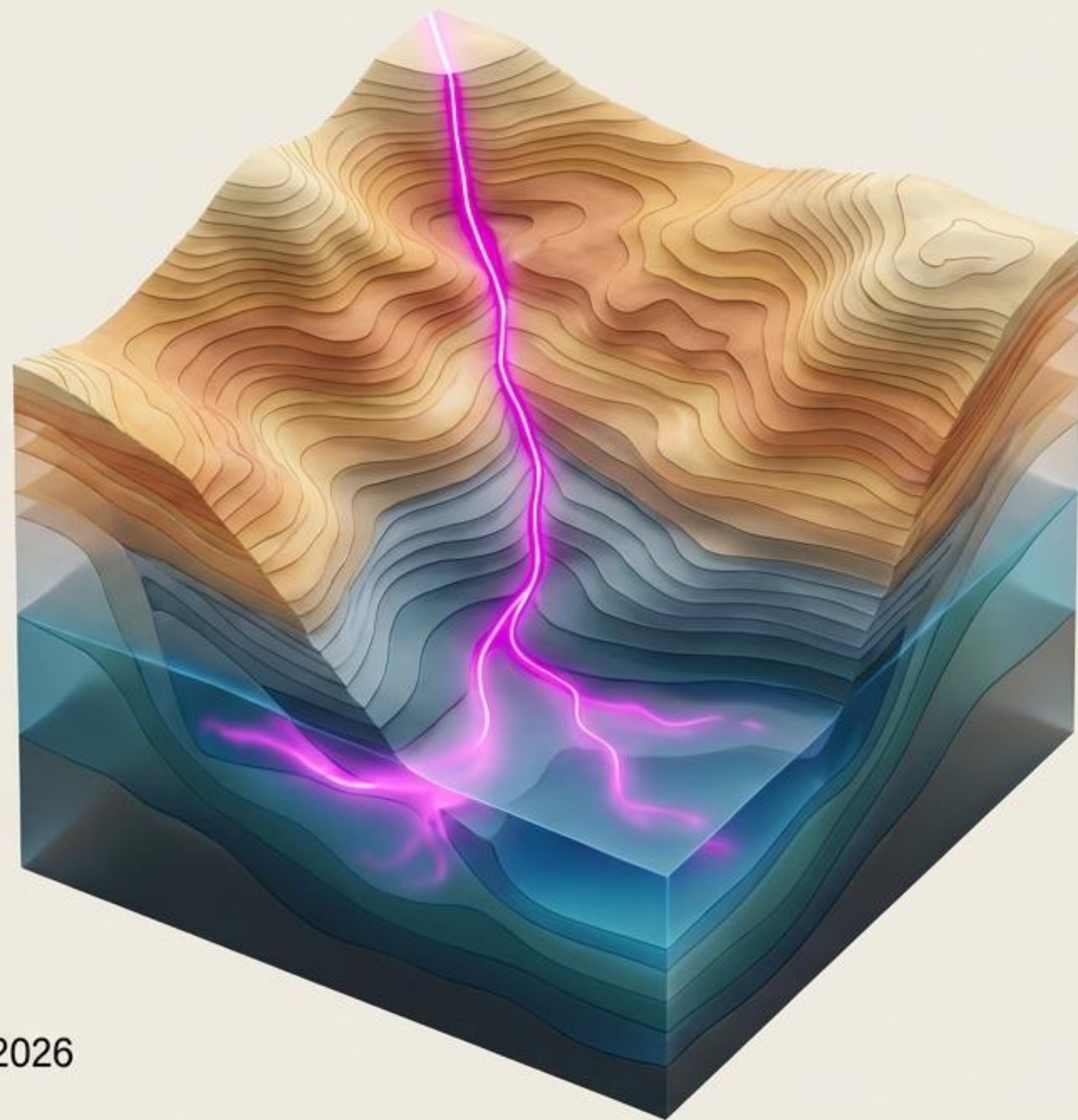


Šíření látek PFAS ve vybraných složkách životního prostředí

Komplexní případová studie transportu „věčných chemikálií“ od zdrojové zóny po biologické receptory v reálných hydrogeologických podmínkách.

Jan Hocke, Petr Kvapil, Václav ŠrédI

Photon Water Technology s. r. o. | Hydrogeologický kongres 2026



CO JSOU LÁTKY PFAS?

- ▶ **Perfluoralkylované a polyfluoralkylované sloučeniny**
- ▶ **Velká skupina perzistentních syntetických organických látek**
- ▶ **Atomy vodíku, původně vázané na uhlík, nahrazeny fluorem**
- ▶ **Polyfluorované látky - alkylový řetězec fluorován pouze částečně**
- ▶ **Vazba mezi uhlíkem a fluorem - nejsilnější kovalentní vazba v organické chemii**
- ▶ **Historicky k nejprodukovanějším látkám z celé skupiny patří PFOS a PFOA**

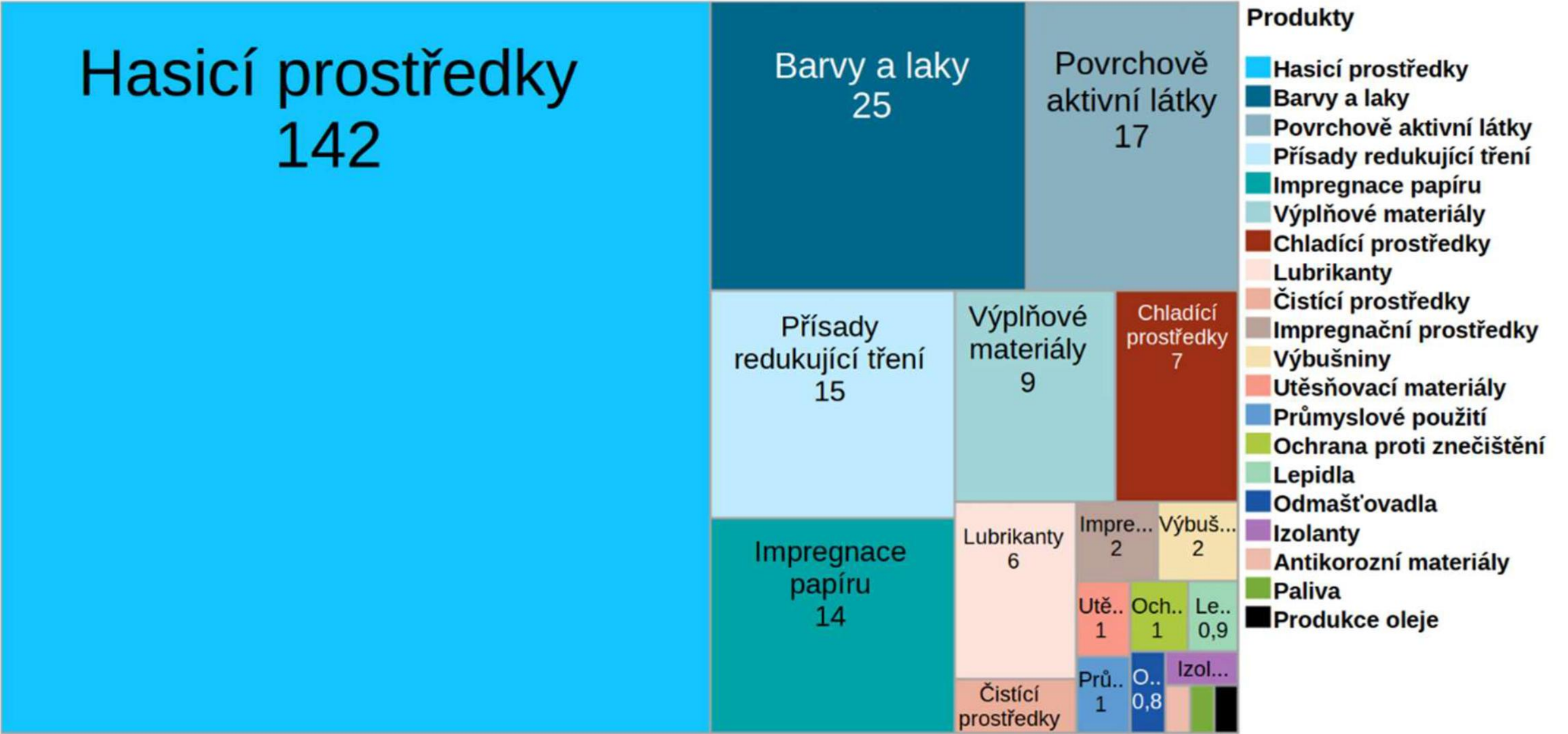
- Dle OECD - Organizace pro hospodářskou spolupráci a rozvoj:

teoreticky několik milionů sloučenin PFAS

Zdroj	Přibližný počet PFAS
OECD (2018)	~4 700
EPA CompTox	>12 000
PubChem / specializované databáze	>14 000
Některé výzkumné odhady	>15 000

ve sborníku – výběr několika nižších desítek

Poměrové množství látek používaných v jednotlivých průmyslových odvětvích



- ▶ **Perfluoralkyl karboxylové kyseliny (PFCA)**
- ▶ **Perfluoralkyl sulfonové kyseliny (PFSA)**

dlouhé řetězce:

PFCA ≥ 8 atomů uhlíku

PFSA ≥ 6 atomů uhlíku

- ▶ **Polární funkční skupina PFCA (-COOH/-COO⁻)**
- ▶ **Polární funkční skupina PFSA (-SO₃H/-SO₃⁻)**

funkční skupina je ionizovatelná (převážně aniontová forma)

Spektrum délky řetězce: Klíč k migraci a retenci



Krátké řetězce (4–6 atomů uhlíku)

Zástupci: PFBA, PFPeA, PFHxA

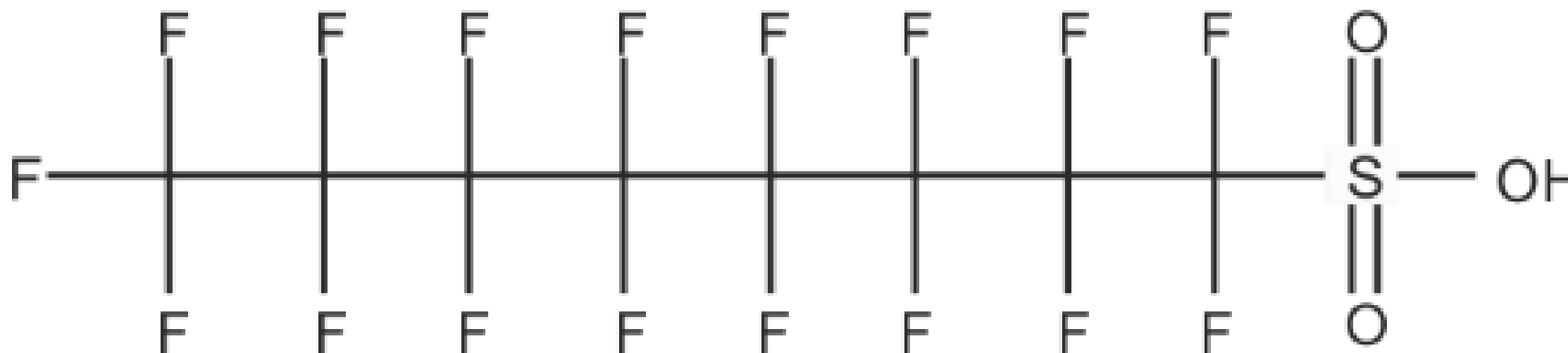
Dlouhé řetězce (PFCA ≥ 8 , PFSA ≥ 6)

Zástupci: PFOS, PFOA

Dimenze	Krátké řetězce	Dlouhé řetězce
Mobilita ve zvodni	Extrémní	Omezená
Sorpce na zeminu (Kd)	Zanedbatelná	Vysoká (závislá na DOC a minerálech)
Zastoupení ve zdroji (AFFF)	Rychle se vyplavují	Dominantní (dlouhodobé přetrvání)
Bioakumulace	Nízká	Extrémní (např. svalovina ryb)
Pozice v mraku	Čelo migračního mraku	Těžiště a blízké okolí ohniska

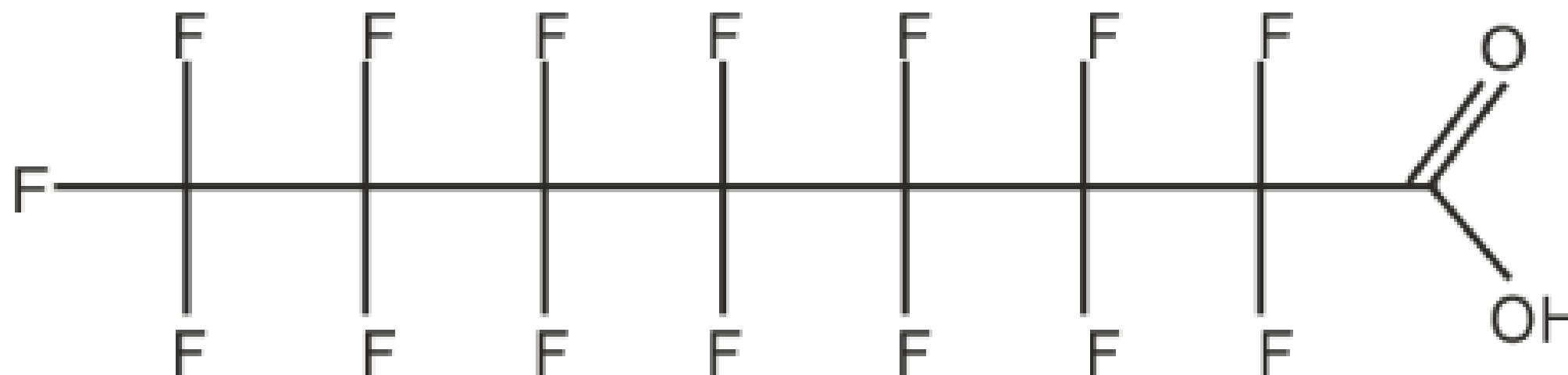
► PFOS (PFSA)

Perfluoroktansulfonát, perfluoroktansulfonová kyselina



► PFOA (PFCA)

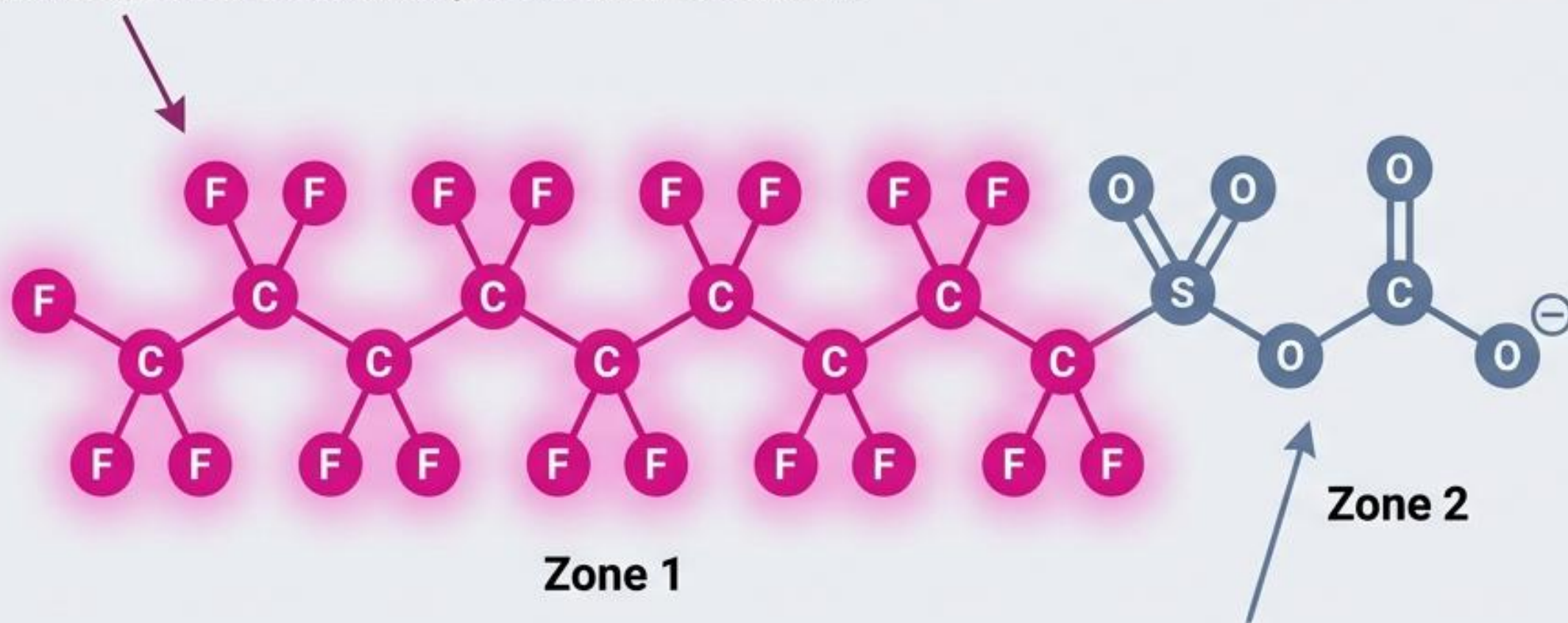
Perfluoroktanová kyselina



Anatomie „věčné vazby“ a povrchová aktivita

Fluorokarbonový řetězec:

Nejsilnější kovalentní vazba v organické chemii (C-F).
Neprostupný štít zajišťující extrémní chemickou, tepelnou a biologickou stabilitu. Hydrofobní a oleofobní.



Polární hlava: Hydrofilní část. Ve většině environmentálních podmínek deprotonovaná (aniontová forma).

Tenzidní chování

Molekuly jsou amfifilní tenzidy. Snižují povrchové napětí pórové vody a extrémně rády se koncentrují na rozhraní vzduch-voda (AWI).

Regulační kontext

Extrémně nízké limity.

Vyhláška č. 371/2023 Sb. (pitná voda) stanovuje NMH 0,1 µg/l (100 ng/l) pro sumu 20 PFAS a indikační limit 0,010 µg/l pro klíčovou čtveřici (PFOA, PFNA, PFHxS, PFOS).

Fluorovaný uhlovodíkový řetězec

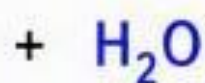
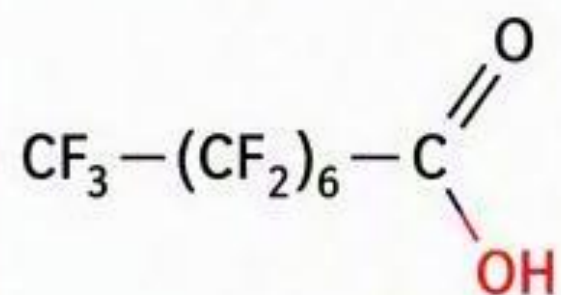
- hydrofobní a zároveň oleofobní

Polární funkční skupina

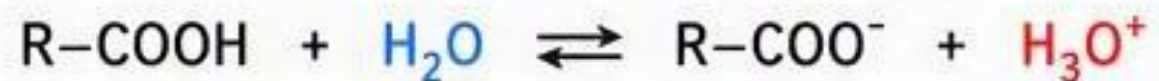
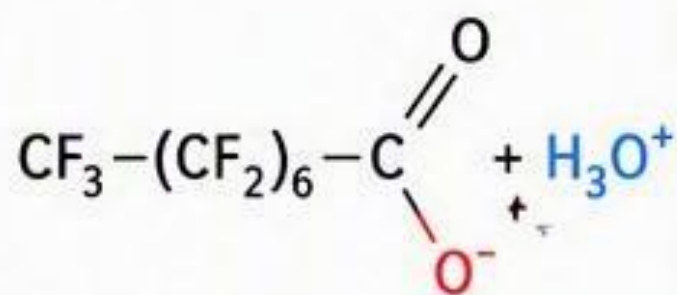
- schopna nést elektrický náboj
- ve vodním prostředí dochází k odštěpení protonu (H^+)
- záporně nabitá funkční skupina umožňuje interakci
 - s vodou
 - s kationty (Ca^{2+} , Fe^{3+})
 - s povrchy oxidů železa
 - s iontoměničovými pryskyřicemi
 - s aktivním uhlím

1) DEPROTONACE PFAS (příklad PFOA)

kyselá forma
(neutrální)

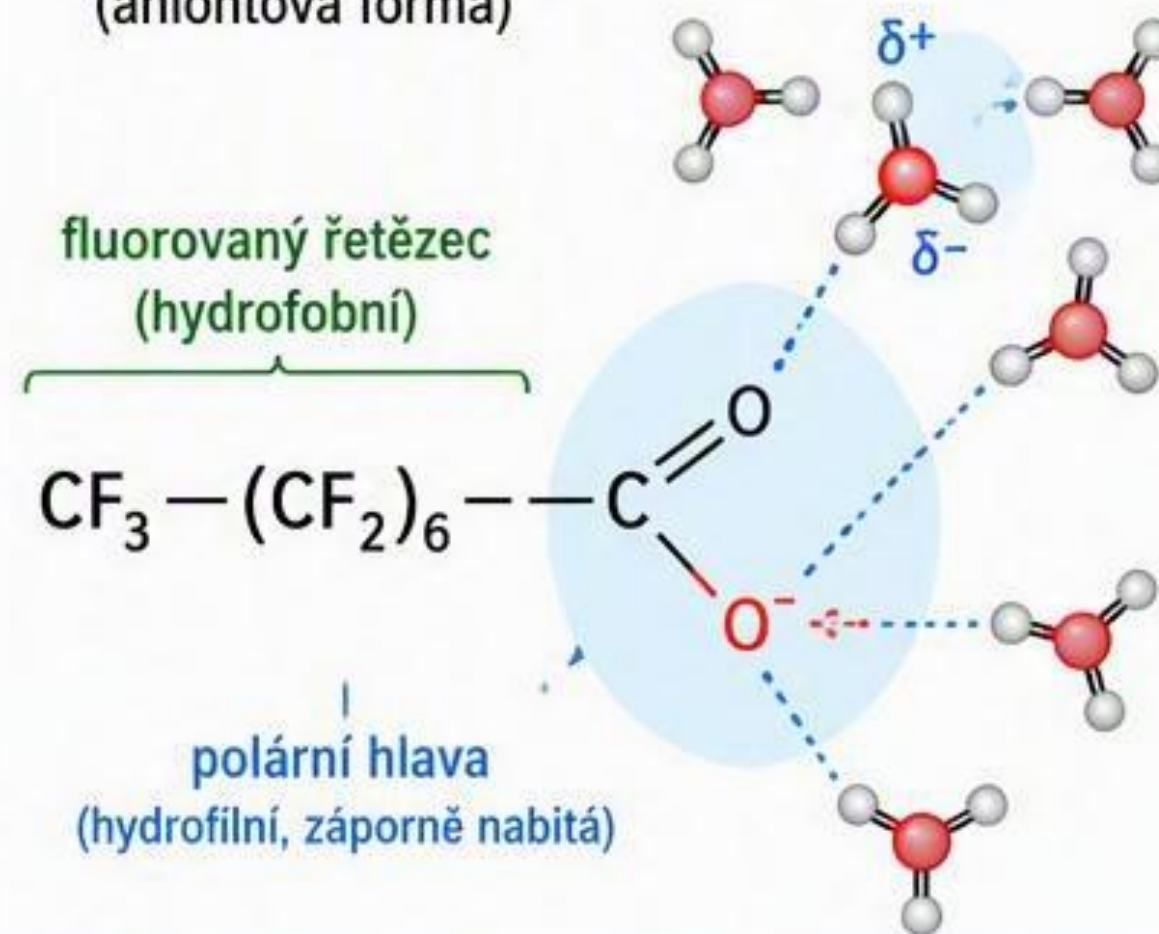


aniontová forma
(ve vodném prostředí)



2) HYDRATACE POLÁRNÍ HLAVY

(aniontová forma)



Záporně nabitý kyslík (O^-) přitahuje kladně polarizované atomy vodíku v molekulách vody.
Vzniká hydratační obal, který zvyšuje rozpustnost PFAS ve vodě.

Přítomnost Ca^{2+} (a obecně tvrdost vody) často vede ke zvýšení sorpce PFAS na horninové prostředí

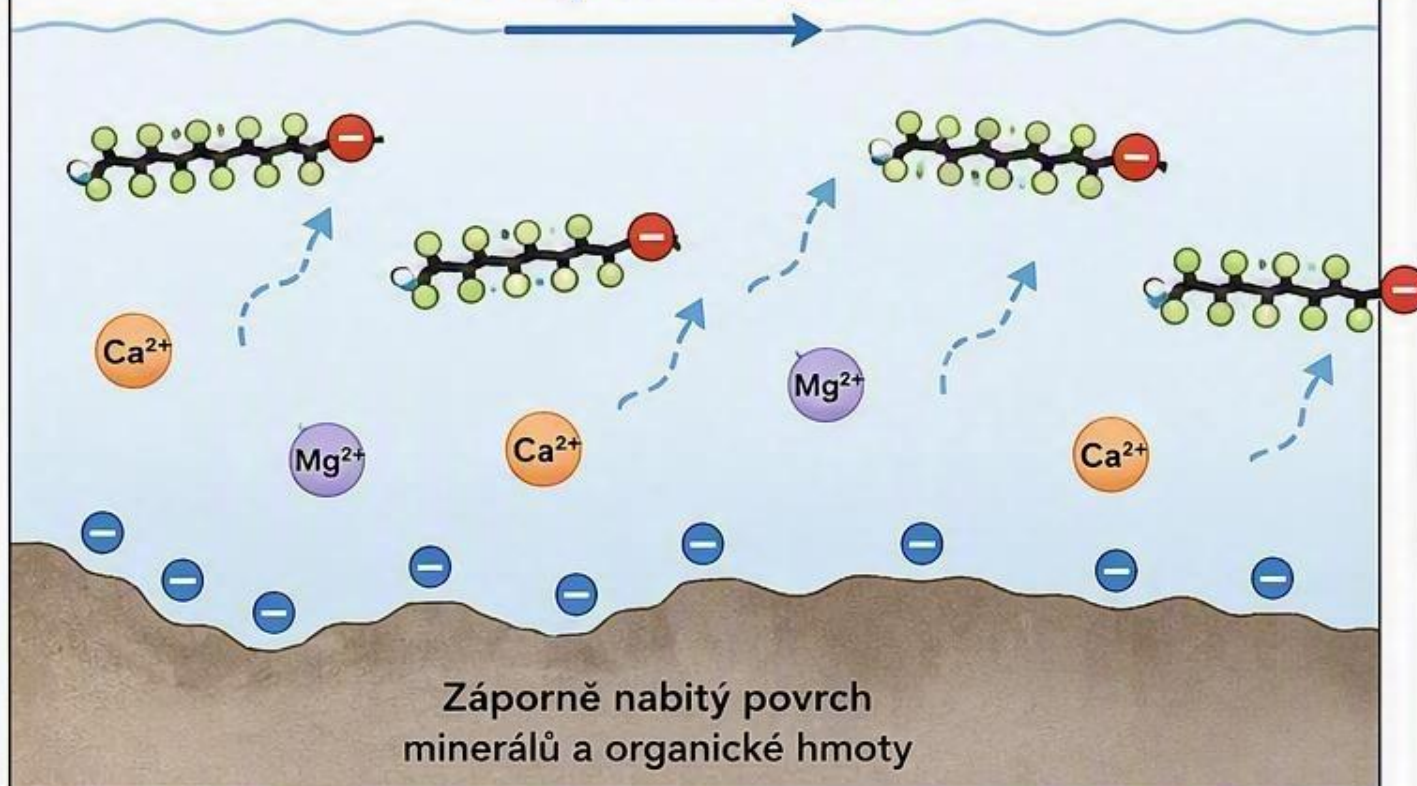
- kation Ca^{2+} je elektrostaticky přitahován k funkční skupině se záporným nábojem
- např. PFOA: $-\text{COO}^-$
- nebo PFOS: $-\text{SO}_3^-$
- nejčastěji vzniká tzv. iontový můstek při běžném pH (6-9)
- vyšší sorpce na minerály - povrch mnoha minerálů je za běžného pH rovněž záporný
- silnější sorpce u PFAS s dlouhým řetězcem
- PFOS zpravidla sorbuje silněji než PFOA

VLIV TVRDOSTI VODY NA MOBILITU PFAS

Tvrdost (Ca^{2+} , Mg^{2+}) ovlivňuje sorpci aniontových PFAS na půdní a horninové částice

MĚKKÁ VODA – nízká tvrdost (nízké koncentrace Ca^{2+} , Mg^{2+})

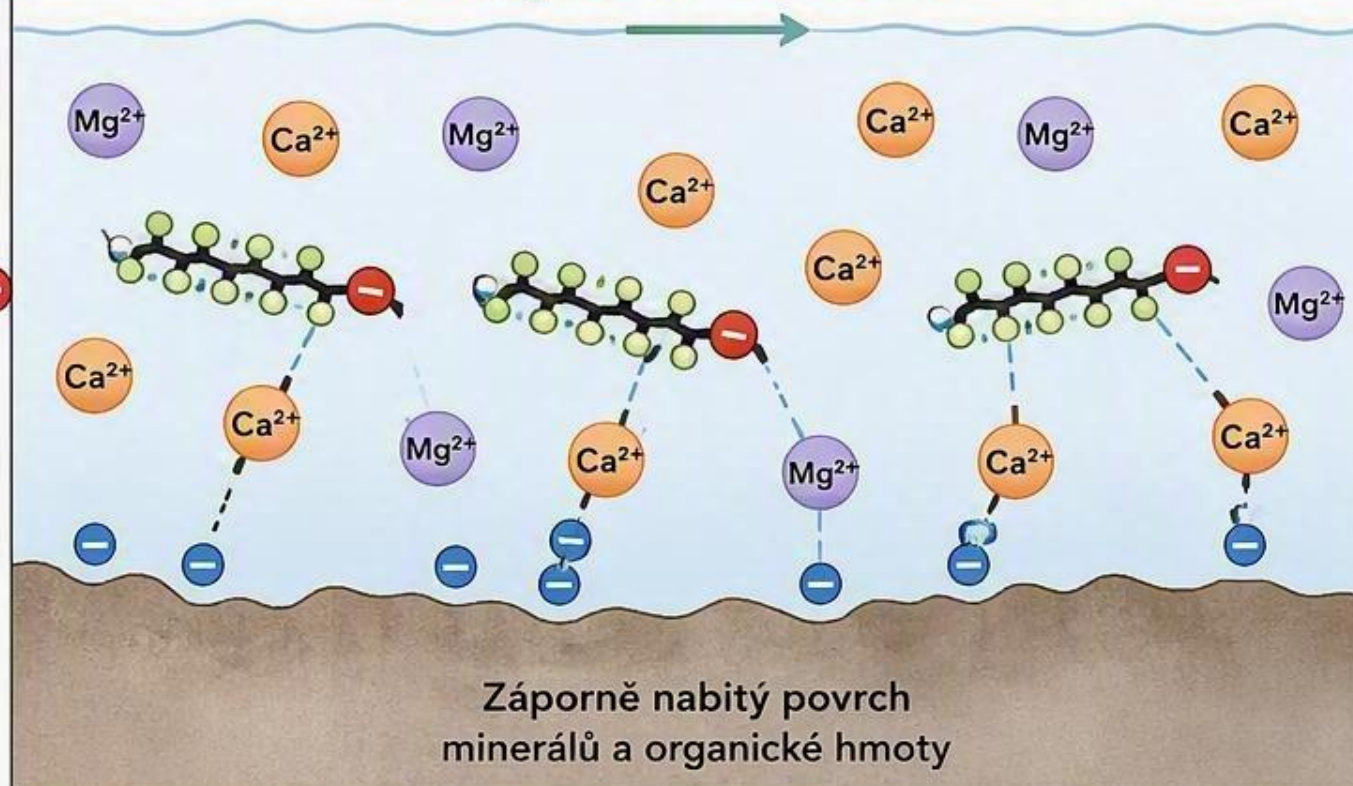
PFAS jsou více mobilní



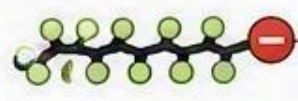
- Málo Ca^{2+} a Mg^{2+} → slabé „iontové můstky“
- Slabší sorpce PFAS na sediment/zeminu
- Vyšší koncentrace PFAS v podzemní vodě
- Vyšší mobilita a delší transport

TVRDÁ VODA – vysoká tvrdost (vyšší koncentrace Ca^{2+} , Mg^{2+})

PFAS jsou méně mobilní



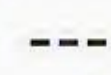
- Více Ca^{2+} a Mg^{2+} → silnější „iontové můstky“ (cation bridging)
- Silnější sorpce PFAS na sediment/zeminu
- Nižší koncentrace PFAS v podzemní vodě
- Nižší mobilita a kratší transport

 PFAS (např. PFOA^- , PFOS^-)
fluorovaný řetězec + aniontová hlava

 Záporný náboj
povrchu

 Ca^{2+} Vápník

 Mg^{2+} Hořčík

 Iontový můstek
(cation bridging)

VYŠŠÍ MOBILITA PFAS
(měkká voda)

NIŽŠÍ MOBILITA PFAS
(tvrdá voda)

DOC (humínové a fulvokyseliny, rozpuštěná organická hmota)

Kompetice – boj o sorpční místa

- DOC sorbuje na minerálech, oxidech Fe a Al, jiné organické hmotě, aktivním uhlí

Komplexace PFAS s DOC prostřednictvím

- hydrofobních interakcí
- elektrostatických interakcí
- kationtových můstků (Ca^{2+} , Mg^{2+})
- komplexy zůstávají ve vodní fázi a mohou být unášeny prouděním podzemní vody.

Parametr	Vliv na mobilitu PFAS
vyšší DOC	↑ mobilita
vyšší Ca^{2+}	↓ mobilita
vyšší Mg^{2+}	↓ mobilita
vyšší obsah organické hmoty v zemině (TOC)	↓ mobilita
vyšší pH (u většiny zemin)	↑ mobilita
více Fe/Al oxidů	↓ mobilita

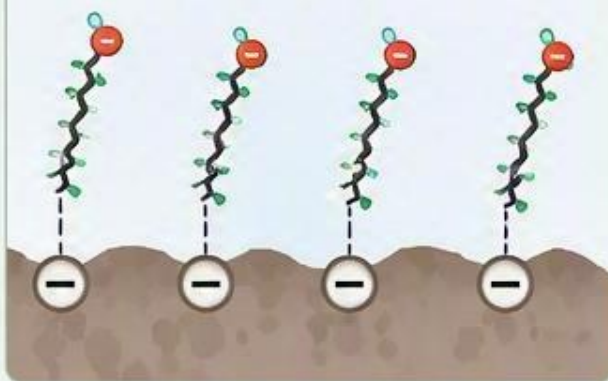
VLIV DOC NA ŠÍŘENÍ PFAS V PODZEMNÍ VODĚ

DOC (dissolved organic carbon) ovlivňuje mobilitu PFAS dvěma hlavními mechanismy: kompeticí a komplexací.

1) KOMPETICE O SORPČNÍ MÍSTA

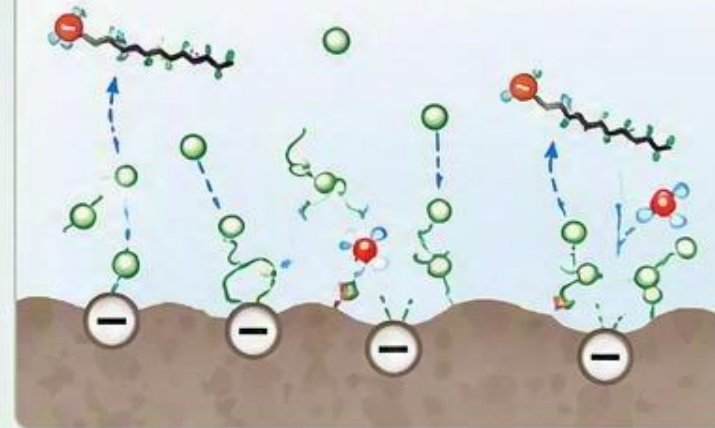
Molekuly DOC soutěží s PFAS o aktivní sorpční místa na povrchu minerálů a organické hmoty.

NÍZKÝ DOC (malá kompetice)



- PFAS se silně sorbují
- Nižší koncentrace PFAS ve vodě
- Nižší mobilita PFAS

VYSOKÝ DOC (silná kompetice)



- DOC obsazuje sorpční místa
- PFAS se sorbují méně
- Vyšší koncentrace PFAS ve vodě
- Vyšší mobilita PFAS

nižší mobilita
PFAS

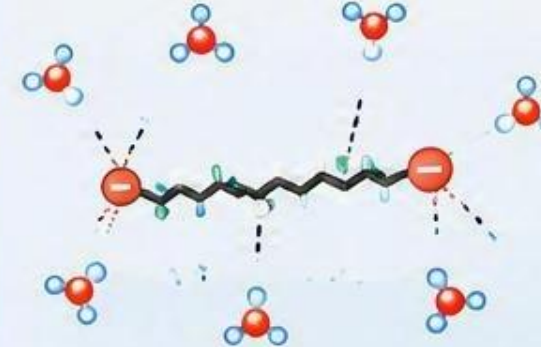
rostoucí DOC = více kompetice

vyšší mobilita
PFAS

2) KOMPLEXACE (VÁZBA DO ROZTOKU)

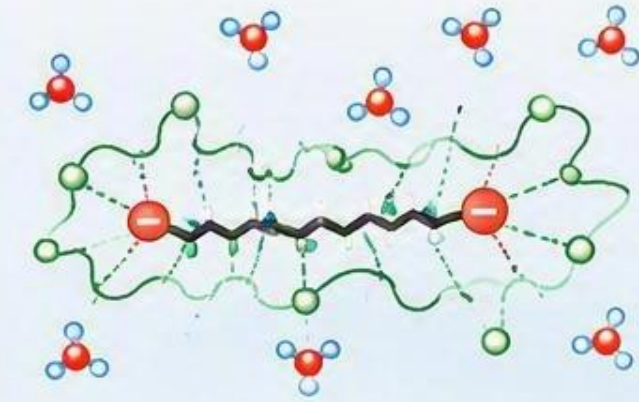
PFAS mohou tvořit rozpustné komplexy s molekulami DOC. Komplexace zvyšuje jejich rozpustnost a snižuje sorpci.

SLABÁ KOMPLEXACE (nebo nízký DOC)



- PFAS je volný v roztoku
- Vyšší šance na sorpci
- Nižší mobilita PFAS

SILNÁ KOMPLEXACE (vysoký DOC nebo vhodné podmínky)



- PFAS je vázán do komplexu s DOC
- Sorpce je potlačena
- Vyšší koncentrace PFAS ve vodě
- Vyšší mobilita PFAS

nižší mobilita
PFAS

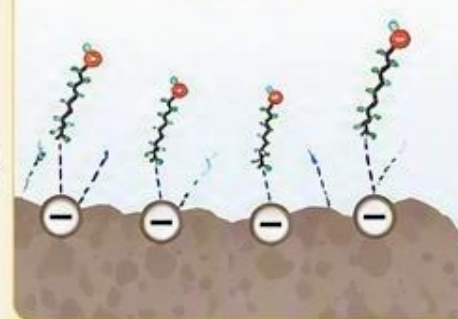
rostoucí DOC = více komplexace

vyšší mobilita
PFAS

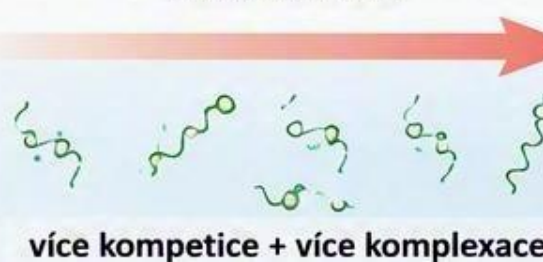
CELKOVÝ VLIV DOC:

- Vyšší DOC obvykle zvyšuje mobilitu PFAS (méně sorpce, více v roztoku).
- Síla vlivu závisí na: koncentraci DOC, typu PFAS (délka řetězce, funkční skupina), mineralogii, pH, tvrdosti (Ca^{2+} , Mg^{2+}), iontové síle a teplotě.

nízký DOC

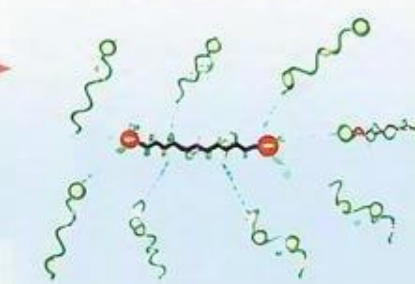


rostoucí DOC



více kompetice + více komplexace

vysoký DOC

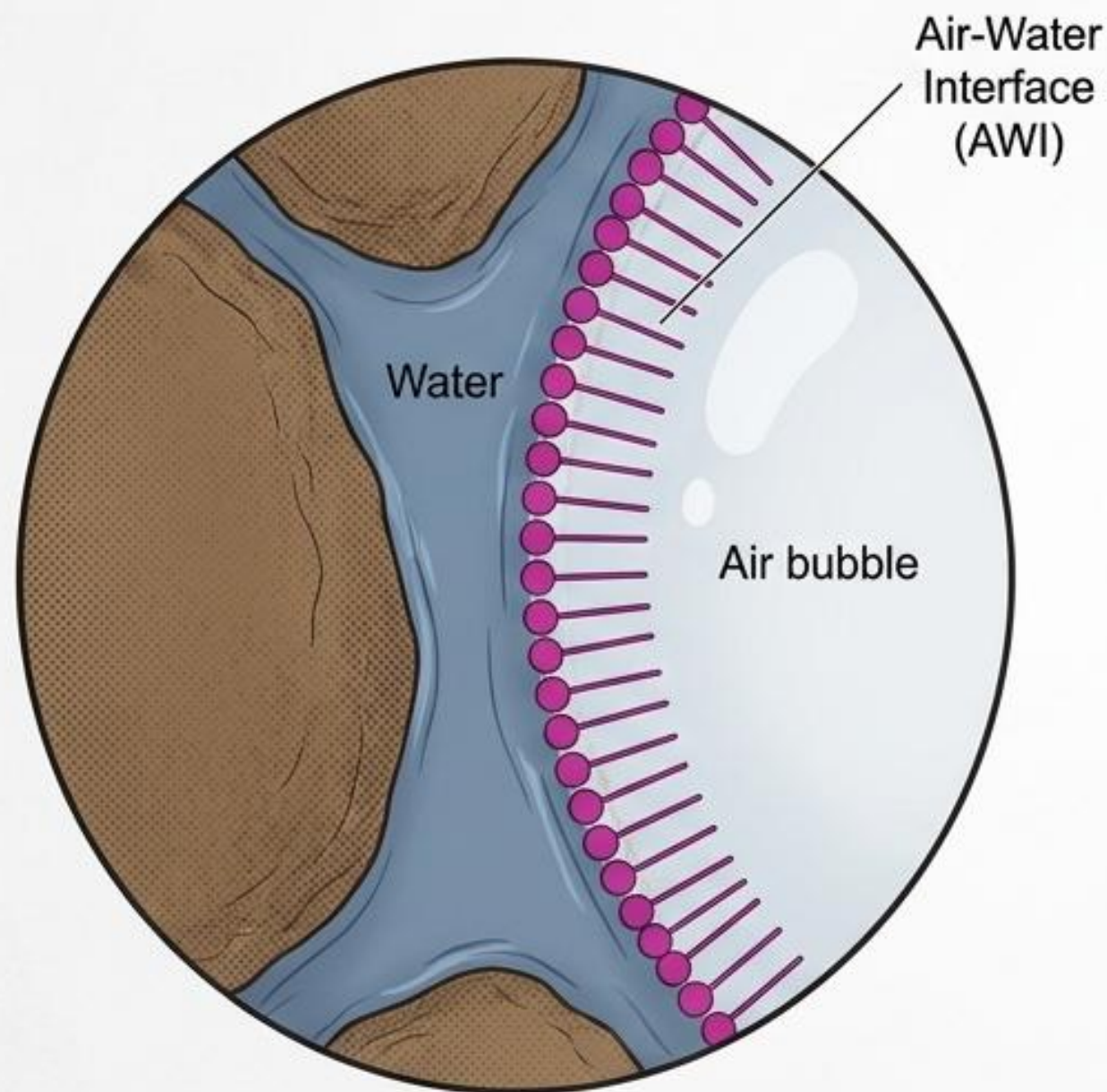


- PFAS (aniontová hlava)
- DOC molekula
- sorpční místo (záporně nabitý povrch)
- molekula vody
- vodíková vazba / interakce
- elektrostatická interakce

DŮSLEDEK PRO PODZEMNÍ VODY: V podzemních vodách s vyšším obsahem DOC bývají PFAS méně zadržovány v horninovém prostředí a mohou se šířit dále a rychleji. Tento efekt je často významný pro dlouhořetězcové PFAS (např. PFOS, PFOA).

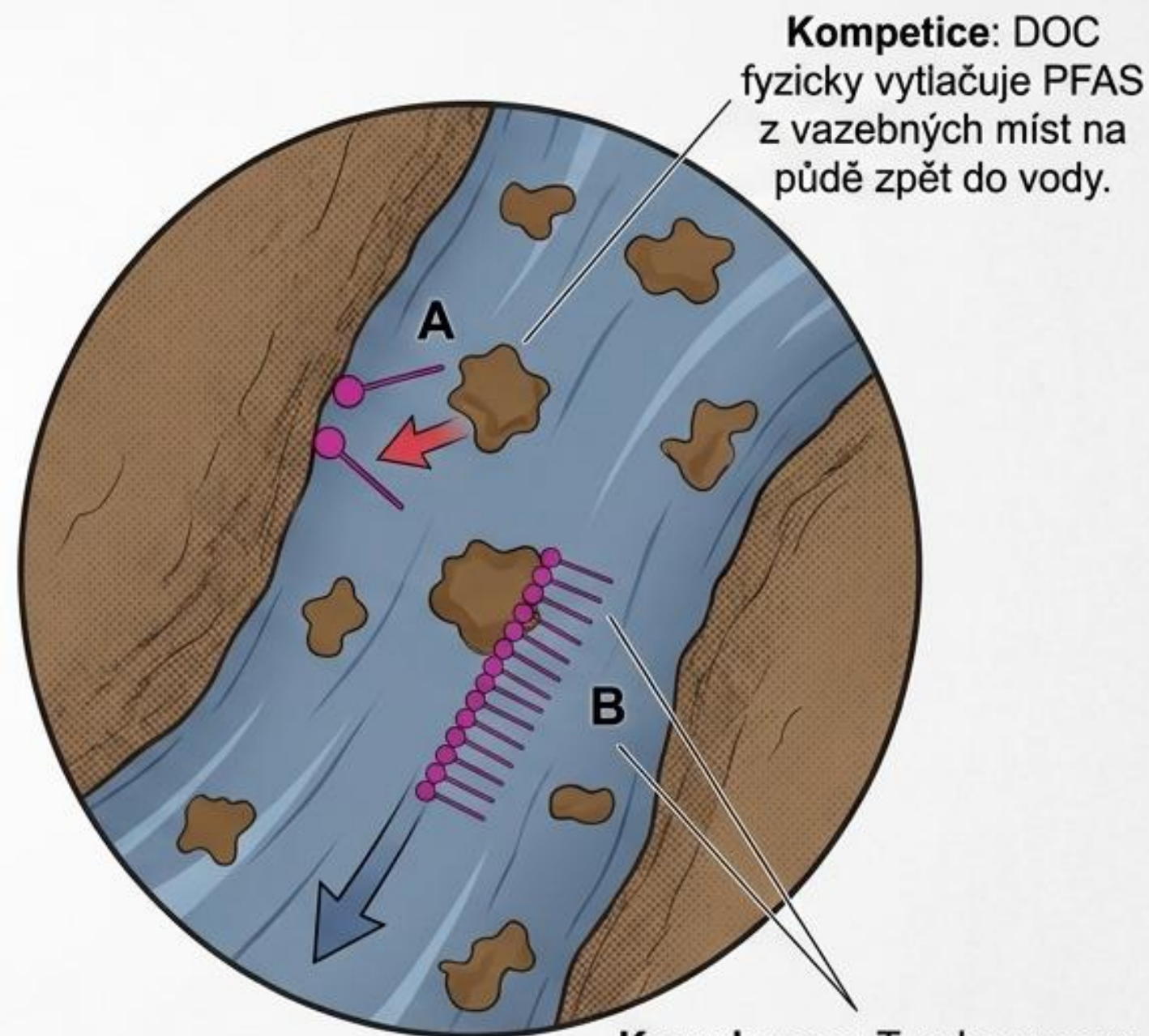
Zpomalovače a urychlovače transportu

Zpomalovač: Retardace v nesaturované zóně



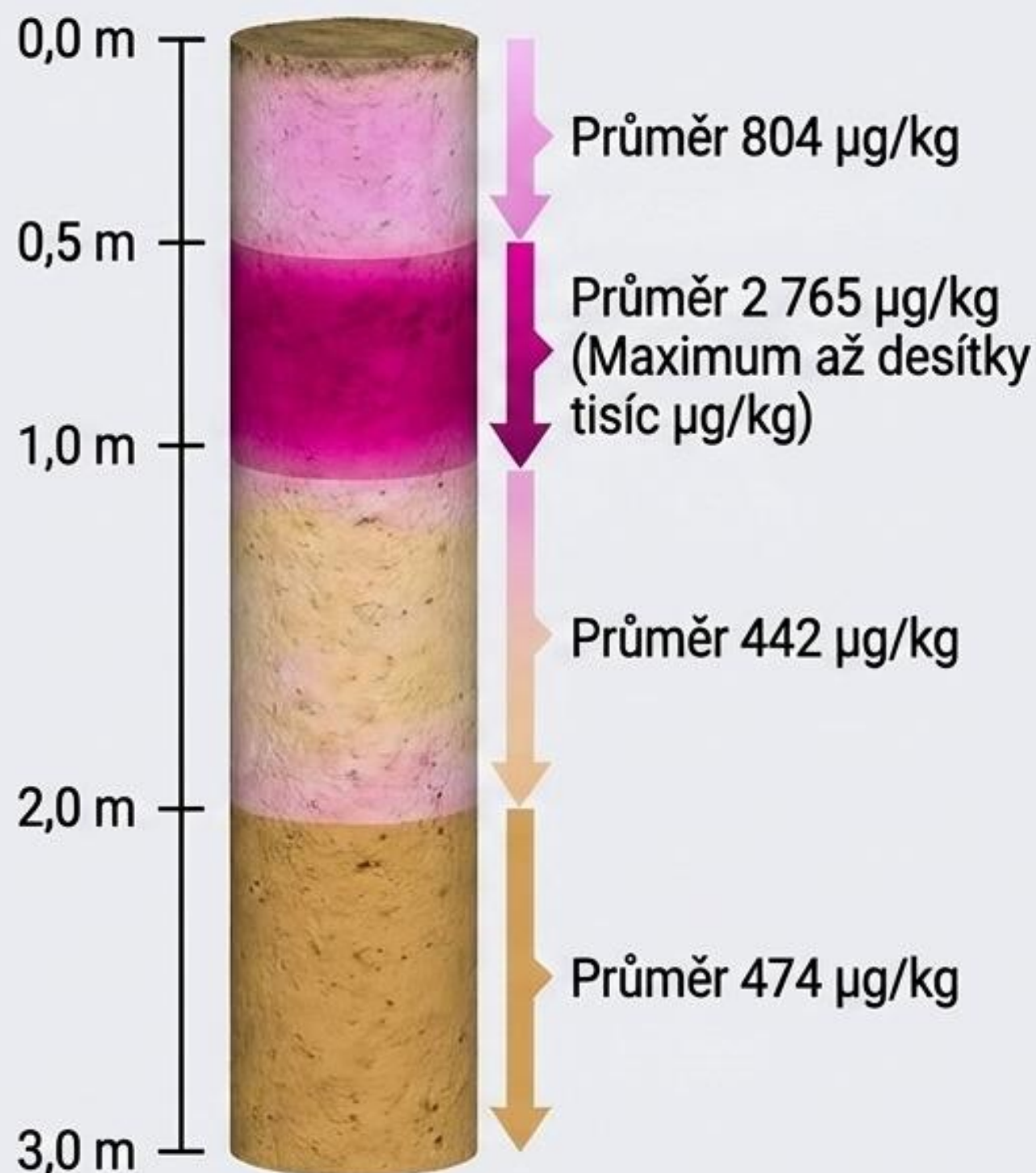
Amfifilní povaha nutí PFAS orientovat hydrofobní řetězec do vzduchu. Ve střídavých klimatických podmínkách (evapokoncentrace) vzlínají k povrchu, čímž působí přímo proti gravitačnímu průsaku.

Urychlovače: Vliv DOC a solí



Komplexace: Tvorba vysoce mobilních komplexů, které maskují hydrofobní vlastnosti PFAS a zamezují sorpci.

Kinetická past v zóně aerace (0–3 m pod terénem)



Aktivní sekundární zdroj

Historické ohnisko po pěnotvorných hasivech (AFFF) se vlivem evapokoncentrace nevyplavilo. Tvoří perzistentní dotaci, která neustále uvolňuje znečištění směrem k podzemní vodě.



Dominance PFOS

U 47 z 60 analyzovaných vzorků zemin tvořila látka PFOS více než 60 % celkové sumy PFAS. Tato látka je tak hlavní zátěží připovrchové zóny.



Vliv organického uhlíku

Přes prudký celkový pokles sumárních koncentrací se podíl PFOS s hloubkou snižoval jen lokálně, což ukazuje na nerovnoměrný výskyt organického uhlíku v profilu ovlivňujícího sorpci.

Architektura migračních cest v saturované zóně

Rozsah koncentrací

<0,2 až X 000 ng/l
v širším okolí ohnisek.



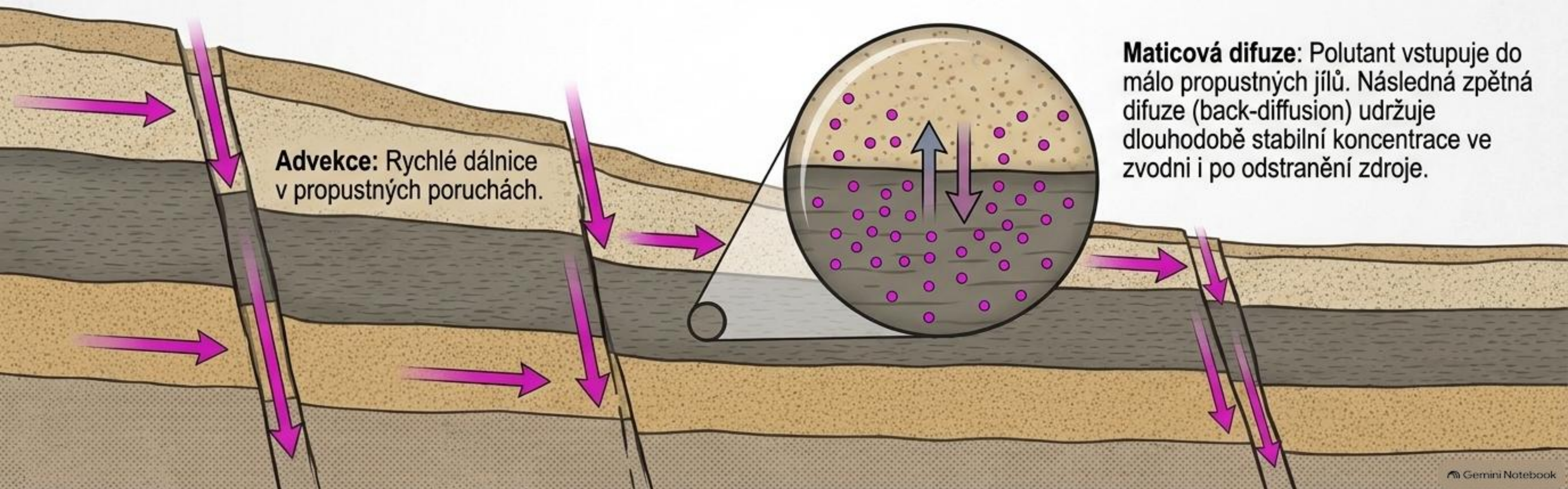
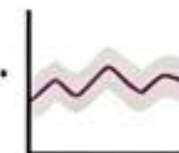
Směr šíření

Ohnisko → Kontaminační
mrak → Pramenní vývěr
→ Povrchový tok.

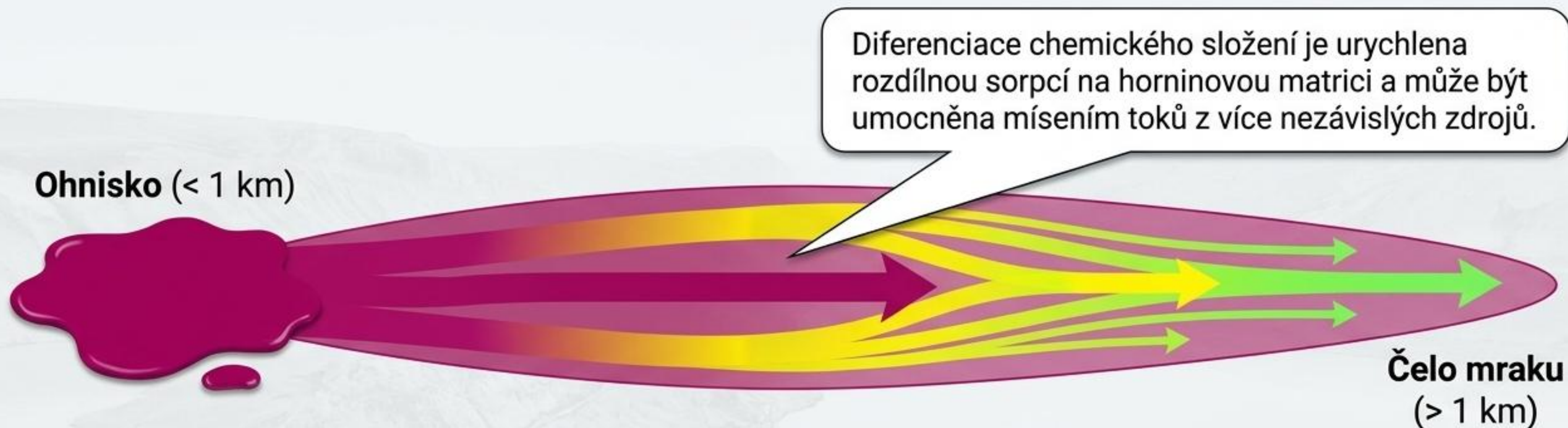


Stabilita

Koncentrace zůstávají v čase
relativně stabilní (výkyvy do 50 %).
Potvrzuje to vliv dlouhodobého
sekundárního zdroje.

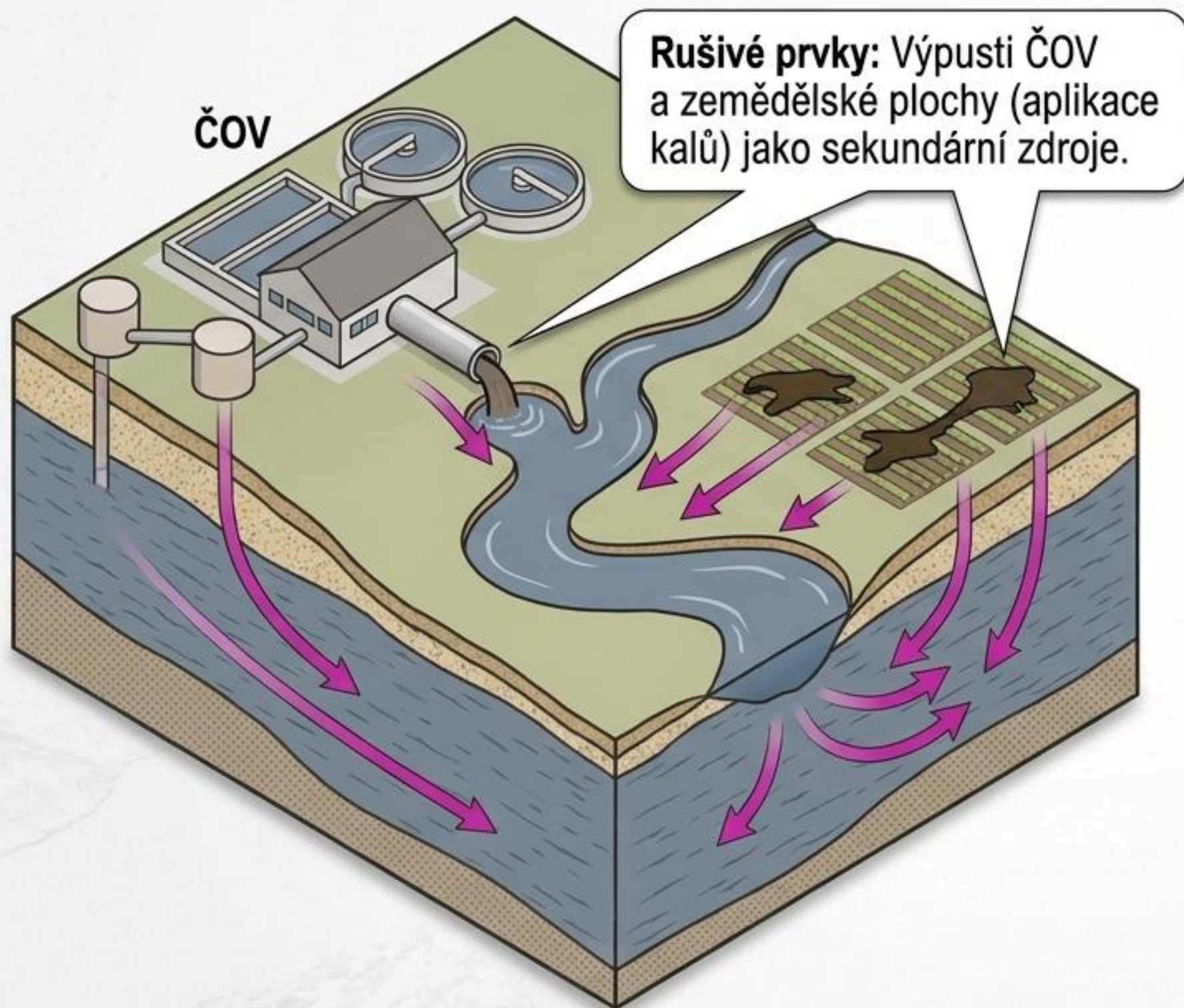


Fenomén zemní chromatografie: Frakcionace kontaminačního mraku



Blízká zóna (< 1 km)	Vzdálená zóna (> 1 km)
• PFOS tvoří 62,77–79,00 % sumy PFAS. • Silná sorpce a retence dlouhých řetězců udržuje těžiště kontaminace v blízkosti zdroje.	• PFOS klesá na 40,14–45,53 %. • Minoritní zástupci skokově rostou: výrazně se prosazují vysoce mobilní krátké řetězce PFBA, PFPreA, PFHxA a PFOA.

Koncový bod: Povrchové vody a extrémní bioakumulace



Kvalita povrchových vod

Potvrzeno **plošné překročení limitů** nařízení vlády č. 401/2015 Sb.

Bioakumulační filtr

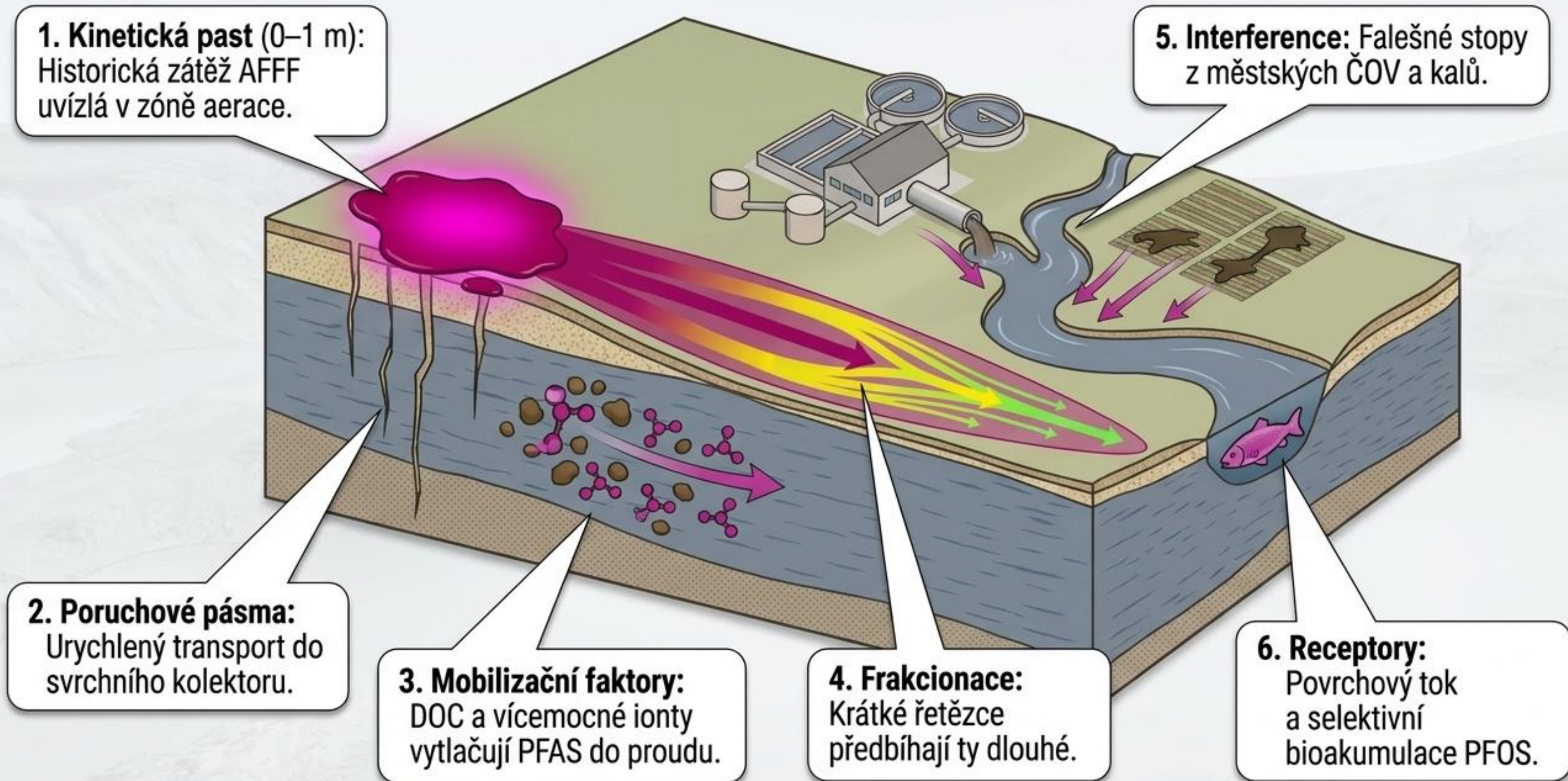


Ačkoliv voda přináší pestrou směs kongenerů, biota filtruje selektivně. Ve svalovině ryb dominuje **PFOS** v astronomickém podílu **96,4–99,06 %**.

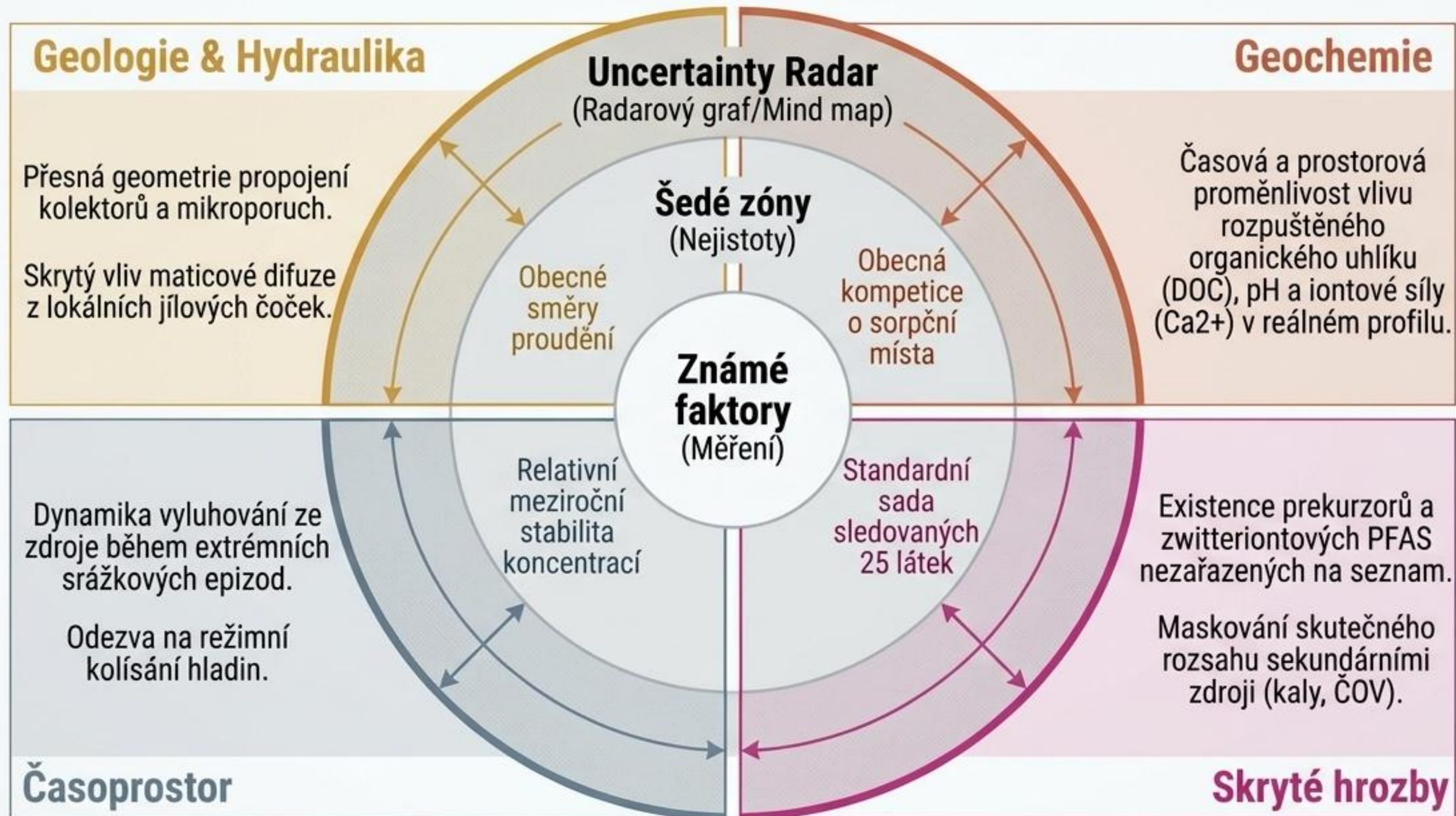
Zasažení bioty a limity

- Sumární koncentrace v řádu **desítek až stovek ng/g**.
- Dramatické překročení normy (NEK-RP) pro PFOS v biotě (**limit 9,1 ng/g**).
- Výrazně přesahuje limit tolerovatelného příjmu EFSA (TWI **4,4 ng/kg** tělesné váhy/týden).

Komplexní dynamika kontaminačního mraku



Mapa interpretačních nejistot

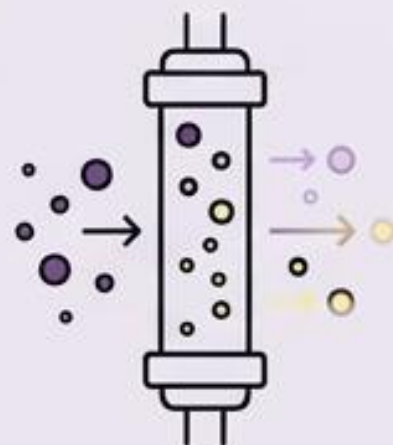


Klíčové implikace pro hydrogeologickou praxi



Zóna aerace je dominantní riziko

Největší zásoba historického znečištění přetrvává v hloubce 0,5–1,0 m. Bez řízení a sanace nesaturované zóny bude dotace kolektorů trvat desítky let. Proces evapokoncentrace navíc brání přirozenému samočištění průsakem.



Vzdálenost mění chemický podpis

Rozsah sanace a modelování nesmí stavět jen na mapování PFOS. Znečištění se na delších vzdálenostech stává doménou vysoce mobilních, slabě se sorbujících krátkých řetězců (PFPeA, PFHxA), kterým v transportu zásadně pomáhá kompetice s DOC.



Heterogenita klame tradiční měření

Maticová difuze a otevřené poruchové zóny ovlivňují jak směr, tak chemické složení mraku. K plnému pochopení reálných rizik je kritická analýza prekurzorů a striktní detekce sekundárních komunitárních vlivů (ČOV, kaly) v drenážní bázi.