wird derzeit die Verwendung des TOP-Assays nach methanolischer Extraktion bevorzugt. Aufgrund der Limitierungen, die sich aus der Extraktion mit Methanol ergeben, sollten allerdings weitere Untersuchungen zur Optimierung des direkten TOP-Assays folgen.
- Untersuchungen zur Probenvorbereitung zeigten, dass die Trocknung von Bodenproben einen deutlichen Einfluss auf die PFAS-Gehalte im wässrigen Eluat hat. Häufig führt die Trocknung zu höheren Eluat-Gehalten. Der Effekt scheint bei gering belasteten Böden ausgeprägter zu sein als bei Böden aus kontaminierten Flächen. Bei der Bestimmung der Feststoffgehalte nach methanolischer Extraktion treten vergleichbare Effekte nach derzeitigem Kenntnisstand nicht auf. Als mögliche Ursache kommen physikalisch-chemische Prozesse bei der Trocknung der Böden in Frage. Die Ergebnisse belegen die Notwendigkeit zur Standardisierung der Probenvorbereitung bei der Herstellung wässriger Eluate.
- Um die Leistungsfähigkeit verschiedener Labore hinsichtlich der PFAS-Analytik in unterschiedlichen Matrices und die Vergleichbarkeit der erhaltenen Analysenergebnisse besser beurteilen zu können, wurde eine Vergleichsuntersuchung mit 14 Laboren durchgeführt. Die Auswertung der Ergebnisse zeigte, dass die Bestimmung der PFAS in Wasser- und

Bodenproben inzwischen ein etabliertes Verfahren ist, das viele Labore durchführen und bei dem eine gute Vergleichbarkeit der Ergebnisse erzielt wird. Unterschiede zwischen Laboren betreffen die Palette der analysierten Einzelstoffe. Während perfluorierte Carbon- und Sulfonsäuren von fast allen teilnehmenden Laboren analysiert wurden, wird die Analytik der Vorläufer und Zwischenabbauprodukten nur von einer begrenzten Anzahl an Laboren durchgeführt. Dasselbe gilt für die PFAS-Analytik in pflanzlichem Material, die auch nur von wenigen Laboren angeboten wird. Hier kommen keine „Routine-Verfahren“ zur Anwendung und die Standardabweichungen liegen mit Werten zwischen 50 und 100% deutlich über den Werten, die für Wasser- oder Bodenproben erhalten werden. Die Anwendung des TOP-Assays ist noch weit davon entfernt routinemäßig von einer größeren Anzahl an Laboren angeboten zu werden. Die Standardabweichungen zwischen den Werten verschiedener Labore liegen auch hier im Bereich von 50 bis 100%. Forschungsbedarf besteht hinsichtlich der Anwendung des TOPdirekt-Assays.

Als Fazit des Projekts FluorTECH lässt sich festhalten: Die Ursache für die Belastung der Flächen im Raum Rastatt/Baden-Baden mit PFAS lässt sich auch nach Abschluss des Projekts nicht eindeutig und zweifelsfrei benennen. Es gibt deutliche Hinweise, dass PAP-haltige Produkte den wesentlichen Anteil an der Kontamination darstellen. Sowohl die Versuche mit Mikrokosmen und Bodensäulen als auch die Laborexperimente zur Bestrahlung und elektrochemischen Oxidation sowie Aufwuchsversuche mit Salat und Sommerweizen liefern eindeutige Belege, dass eine Kontamination des Bodens mit PAP-haltigen technischen Produkten zu einer Freisetzung von perfluorierten Carbonsäuren und in der Folge zu einem Eintrag in das Grundwasser und in die landwirtschaftlichen Produkte führt. Dieses Ergebnis wird durch einen Vergleich der Belastungsmuster von Boden und imprägnierten Papieren mittels Non-Target-Analytik weiter bestätigt.

Die Versuche haben auch gezeigt, dass nicht nur Produkte auf Basis von PAP, sondern auch technische Produkte, die fluorierte Polyacrylate enthalten, zu einer Freisetzung und einem Transfer von perfluorierten Carbonsäuren führen. Die Umwandlung verläuft zwar deutlich langsamer als bei den PAP-basierten Produkten, kann aber dennoch in der Region Mittelbaden nicht ausgeschlossen werden. Für Polyether-basierte Produkte wurde eine entsprechende Transformation nicht festgestellt. Aus diesem Ergebnis kann allerdings nicht geschlussfolgert werden, dass eine Belastung des Bodens mit Vertretern dieser Substanzklasse nicht vorliegt.

## **2 Welche Fortschritte ergeben sich für die Wissenschaft und/oder Technik durch die Forschungsergebnisse?**

Im Projekt FluorTECH wurden unterschiedlichste Versuche zum Umweltverhalten von PFAS-Vorläuferverbindungen mit Papierschlämmen, die mit fluorhaltigen Papierhilfsmitteln dotiert worden waren, durchgeführt. Die Ergebnisse des Projekts belegen klar, dass Versuche mit technischen Produkten gegenüber Ansätzen mit kommerziellen Standards von Einzelstoffen einen deutlichen Mehrwert liefern. Durch die Kombination beider Ansätze lassen sich praxisrelevante Informationen zum Verständnis des Verhaltens von kommerziellen Produkten in der Umwelt und zu den ablaufenden Prozessen gewinnen.

Darüber hinaus lieferte FluorTECH eine Reihe von wichtigen wissenschaftlichen Erkenntnissen zum Umweltverhalten von technischen Produkten auf der Basis von polyfluorierten Alkylphosphaten (PAP), fluorierten Polyacrylaten und fluorierten Polyethern. Es wurde gezeigt, dass Produkte auf der Basis von polyfluorierten Alkylphosphaten und fluorierten Polyacrylaten perfluorierte Carbonsäuren freisetzen können, die in der Folge zu einer Kontamination des Grundwassers führen und auch von pflanzlichen Erzeugnissen aufgenommen werden können. Für Produkte auf Basis von fluorierten Polyethern hingegen wurde eine solche Freisetzung nicht beobachtet.

Die Ergebnisse aus FluorTECH tragen auch zu einem besseren Verständnis des Transfers von PFAS aus dem Boden in Pflanzen oder Pflanzenteile bei. Die Bedeutung verschiedener Einflussfaktoren wurde in experimentellen Untersuchungen beleuchtet, um den komplexen Prozess besser verstehen zu können.

Mit dem TOP-Assay, dem Non-Target-Screening, der ultrahochauflösenden Fouriertransformation-Ionencyklotronresonanz-Massenspektrometrie oder der  $^{19}\text{F}$ -NMR-Spektroskopie wurden in dem Projekt analytische Instrumente eingesetzt, die wertvolle Erkenntnisse zur Charakterisierung der PFAS-Belastung im Raum Mittelbaden lieferten und die zukünftig in Zusammenhang mit der wissenschaftlichen Untersuchung von PFAS-Schadensfällen an Bedeutung gewinnen werden.

Es ist auch davon auszugehen, dass die aus der Anwendung der  $^{19}\text{F}$ -NMR-Spektroskopie resultierenden Erkenntnisse zu den nicht-extrahierbaren Rückständen von PFAS Anlass zu nachfolgenden Forschungsaktivitäten bieten werden, in denen Identität und Relevanz dieser Rückstände näher beleuchtet werden.

Die Ergebnisse aus FluorTECH zum Einfluss der Trocknung auf die PFAS-Gehalte in wässrigen Eluaten von Bodenproben werden ebenfalls zukünftige Forschungsaktivitäten auf diesem Gebiet beeinflussen, indem sie die Bedeutung der Probenvorbereitung gerade für Substanzen wie den PFAS deutlich gemacht haben.

### **3 Nutzen, insbesondere praktische Verwertbarkeit der Ergebnisse und Erfahrungen**

Das Projekt FluorTECH wurde in enger Abstimmung mit den zuständigen Umweltbehörden im Raum Rastatt/Baden-Baden sowie Vertretern des Umweltministeriums Baden-Württemberg und des Regierungspräsidiums Karlsruhe durchgeführt. Die wissenschaftlichen Erkenntnisse aus FluorTECH haben damit unmittelbar Eingang in die Arbeit der Behördenvertreter gefunden.

Auch wenn die Ergebnisse aus FluorTECH es nicht ermöglichen, die Ursache der PFAS-Kontamination im Raum Mittelbaden eindeutig und zweifelsfrei zu benennen, lieferten die durchgeführten Versuche und Messungen wichtige Erkenntnisse, die durch die zuständigen Behörden für eine Eingrenzung bei der Suche nach dem Verursacher genutzt werden können. So konnten technische Produkte identifiziert werden, die als mögliche Ursache der heutigen Belastung in Frage kommen. Auch die Randbedingungen, unter denen eine Transformation der Vorläuferverbindungen aus den technischen Produkten erfolgt, können aufgrund der Projektergebnisse klar benannt werden. Das Resultat aus FluorTECH, dass die Vorläuferverbindungen sich insbesondere in der oberen Bodenschicht befinden und i. d. R. wenig mobil sind, ist ein wichtiges Element, wenn es um die Festlegung zukünftiger Sanierungsstrategien geht.

Darüber hinaus lassen sich aus den Ergebnissen des Projekts Empfehlungen zum Monitoring von ausgewählten PFAS in unterschiedlichen Kompartimenten (Grundwasser, Boden, pflanzliches Material) ableiten. Hierdurch ist es möglich, die analytische Überwachung auf relevante Parameter zu reduzieren und damit Kosten zu sparen, ohne auf wichtige Informationen verzichten zu müssen. Das in FluorTECH angewendete analytische Instrumentarium liefert zudem wichtige Informationen, die für die Ableitung zukünftiger Untersuchungsprogramme genutzt werden können.

Die Erkenntnisse aus FluorTECH zur Komplexität des Transfers von PFAS vom Boden in die Pflanze und zur Vielzahl der Einflussfaktoren hat die Entscheidung der Behörden zur Durchführung eines Vorernte-Monitorings weiter bekräftigt.

Abschließend sei darauf verwiesen, dass die wissenschaftlichen Untersuchungskonzepte, die im Raum Rastatt/Baden-Baden zur Anwendung kommen, zukünftig auch in anderen Regionen, in denen eine Belastung der Flächen mit PFAS festgestellt wird, wertvolle Anregungen für die zuständigen Behörden liefern werden.

#### **4 Konzept zum Ergebnis- und Forschungstransfer auch in projektfremde Anwendungen und Branchen**

Die Erkenntnisse aus dem FluorTECH-Projekt wurden im Rahmen der regelmäßigen Treffen mit dem Projektbeirat präsentiert und ausführlich diskutiert. Darüber hinaus fand ein regelmäßiger Austausch mit Vertretern der zuständigen Umweltbehörden im Raum Rastatt/Baden-Baden und der LUBW statt. Schließlich erfolgte der Transfer der Ergebnisse aus FluorTECH über wissenschaftliche Veröffentlichungen und Präsentationen auf wissenschaftlichen Tagungen. Beispiele für wichtige Veröffentlichungen zu den Projektergebnissen aus FluorTECH sind die folgenden Publikationen:

- Bugsel, B.; Zwiener, C. (2020): LC-MS screening of poly- and perfluoroalkyl substances in contaminated soil by Kendrick mass analysis. *Anal. Bioanal. Chem.* 412(20), 4797-4805. DOI: 10.1007/s00216-019-02358-0.
- Bugsel, B.; Bauer, R.; Herrmann, F.; Maier, M. E., Zwiener, C. (2022) LC-HRMS screening of per- and polyfluorinated alkyl substances (PFAS) in impregnated paper samples and contaminated soils. *Anal Bioanal Chem* 414 (3):1217-1225
- Janda, J.; Nödler, K.; Scheurer, M.; Happel, O.; Nürnberg, G.; Zwiener, C.; Lange, F. T. (2019): Closing the gap - inclusion of ultrashort-chain perfluoroalkyl carboxylic acids in the total oxidizable precursor (TOP) assay protocol. *Environ. Sci.: Processes Impacts* 21, 1926-1935. DOI: 10.1039/c9em00169g.
- Muschket, M.; Keltsch, N.; Paschke, H.; Reemtsma, T.; Berger, U. (2020): Determination of transformation products of per- and polyfluoroalkyl substances at trace levels in agricultural plants. *J. Chromatogr. A* 1625, 461271. DOI: 10.1016/j.chroma.2020.461271.
- Zweigle, J.; Bugsel, B.; Schmitt, M., Zwiener, C. (2021): Electrochemical oxidation of 6:2 polyfluoroalkyl phosphate diester - Simulation of transformation pathways and reaction kinetics with hydroxyl radicals. *Environ. Sci. Technol.* 55(16), 11070-11079.