Amtsblatt
der Europäischen Union

DE
Reihe C

C/2024/4910

7.8.2024

Bekanntmachung der Kommission

Technische Leitlinien bezüglich der Analyseverfahren zur Überwachung der per- und polyfluorierten Alkylsubstanzen (PFAS) in Wasser für den menschlichen Gebrauch

(C/2024/4910)

Inhalt

Buchseite

Abkürzungen 1

1. Einführung 3

2. Bestimmungen der Trinkwasserrichtlinie über die Überwachung von PFAS 3

2.1. *Parameterwerte* 3

2.2. *Nachweisgrenzen (Bestimmungsgrenze)* 3

2.3. *Häufigkeit der Probennahmen* 4

3. Analyseverfahren zur Überwachung der „Summe der PFAS“ 4

3.1. *Anwendungsbereich der Verfahren* 4

3.2. *Analyseverfahren* 5

3.3. *Leistungskriterien für die Analyseverfahren* 6

3.3.1. Bestimmungsgrenze 6

3.3.2. Messunsicherheit 6

4. Analyseverfahren für die Überwachung von „PFAS gesamt“ 6

4.1. *Anwendungsbereich der Verfahren* 6

4.2. *Analyseverfahren* 6

4.2.1. Ersatzweise herangezogene Verfahren (Proxy-Verfahren) für „PFAS gesamt“ 7

4.2.2. Analysebericht über „PFAS gesamt“ 8

5. Verweise 8

Abkürzungen ([1])

PFAS	per- und polyfluorierte Alkylsubstanzen

Anionische PFAS

PFAAs	Perfluoralkansäuren
PFCAs	Perfluoralkancarbonsäuren
TFA	Trifluoracetat, auch häufig Abkürzung für Trifluoressigsäure (TFAA)
PFPrA	Perfluorpropansäure
PFBA	Perfluorbutansäure
PFPeA	Perfluorpentansäure
PFHxA	Perfluorhexansäure

([1]) Für PFAS wurde – soweit anwendbar – die Nomenklatur der OECD (2021) [1] angewandt.

PFHpA	Perfluorheptansäure
PFOA	Perfluoroctansäure
PFNA	Perfluornonansäure
PFDA	Perfluordecansäure
PFUnDA	Perfluorundecansäure
PFDoDA	Perfluordodecansäure
PFTrDA	Perfluortridecansäure
PFSAs	Perfluoralkansulfonsäuren
TFMS	Trifluormethansulfonsäure
PFEtS	Perfluorethansulfonsäure
PFPrS	Perfluorpropansulfonsäure
PFBS	Perfluorbutansulfonsäure
PFPeS	Perfluorpentansulfonsäure
PFHxS	Perfluorhexansulfonsäure
PFHpS	Perfluorheptansulfonsäure
PFOS	Perfluoroctansulfonsäure
PFNS	Perfluornonansulfonsäure
PFDS	Perfluordecansulfonsäure
PFUnDS	Perfluorundecansulfonsäure
PFDoDS	Perfluordodecansulfonsäure
PFTrDS	Perfluortridecansulfonsäure

Weitere Abkürzungen

CIC	Verbrennungs-Ionenchromatographie (Combustion ion chromatography)
Trinkwasser-richtlinie	Richtlinie (EU) 2020/2184
EK	Europäische Kommission
EFSA	Europäische Behörde für Lebensmittelsicherheit (European Food Safety Authority)
EOF	Extrahierbare organische Fluorverbindungen
GC	Gaschromatografie
HRMS	Hochauflösende Massenspektrometrie (High resolution mass spectrometry)
ISO	Internationale Organisation für Normung (International Organization for Standardization)
LC	Flüssigchromatographie (Liquid chromatography)
MS	Massenspektrometrie
MS/MS	Tandem-Massenspektrometrie
SPE	Festphasenextraktion (Solid phase extraction)
TOP-Assay	Total Oxidisable Precursor Assay

1. **Einführung**

Mit der Richtlinie (EU) 2020/2184 des Europäischen Parlaments und des Rates vom 16. Dezember 2020 über die Qualität von Wasser für den menschlichen Gebrauch (Neufassung) ([2]) (im Folgenden „Richtlinie“ oder „Trinkwasserrichtlinie“), die am 12. Januar 2021 in Kraft getreten ist, wurden Parameter und Parameterwerte für per- und polyfluorierte Alkylsubstanzen (PFAS) eingeführt. Diese Werte liegen bei 0,50 µg/l (500 ng/l) für den Parameter „*PFAS gesamt*“ und bei 0,10 µg/l (100 ng/l) für den Parameter „*Summe der PFAS*“, der eine Liste von 20 PFAS einschließt ([3]). Die Mitgliedstaaten müssen diese Parameter bis zum 12. Januar 2026 erfüllen ([4]). In ihrem nationalen Recht können sie zur Umsetzung dieser Richtlinie strengere Werte oder zusätzliche Parameter festlegen.

Im Einklang mit Artikel 13 Absatz 7 der Trinkwasserrichtlinie und auf der Grundlage einer eingehenden Konsultation der Mitgliedstaaten werden in diesem Dokument die **technischen Leitlinien für die Analyseverfahren zur Überwachung der PFAS unter den mit der Neufassung der Trinkwasserrichtlinie festgelegten Parametern *„PFAS gesamt“* und *„Summe der PFAS“*** festgelegt. Diese technischen Leitlinien umfassen eine Auswahl an Analyseverfahren und -ansätzen, die für die Überwachung dieser Parameter auf der Grundlage einer technischen und sozioökonomischen Bewertung als am besten geeignet erachtet werden.[3]

Die in der Liste des Parameters „*Summe der PFAS*“ aufgeführten Stoffe sind in Anhang III Teil B Absatz 3 der Richtlinie enthalten.

Der Parameter „*PFAS gesamt*“ wird in Anhang I der Richtlinie als „*Gesamtheit der per- und polyfluorierten Alkylsubstanzen*“ definiert.

EU-weit steigt die Zahl der Fälle hoher PFAS-Konzentrationen in Frischwasser, einschließlich Trinkwasser. Die Europäische Kommission ermutigt die Mitgliedstaaten daher, diese Leitlinien rasch umzusetzen, um die Umsetzung der Überwachung von PFAS zu beschleunigen und Maßnahmen zu konzipieren, um die Parameter der Trinkwasserrichtlinie einzuhalten.

2. **Bestimmungen der Trinkwasserrichtlinie über die Überwachung von PFAS**

In Artikel 13 Absatz 7 der Richtlinie ist festgelegt, dass „*die Kommission technische Leitlinien bezüglich der Analyseverfahren zur Überwachung der per- und polyfluorierten Alkylsubstanzen im Rahmen der Parameter ‚PFAS gesamt‘ und ‚Summe der PFAS‘ fest [legt], einschließlich Nachweisgrenzen, Parameterwerten und Häufigkeit der Probennahmen*“.

Die Anforderung für Nachweisgrenzen, Parameterwerte und Häufigkeit der Probennahmen werden nachstehend erläutert.

2.1. ***Parameterwerte***

Die Parameterwerte sind in Anhang I Teil B der Richtlinie festgelegt:

— „*PFAS gesamt*“	= 0,50 µg/l
— „*Summe der PFAS*“	= 0,10 µg/l

Diese Parameterwerte müssen bis zum 12. Januar 2026 an der Stelle der Einhaltung gemäß Artikel 6 der Richtlinie eingehalten werden.

2.2. ***Nachweisgrenzen (Bestimmungsgrenze)***

Mindestanforderung ist, dass die Bestimmungsgrenze 30 % oder weniger des Parameterwerts beträgt. Diese Anforderung wird in Anhang III Teil B der Richtlinie unter Bezugnahme auf die Bestimmung des Begriffs „Bestimmungsgrenze“ in Artikel 2 Nummer 2 der Richtlinie 2009/90/EG der Kommission[4] festgelegt.

([2]) Richtlinie (EU) 2020/2184 des Europäischen Parlaments und des Rates vom 16. Dezember 2020 über die Qualität von Wasser für den menschlichen Gebrauch (Neufassung) (ABl. L 435 vom 23.12.2020, S. 1).

([3]) Die Parameter und Parameterwerte für PFAS sind in Anhang I Teil B der Trinkwasserrichtlinie enthalten. Die Liste der in der „*Summe der PFAS*“ enthaltenen PFAS ist in Anhang III Teil B Absatz 3 aufgeführt.

([4]) Artikel 25 der Neufassung der Trinkwasserrichtlinie.

Das heißt, dass die Bestimmungsgrenze für den Parameter „*Summe der PFAS*“ bei maximal 30 ng/l (0,03 µg/l) und für den Parameter „*PFAS gesamt*“ bei maximal 150 ng/l (0,15 µg/l) liegen sollte. Der Begriff „Bestimmungsgrenze“ wird in Artikel 2 Nummer 2 der Richtlinie 2009/90/EG der Kommission definiert als „ein festgelegtes Vielfaches der Nachweisgrenze bei einer Konzentration des Analyten, die mit einem akzeptablen Maß an Richtigkeit und Genauigkeit bestimmt werden kann. Die Bestimmungsgrenze kann mithilfe eines geeigneten Standards oder einer Probe berechnet und anhand des untersten Kalibrierpunkts auf der Kalibrierkurve ohne Leerprobe bestimmt werden“.

Die Bestimmungsgrenze (oder Nachweisgrenze) kann nur für einzelne Stoffe in akzeptablem Maß berechnet werden. Da die Parameterwerte für den Parameter „*Summe der PFAS*“ der Summe von 20 einzelnen Stoffen entsprechen, wird für die einzelnen Stoffe eine Bestimmungsgrenze von maximal 1,5 ng/l empfohlen, um einen aussagekräftigen Wert für die Gesamtheit der 20 nachgewiesenen PFAS zu erhalten ([5]). Für PFHxS, PFOA, PFOS, und PFNA (gemäß der EFSA-Bewertung von 2020[5] besorgniserregende PFAS) sollte der Zielwert der Bestimmungsgrenze deutlich unter 1,5 ng/l liegen, um mögliche nachteilige Einflüsse zu reduzieren und die hohe toxikologische Relevanz der vier Stoffe widerzuspiegeln.

2.3. *Häufigkeit der Probennahmen*

Die Mindesthäufigkeit der Probennahme und Analyse ist in Anhang II Teil B Tabelle 1 der Richtlinie festgelegt. Die Anzahl der Proben hängt von der Menge des in dem Versorgungsgebiet pro Tag abgegebenen oder gewonnenen Trinkwassers ab.

Aufgrund der gemäß Artikel 8 und 9 der Richtlinie durchgeführten Risikobewertungen der Einzugsgebiete und Versorgungssysteme können sich andere Probennahmenhäufigkeiten als notwendig erweisen.

3. Analyseverfahren zur Überwachung der „Summe der PFAS“

3.1. *Anwendungsbereich der Verfahren*

Der Parameter „*Summe der PFAS*“, wie in Anhang I Teil B der Richtlinie definiert, ist eine Untergruppe von 20 einzelnen bedenklichen PFAS (Targets) aus vielen möglichen PFAS („*PFAS gesamt*“). Diese 20 einzelnen Stoffe werden in Anhang III Teil B Nummer 3 der Richtlinie aufgeführt.

Die „*Summe der PFAS*“ umfasst einen perfluorierten Alkylanteil mit drei oder mehr Kohlenstoffatomen (d. h. $–CnF_2n–$, n ≥ 3) oder einem perfluorierten Alkyletheranteil mit zwei oder mehr Kohlenstoffatomen (d. h. –CnF2nOCmF2m–, n und m ≥ 1). Die Kettenlänge insgesamt umfasst vier bis 13 Kohlenstoffatome mit zehn Perfluoralkancarbonsäuren (PFCAs) und zehn Perfluoralkansulfonsäuren (PFSAs). In **Tabelle 1** sind die 20 einzelnen PFAS aufgeführt. Der Parameterwert für die Summe aller 20 Stoffe beträgt 0,10 µg/l.

Aufgrund dieser Definition in der Richtlinie sind ultra-kurzkettige PFAS-Verbindungen mit zwei oder drei Kohlenstoffatomen von der „*Summe der PFAS*“ ausgeschlossen. Dies betrifft insbesondere Trifluoressigsäure (TFA) und Perfluorpropansäure (PFPrA), sowie Trifluormethansulfonsäure (TFMS), Perfluorethansulfonsäure (PFEtS) und Perfluorpropansulfonsäure (PFPrS).

Die 20 in Anhang III Teil B Nummer 3 der Richtlinie aufgeführten Stoffe (siehe **Tabelle 1**) umfassen im Zusammenhang dieser technischen Leitlinien auch lineare und verzweigte Isomere. Gemäß der Richtlinie gemeldete Massenkonzentrationen sollten die Summe aller Isomere umfassen.

Tabelle 1

In Anhang III Teil B Nummer 3 der Richtlinie aufgeführte PFAS, die für die Berichterstattung über die Parameterwerte der „*Summe der PFAS*“ analysiert werden müssen (* Abkürzung der in der Richtlinie nicht genannt)

Kohlenstoffkettenlänge	Perfluoralkancarbonsäuren (PFCAs)	Perfluoralkansulfonsäuren (PFSAs)
4	Perfluorbutansäure (PFBA)	Perfluorbutansulfonsäure (PFBS)

([5]) Es sei darauf hingewiesen, dass die derzeit beste Bestimmungsgrenze eines einzelnen PFAS-Stoffs bei etwa 0,1 ng/l oder sogar darunter liegt (durch LC-MS/MS nach Anreicherung, z. B. nach EN 17892, Teil B).

Kohlenstoffkettenlänge	Perfluoralkancarbonsäuren (PFCAs)	Perfluoralkansulfonsäuren (PFSAs)
5	Perfluorpentansäure (PFPA)	Perfluorpentansulfonsäure(PFPS)
6	Perfluorhexansäure (PFHxA)	Perfluorhexansulfonsäure(PFHxS)
7	Perfluorheptansäure (PFHpA)	Perfluorheptansulfonsäure(PFHpS)
8	Perfluoroctansäure (PFOA)	Perfluoroctansulfonsäure (PFOS)
9	Perfluornonansäure (PFNA)	Perfluornonansulfonsäure(PFNS)
10	Perfluordecansäure (PFDA)	Perfluordecansulfonsäure(PFDS)
11	Perfluorundecansäure (PFUnDA)	Perfluorundecansulfonsäure (PFUnDS)*
12	Perfluordodecansäure (PFDoDA)	Perfluordodecansulfonsäure (PFDoDS)*
13	Perfluortridecansäure (PFTrDA)	Perfluortridecansulfonsäure (PFTrDS)*

Die modernste Technologie zur analytischen Bewertung nicht flüchtiger einzelner organischer Spurenstoffe (Targets) mit chemischen Eigenschaften wie PFAS ist die Flüssigchromatographie-Tandem-Massenspektrometrie (LC-MS/MS) (siehe unter Absatz 3.2 *Analyseverfahren* aufgeführte Verfahren). Ungefiltertes Trinkwasser wird meist nach einem geeigneten Verfahren zur Probennahme analysiert.

Der Anwendungsbereich eines Analyseverfahrens kann andere validierte PFAS-ähnliche Alternativen und PFAS-Ersatzstoffe und ähnliche organische Spurenstoffe wie Fluorotelomersulfonsäure oder Perfluorsulfonamid umfassen. Bei dem Verfahren können nach einer ordnungsgemäßen Validierung jedes der integrierten Stoffe, mehr Stoffe einbezogen werden, wobei das Analyseergebnis für die „*Summe der PFAS*“ nur die in Anhang III Teil B Nummer 3 der Richtlinie aufgeführten Stoffe umfasst.

3.2. ***Analyseverfahren***

Die Analyseverfahren sollten die allgemeinen und spezifischen Anforderungen des Parameters „*PFAS*“ gemäß Anhang III der Richtlinie erfüllen. Die empfohlenen Analyseverfahren für den Parameter „*Summe der PFAS*“ sind:

— EN 17892:2024, Teil A	(LC-MS, Direktinjektion)
— EN 17892:2024, Teil B	(LC-MS, SPE Anreicherungsmethode)

Die Teile A und B der Norm EN 17892 sind für alle 20 in dem Parameter „*Summe der PFAS*“ enthaltenen betroffenen Stoffe ausgearbeitet und validiert. EN 17892 ist das erste Standardverfahren, mit dem eine vollständige Validierung im Rahmen einer europäischen Laborvergleichsuntersuchung ermöglicht wird.

Andere gleichwertige Standardverfahren können verwendet werden, wenn sie die allgemeinen und spezifischen Anforderungen des Parameters „PFAS“ gemäß Anhang III der Richtlinie erfüllen.

3.3. ***Leistungskriterien für die Analyseverfahren***

3.3.1. *Bestimmungsgrenze*

In diesen Leitlinien wird davon ausgegangen, dass die in Anhang III Teil B Nummer 1 der Richtlinie festgelegte Anforderung für die Bestimmungsgrenze von 30 % des Parameterwerts (0,10 µg/l) durchschnittlich eine Bestimmungsgrenze von 1,5 ng/l für jede der 20 Zielverbindungen ergibt, sodass es möglich ist, 30 % (30 ng/l) des Parameterwerts der „*Summe der PFAS*“ zu messen.

Eine Erhebung europäischer Fachlaboratorien[3] zeigte, dass die mittlere Bestimmungsgrenze aller 20 Target-PFAS für die Direktinjektion (Teil A) bei 1,38 ng/l (gerundet: 1,4 ng/l) und für die Festphasenextraktion (SPE) (Teil B) bei 1,28 ng/l (gerundet: 1,3 ng/l) lag. Für beide Verfahren wurde gezeigt, dass sie grundsätzlich mit Anhang III Teil B der Richtlinie im Einklang stehen. Bei der Anwendung des Verfahrens sollte die Einhaltung der Bestimmungsgrenzen für die gegebenen hausinternen Bedingungen überprüft werden.

Mit der Erhebung wurde gezeigt, dass aus beiden Teilen der Norm EN 17892:2024 Bestimmungsgrenzen mit einem Mittelwert von unter 1,5 ng/l hervorgehen können, was den Anforderungen entspricht. Der SPE-Ansatz ist aufgrund der Anreicherung in der Regel empfindlicher. Die Laboratorien sollten eine ausreichende Empfindlichkeit gemäß den Anforderungen der Richtlinie und dem eingeführten Qualitätsmanagementsystem (z. B. EN ISO/IEC 17025) nachweisen. Unter optimalen Bedingungen sollten Bestimmungsgrenzen von etwa 0,1 ng/l oder sogar weniger erreicht werden können. Für sehr niedrige Bestimmungsgrenzen sind in diesem Ultraspurenbereich Umwelteinflüsse und Laborbedingungen die limitierenden Faktoren.

3.3.2. *Messunsicherheit*

Dieselbe Erhebung europäischer Fachlaboratorien[3] hat ebenso ergeben, dass die einzelnen erweiterten Messunsicherheiten deutlich unter dem in der Richtlinie festgelegten Grenzwert von 50 % liegen können. Die mittleren Messunsicherheiten für die 20 PFAS der „*Summe der PFAS*“ liegt in einem Bereich zwischen 23 % und 31 % mit Standardabweichungen zwischen 10 % und 16 % für Teil A (Direktinjektion). Für Teil B (SPE-Anreicherung) liegen die mittleren Messunsicherheiten in einem Bereich zwischen 18 % und 39 % mit Standardabweichungen zwischen 5 % und 17 %. Bei der Anwendung des Verfahrens sollte die Einhaltung der Unsicherheiten für die gegebenen hausinternen Bedingungen überprüft werden.

4. **Analyseverfahren für die Überwachung von „PFAS gesamt“**

4.1. ***Anwendungsbereich der Verfahren***

Die Bandbreite der im Parameter „*PFAS gesamt*“ enthaltenen Stoffe wird in der Richtlinie als „die Gesamtheit der per- und polyfluorierten Alkylsubstanzen“ definiert. In der Richtlinie wird der Parameter nicht genauer definiert.

Die einzige Definition von PFAS, über die zum Zeitpunkt der Annahme der Richtlinie Einvernehmen herrschte, war die technische Definition der OECD im Jahr 2018[1]. Diese Definition wurde 2021, also nach der Annahme der Richtlinie überarbeitet.[2] Nun umfasst sie den Stoff Trifluoressigsäure (TFA). TFA, eine ultra-kurzkettige PFAS, ist ein hydrophiler, mobiler und persistenter Stoff, der vor allem durch den Abbau verschiedener fluorierter Stoffe und aus diffusen Kontaminationsquellen in den Wasserkreislauf gelangt. Es gibt viele verschiedene mögliche Quellen von TFA in Rohwasserquellen, einschließlich Pestizide, Kältemittel, Abwasserbehandlung und industriebedingte Verschmutzung.

Die verfügbaren Ergebnisse der TFA-Überwachung von Rohwasserquellen der Mitgliedstaaten legen nahe, dass TFA-Konzentrationen an der Stelle der Einhaltung den in der Richtlinie festgelegten Parameterwert „*PFAS gesamt*“ möglicherweise deutlich überschreiten.

Die Auswirkungen von TFA auf die Gesundheit werden derzeit auf der Grundlage der aktuellsten wissenschaftlichen Erkenntnisse von der Weltgesundheitsorganisation (WHO) untersucht. Abhängig von den Ergebnissen dieser Untersuchung könnte die WHO neue Empfehlungen bezüglich TFA-Konzentrationen in Trinkwasser herausgeben.

Diese technischen Leitlinien umfassen Empfehlungen zum Umgang mit TFA im Rahmen des Parameters „*PFAS gesamt*“.

4.2. ***Analyseverfahren***

Bei den Analyseverfahren sollten sowohl die allgemeinen als auch die konkreten Spezifikationen hinsichtlich des Parameters „*PFAS*“, die in Anhang III „*Spezifikationen für die Analyse der Parameter*“ der Richtlinie festgelegt sind, berücksichtigt werden.

4.2.1. *Ersatzweise herangezogene Verfahren (Proxy-Verfahren) für „PFAS gesamt“*

Derzeit können mit keinem einzigen Analyseverfahren alle möglichen Stoffe einer riesigen Stoffklasse mit sehr unterschiedlichen Molekulargewichten sowie verschiedenen chemischen und strukturellen Eigenschaften vollständig erfasst oder quantifiziert werden. Somit ist davon auszugehen, dass jedes Verfahren für die Analyse organischer Spurenstoffe ein eigenes „analytisches Fenster“ hat, das jeweils größer oder kleiner ist. Der Parameter „*PFAS gesamt*“ ist ein typischer Summenparameter und alle empfohlenen Verfahren können hilfreiche Ergebnisse und einen Proxy für dessen Messung liefern. Weitere Informationen sind dem Gesamtbericht zur technischen und sozioökonomischen Bewertung[3] zu entnehmen.

Die derzeit in diesen Leitlinien als Proxy für die Messung des Parameters „*PFAS gesamt*“ empfohlenen Verfahren sind weder standardisiert noch harmonisiert. Die Empfehlungen beziehen sich auf die Analysegrundsätze, enthalten jedoch keine Hinweise für die Vorbereitung der Stichprobe:

1. TOP-Assay (Total Oxidisable Precursor Assay)

2. EOF-CIC (Verbrennungs-Ionenchromatographie (CIC) nach Extraktion organischer Fluorverbindungen (EOF))

3. LC-HRMS Suspect- und Non-Target-Analyse (Flüssigchromatographie mit hochauflösender Massenspektrometrie)

1. Bei den **TOP-Assay-Verfahren** wird eine Oxidation mit Persulfat in alkalischer Lösung vorgenommen. TOP-Assay-Ansätze sind insbesondere bei PFAS anzuwenden, die zu Perfluorcarbonsäuren oxidieren und ein sehr geringes Risiko einer Überschätzung der Bedenklichkeit der PFAS-Belastung bergen. Perfluorierte Etherverbindungen und möglicherweise andere Klassen oxidieren nicht zu perfluorierten Carbonsäuren. Neben dem Risiko einer unvollständigen Umwandlung der Präkursoren, ist das Risiko hoch, „*PFAS gesamt*“ zu unterschätzen. Alle Oxidationsprodukte müssen in dem Proxy-Analyseergebnis quantifiziert, zusammengefasst und als **„*PFAS gesamt*$_{TOP}$“ in ng/l** dargestellt werden.

2. **EOF-CIC-Verfahren** für „*PFAS gesamt*“ gemäß der Richtlinie sind inklusiv und quantitativ, und es besteht ein geringes Risiko, die Bedenklichkeit der PFAS-Belastung zu unterschätzen. Die derzeitigen EOF-Verfahren umfassen Nicht-PFAS, einschließlich CF-Gruppen und anorganische Stoffe wie PF_6^-, BF_4^- und möglicherweise andere F^--Spezies. Quantitative Ergebnisse liefern extrahierbare Fluorkonzentrationen (**ng/l F**), die in eine Proxy-PFAS-Massenkonzentration (empfohlen werden PFOA-Massenäquivalente) umgerechnet werden müssen, um mit dem Parameterwert verglichen werden zu können. Der Umwandlungsfaktor, um aus $PFOA_{eq}$ die Massenkonzentration von Fluor zu errechnen, beträgt 1,45 ([6]). Eine Massenkonzentration von 345 ng/l F entspricht somit einer Massenkonzentration von 500 ng/l $PFOA_{eq}$. Der Hintergrund anderer möglicher Fluorverbindungen ist nicht gut erforscht, somit kann der Parameterwert von 0,50 µg/l (500 ng/l) überschritten werden. Die Proxy-Analyseergebnisse werden als **„*PFAS gesamt*$_{EOF\text{-}CIC,PFOA_{eq}}$“ in ng/l $PFOA_{eq}$** dargestellt.

3. Die **LC-HRMS-Analyse** als Suspect- und Non-Target-Analyse von PFAS unter Verwendung von LC-HRMS hängt nicht von der Verfügbarkeit individueller Analysestandards ab und kann daher eine signifikant größere Anzahl von Verbindungen erkennen als die Target-Analyse (großes analytisches Fenster). Dies ist ein wirkungsvoller Ansatz für den Umgang mit unbekannten Verunreinigungen; derzeit beruhen die verfügbaren Methoden jedoch teilweise auf wissenschaftlichen Erkenntnissen und teilweise auf Experteneinschätzungen und liefern nur semiquantitative Ergebnisse. Die Selektivität von Suspect- und Non-Target-Verfahren hängt von dem Prozessablauf der HRMS-Daten ab, die weniger spezifisch sind als bei der Target-Analyse. Das Risiko falsch-negativer und falsch-positiver Ergebnisse hängt von dem Signifikanzniveau ab, mit dem die erkannten Signale als bestätigte PFAS gemeldet werden können. Die Proxy-Analyseergebnisse werden als **„*PFAS gesamt*$_{HRMS}$“ in ng/l** dargestellt.

Mit keiner dieser drei Proxy-Methoden kann „*PFAS gesamt*“ genau quantifiziert werden. Es können jedoch Proxy-Messungen davon vorgenommen werden. Für alle drei Verfahren ist die Vorbehandlung der Proben von entscheidender Bedeutung. In einigen Fällen erfordert diese Phase besondere Aufmerksamkeit, um zukünftig eine weitere Harmonisierung und Validierung zu erreichen.

([6]) $PFOA_{eq}$ = [Konzentration F / (n_F *MW_F)] x MW_{PFOA} = Konzentration F * 1.45 (Dabei ist n_F =15, MW_F = 19 g/mol und MW_{PFOA} = 414 g/mol).

Die drei Proxy-Verfahren wurden für ultra-kurzkettige PFAS (z. B. TFA) und andere organische Fluorverbindungen wie fluorierte Pharmazeutika, fluorierte Pestizide und ihre fluorinierten Abbauprodukte mit mindestens einer -CF_3- oder -CF_2-Gruppe nicht vollständig validiert. Insbesondere die Bestimmung von TFA kann sich je nach Vorbehandlung der Probe erheblich unterscheiden. Es wird daher empfohlen, die Bestimmung der TFA zu verifizieren und zu dokumentieren. Eine Massenkonzentration von 500 ng/l TFA entspricht einer Konzentration von etwa 250 ng/l F bei Berechnung mit einem spezifischen Verfahren für Fluor wie EOF-CIC, sofern 100 % der TFA bestimmt werden. Detailliertere Informationen, sind in dem Gesamtbericht zur technischen und sozioökonomischen Bewertung enthalten.[3]

Für die meisten der genannten Verfahren fehlen nach wie vor zuverlässige Daten über Messunsicherheiten und Bestimmungsgrenzen. Das heißt, dass es noch nicht möglich ist, die Einhaltung der analytischen Leistungsanforderungen gemäß Anhang III Teil B der Richtlinie für den Parameter „*PFAS gesamt*“ sicherzustellen. Es wird daher empfohlen, die Proxy-Verfahren in Verbindung mit Ringversuchen einzusetzen sowie für die Entfernung von PFAS Vorbehandlungen zu entwickeln und entsprechende Daten zu erheben. Ferner wird empfohlen, Ziele zu formulieren, um die Einhaltung der Anforderungen von Anhang III für „*PFAS gesamt*“ zu erreichen.

4.2.2. *Analysebericht über „PFAS gesamt“*

Für den Analysebericht hinsichtlich der Ergebnisse für „*PFAS gesamt*“ sollte der Beitrag der ultra-kurzkettigen PFAS TFA in Wasser für den menschlichen Gebrauch bewertet werden, da die TFA-Konzentration den gemäß der Richtlinie festgelegten Parameterwert für „*PFAS gesamt*“ möglicherweise (deutlich) überschreitet.

Die Kommission empfiehlt zur Berichterstattung über Analyseergebnisse von „*PFAS gesamt*“ Folgendes:

Schritt 1:	Bestimmung des Analyseergebnisses für „*PFAS gesamt*“ ([PFAS gesamt]) durch eine der drei empfohlenen Proxy-Analyseverfahren, wobei anzugeben ist, welches Verfahren verwendet wurde ([PFAS $gesamt_{TOP}$], [PFAS $gesamt_{EOF\text{-}CIC\ PFOAeq}$] oder [PFAS $gesamt_{HRMS}$]).
Schritt 2:	Bestimmung der Analyseergebnisse für TFA ([TFA]) durch ein Target-Analyseverfahren. Das Target-Verfahren sollte mit den Anforderungen gemäß Anhang III der Richtlinie im Einklang stehen, insbesondere mit den Anforderungen gemäß Teil B für den Parameter „*PFAS gesamt*“.
Schritt 3:	Der Analysebericht umfasst die Berichterstattung über [PFAS gesamt], [TFA] und [PFAS gesamt] – [TFA] und gibt an, welches Proxy-Verfahren und welches Target-Verfahren verwendet wurden.
Schritt 4:	Wenn [PFAS Total] – [TFA] < 0, wird empfohlen, die gemeldeten Analyseergebnisse in Schritt 3 als nicht schlüssig zu kennzeichnen.

5. **Verweise**

[1] **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. Herausgegeben von OECD Publishing. Paris (OECD Series on Risk Management, 39).

[2] **OECD (2021)**: Reconciling Terminology of the Universe of Per- and Polyfluoroalkyl Substances: Recommendations and Practical Guidance. Herausgegeben von OECD Publishing. Paris (OECD Series on Risk Management, 61).

[3] Final report on the support for developing and drafting technical guidelines on PFAS substances under the recast Drinking Water Directive, Dienstleistungsauftrag Nr. 090202/2023/890359/SER/ENV.C.2.

[4] **Richtlinie 2009/90/EG der Kommission** vom 31. Juli 2009 zur Festlegung technischer Spezifikationen für die chemische Analyse und die Überwachung des Gewässerzustands gemäß der Richtlinie 2000/60/EG des Europäischen Parlaments und des Rates (ABl. L 201 vom 1.8.2009, S. 36).

[5] **EFSA (2020):** Risk to human health related to the presence of perfluoroalkyl substances in food (europa.eu)