

## 1 Introducción

Comprender el destino ambiental y el transporte de una sustancia química en el medio ambiente es fundamental para la investigación y remediación de cualquier sitio contaminado. Esta ficha se enfoca en cómo las propiedades químicas y físicas únicas de PFAS afectan su comportamiento en el medio ambiente. Para más información consulte el documento de orientación.

Las PFAS son una familia de compuestos utilizados en or para crear recubrimientos antiadherentes, textiles, productos de papel, algunas espumas contra incendios y muchos otros productos. Estos compuestos tienen varias aplicaciones en la fabricación y producción porque repelen el aceite y el agua, resisten temperaturas extremas, y reducen la fricción. Las PFAS incluyen compuestos que varían en peso molecular y pueden tener múltiples estructuras y grupos funcionales. La fabricación y el uso de estos compuestos ha resultado en su presencia en el medio ambiente a través de los años.

La comunidad científica está reconociendo rápidamente los efectos de las PFAS en el medio ambiente y para la salud. Algunos de los ácidos perfluoroalquilados (PFAA por sus siglas en inglés), tales como el ácido perfluorooctanóico (PFOA pos sus siglas en inglés), y sulfonato perfluorooctanóico (PFOS por sus siglas en inglés) son móviles, persistentes, y bioacumulativos, y no se sabe que se degraden en el medio ambiente (USEPA 2003b; ATSDR 2015; NTO 2016; CONCAWE 2016).

ITRC ha desarrollado una serie de fichas técnicas que resumen la ciencia reciente y tecnologías emergentes sobre PFAS. La información en esta y otras fichas sobre PFAS se describe en más detalle en el Documento de orientación técnica y regulatoria de ITRC (**Documento de Orientación** (<https://pfas-1.itrcweb.org/>)).

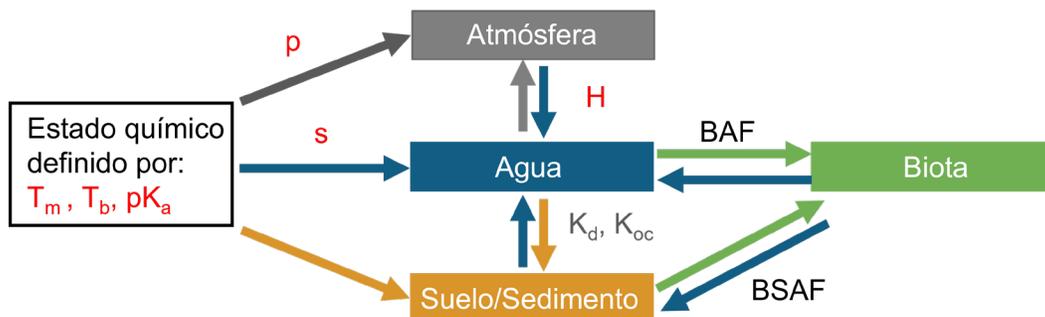
Esta ficha describe

- Las propiedades físicas y químicas de las PFAS que afectan el estado de compuesto y partición de fases en el medio ambiente
- El comportamiento de partición de fases y transporte de las PFAS
- La transformación abiótica y biótica de ciertas PFAS en el medio ambiente

## 2 Propiedades físicas y químicas

Las propiedades físicas y químicas de las PFAS junto con las características del sistema ambiental determinan el comportamiento ambiental incluyendo el estado del compuesto y el comportamiento de partición de fases (partitioning - add 'de fases' to partición) (Banks, Smart y Tatlow 1994). La separación puede ocurrir entre formas moleculares neutras e iónicas, estados sólidos y líquidos, y entre diferentes medios ambientales y biota (acuosa, fase pura, suelo/sedimento, biota, y atmosférica). El comportamiento ambiental de muchas PFAS es aún más complicado por sus propiedades surfactantes.

La figura 1 ilustra las propiedades químicas y físicas claves y los coeficientes de distribución. Comparando las propiedades químicas y físicas de diferentes PFAS proporciona información sobre las similitudes y diferencias en sus comportamientos en el ambiente y puede informar el diseño de la investigación:



**Figure 1. Rol de las propiedades físicas y químicas claves (en color rojo) en el comportamiento ambiental de compuestos**

Otros coeficientes de distribución claves (BAF y BSAF mostrados en gris) se abordan en las secciones 5.1 (Tabla 5.1) y 9.2 del documento de orientación.  $T_m$  = punto de fusión;  $T_b$  = punto de ebullición;  $pK_a$  = constante de disociación ácida (acid dissociation constant);  $p$  = presión de vapor;  $S$  = solubilidad;  $H$  = constante adimensional de la ley de Henry;  $K_d$  = coeficiente de partición de suelo y sedimento;  $K_{oc}$  = coeficiente de partición del carbono orgánico; BAF = factor de bioacumulación; y BSAF = factor de acumulación de biota-sedimento..

## El destino ambiental y transporte de PFAS *continuación*

Existe una variación en los datos publicados sobre las propiedades químicas y físicas de las PFAS. Las propiedades físicas y químicas confiables de las PFAS son escasas (por ejemplo, la presión de vapor y los constantes de la ley de Henry), y algunos valores disponibles se modelan en lugar de medirse directamente. Con algunas excepciones (por ejemplo, K<sub>oc</sub>), varias de las propiedades disponibles se basan en la forma ácida del PFAA que no está presente en medios ambientales acuosos a menos que el pH del medio acuoso son <3, algo que no es típico. La tabla 1 proporciona un resumen general de la información sobre las propiedades químicas y físicas disponibles para las PFCA y la sensibilidad de esta información en relación con la forma ácida vs. la aniónica. Algunas propiedades sí tienen información documentada (Martin et al. 2003) como el factor de bioconcentración y las propiedades del factor de bioacumulación que tienen formas aniónicas de PFOA y PFOS mientras que otras propiedades no están fácilmente disponibles.

Para una descripción detallada de estas propiedades y las incertidumbres en los valores publicados consulte el documento de orientación. La tabla de propiedades físicas y químicas resume algunas de las propiedades físicas y químicas que están disponible para las PFAS y está provista como una hoja de cálculo aparte del documento de orientación (<https://pfas-1.itrcweb.org/4-physical-and-chemical-properties/>).

**Tabla 1. Propiedades físicas y químicas disponibles para las PFCA.**

Estado de PFAA	Número CAS	S <sub>w</sub>	P <sup>o</sup>	K <sub>h</sub>	K <sub>ow</sub>	K <sub>oc</sub>	Relevancia ambiental
Ácido	Y	Y	Y	E	E	E	No
Cation:							No
NH <sup>+</sup>	Y	Y	N	N	N	N	
Li <sup>+</sup>	Y	Y	N	N	N	N	
Na <sup>+</sup>	Y	Y	N	N	N	N	Sí
Anion	M	N	N	N	N	Y	

S<sub>w</sub> = solubilidad acuosa      P<sup>o</sup> = presión de vapor      K<sub>h</sub> = Constante de la Ley de Henryt      K<sub>ow</sub> = Coeficiente de partición octanol/agua  
 K<sub>oc</sub> = coeficiente de partición de carbono orgánico      Y = datos disponibles      N = No hay datos disponibles      M = Datos disponible para algunos      E = Estimaciones, datos no medidos directamente

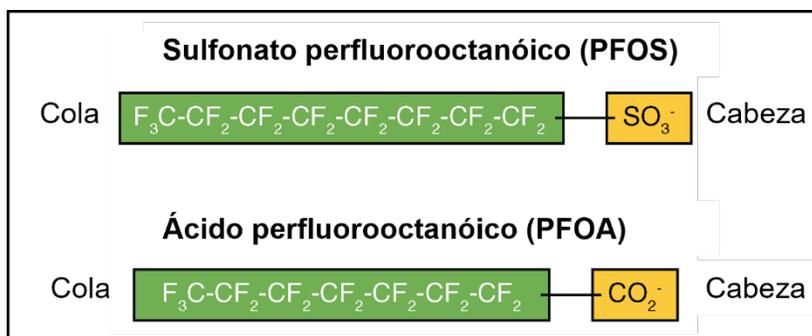
### 3 Procedimientos para el destino ambiental y transporte

La partición de fases, el transporte, y la transformación de las PFAS ocurre en varios tipos de medios ambientales. Mientras que la mayoría de la literatura de investigaciones se centra en las PFAAs (especialmente PFOS y PFOA), también son importantes los procesos afectando las PFAS precursoras que pueden degradarse a PFAA con el tiempo. Consulte la sección 5 del documento de orientación para obtener información adicional sobre el destino ambiental y el transporte.

#### Partición de fases

Las PFAS más comúnmente detectadas en el medio ambiente típicamente tienen una “cola” de carbono-flúor y una “cabeza” no fluorada que consta de un grupo funcional polar, como se ilustra en la figura 2 para PFOS y PFOA. La cola es hidrófoba y lipofílica, mientras que los grupos de la cabeza son polares e hidrófilos.

Los mecanismos importantes de partición de PFAS incluyen efectos hidrofóbicos y lipofóbicos, interacciones electrostáticas y comportamientos interfaciales. Los efectos hidrofóbicos y lipofóbicos impulsan la asociación con el carbono orgánico en los suelos. Las interacciones electrostáticas son una función de la carga del grupo funcional polar en la cabeza de la molécula. Debido a que la cabeza y la cola compiten, la



**Figura 2. Cabeza y cola en las estructuras de PFOS y PFOA**

## El destino ambiental y transporte de PFAS *continuación*

partición de fases en las interfaces de medios ambientales como el suelo/agua, el agua/aire, y el agua/NAPL de contaminantes puede resultar (Guelfo and Higgins 2013; McKenzie et al. 2016; Brusseau 2018). NAPL=fase líquida no acuosa por sus siglas en inglés.

En comparación a otras PFAs se ha estudiado el comportamiento de partición de carboxilatos perfluoroalquílicos (PFCAs) y sulfonatos de perfluoroalcanos (PFSA) en más profundidad. A ciertos valores de pH ambientales las PFCA y PFSA están presentes como aniones y son relativamente móviles en las aguas subterráneas (Xiao et al. 2015), pero tienden a asociarse con la fracción de carbono orgánico (organic carbon fraction) que puede estar presente en el suelo o sedimento (Higgins and Luthy 2006; Guelfo and Higgins 2013).

Generalmente la sorción y el retardo aumentan con la longitud de la cola de perfluoroalquilo (Guelfo and Higgins 2013; Sepulvado et al. 2011), lo que indica que las PFSA y PFCA de cadena corta se retardan menos que sus contrapartes de cadena larga (PFOS y PFOA, respectivamente). Además, las PFAS tienden a adsorberse (sorb) más frecuentemente que las PFCA de cadenas similares en longitud (Higgins y Luthy 2006), y aparece que los isómeros ramificados tienen menos sorción que los lineales (Kärman et al. 2011).

### Transporte ambiental

La resistencia de la mayoría de las PFAS a la degradación biótica o abiótica (excepto de la transformación de las PFAS precursoras (precursor transformation) incluidas aquí) indica que los procesos del transporte físico son críticos para el transporte de las PFAS y el potencial de exposición.

#### *La Advección, dispersión, difusión*

Procesos como la advección, la dispersión, y la difusión pueden influir fuertemente la migración de las PFAS dentro y entre medios. Advección (el transporte del flujo relacionado de compuestos dentro un fluido como el agua o el aire) impulsa la movilidad de las PFAS en muchos casos. Sin embargo, la advección no reduce la concentración a lo largo de la trayectoria del flujo.

Los cambios a pequeña escala en las velocidades del aire y del agua superficial pueden dispersar contaminantes en varias direcciones contribuyendo a una mezcla vertical rápida de PFAS y transporte cruzando medios ambientales (cross-media) (por ejemplo, el agua superficial al sedimento y disposición del aire a la superficie del suelo).

Las moléculas que se mueven en respuesta a un gradiente de concentración en el aire y el agua son conocidos como difusión. La mezcla causada por turbulencia en el agua superficial y en el aire es también conocida como difusión de remolinos (eddy diffusion). A menudo se ignora la difusión en las aguas subterráneas porque las tasas de difusión son lentas en comparación a la advección. Sin embargo, la difusión de masa contaminante en suelos de menor permeabilidad o materiales del sitio tales como las arcillas, el lecho de roca, y el cemento (concrete) pueden aumentar la persistencia de las PFAS a largo plazo en aguas subterráneas.

Procesos críticos del transporte de las PFAS incluyen: advección, dispersión, difusión, deposición atmosférica, y lixiviación.

- El transporte atmosférico y la deposición pueden causar una acumulación medible de PFAS lejos de su fuente de emisión.
- La lixiviación de PFAS hacia abajo en suelos no saturados durante eventos de precipitación o riego es específico al sitio y ocurre como función de los medios ambientales y las propiedades estructurales de las PFAS.
- En concentraciones altas las PFAA pueden formar micelas que pueden mejorar o reducir la adsorción en carbón y minerales.

#### *Deposición ambiental (Sedimentación)*

Mientras que varias PFAS exhiben una volatilidad relativamente baja, el transporte aéreo de algunas PFAS es una vía de migración pertinente a través de emisiones industriales (por ejemplo, emisiones de chimenea). Una vez en el aire, algunas PFAS están sujetas a fotooxidación y transporte, pero eventualmente pueden acumularse a niveles mensurables en el suelo y las aguas superficiales a través de la sedimentación atmosférica (atmospheric deposition) (Young and Mabury 2010; Ahrens and Bundschuh 2014; Rankin et al. 2016). La sedimentación atmosférica puede ocurrir como sedimentación seca o húmeda, las cuales son pertinentes para las PFAS (Barton, Kaiser, y Russell 2007, 2010; Dreyer et al. 2010; Taniyasu et al. 2013). Durante la sedimentación seca las PFAS que se asocian preferentemente con fases líquidas o partículas en el aire (aerosoles) pueden depositarse naturalmente en las superficies por sedimentación (sedimentation), difusión u otros procesos. Cuando la precipitación lava estos aerosoles que contienen PFAS, el proceso se conoce como sedimentación húmeda.

## El destino ambiental y transporte de PFAS *continuación*

### Lixiviación

Las PFAS presentes en suelos no saturados están sujetos a lixiviación hacia abajo durante los eventos de precipitación o riego que promueven disolución de la masa contaminante ligada al suelo (Sepulvado et al. 2011; Ahrens y Bundschun 2014). Este proceso es potencialmente clave para el transporte de PFAS de los suelos superficiales a las aguas subterráneas y superficiales, porque las emisiones a menudo implican aplicaciones superficiales o sedimentación atmosférica. La lixiviación también es potencialmente relevante para la absorción y el transporte de las PFAS contenidas en los residuos de vertederos que no contienen un control adecuado de los lixiviados (Benskin, Muir, et al. 2012; Yan et al. 2015; Lang et al. 2017). El potencial de lixiviación es una función tanto de las propiedades de los medios ambientales (por ejemplo, el Ph y el aumento de la partición con suelo orgánico fértil (organicrich)) como las propiedades estructurales de las PFAS (por ejemplo, la carga iónica y la longitud de la cadena) (Gellrich, Stahl, y Knepper 2012).

- Las PFAS precursoras se pueden transformar a PFAA a través de procesos bióticos y abióticos.
- Las tasas de transformación son variables y específicas al sitio.
- No hay evidencia de que las PFAA se transformen bajo condiciones ambientales en el medio ambiente.

### Propiedades de los surfactantes y formación de micelas

Las PFAS exhiben propiedades surfactantes porque a menudo contienen porciones hidrofóbicas e hidrofílicas que afectan el transporte en formas que son complejas y no bien entendidas. Por diseño, muchas PFAS forman películas en la interfaz de aire-agua con la cola hidrofóbica de carbono-flúor (C-F) orientada hacia el aire y la cabeza hidrofílica disuelta en el agua (Krafft y Riess 2015). Este comportamiento de las PFAS influye el transporte y deposición basados en aerosoles y sugiere que las PFAS se acumulan en la superficie del agua (Prevedouros et al. 2006). Esta preferencia por la interfase de aire-agua también puede influir el transporte de la zona vadosa donde las condiciones no saturadas proporcionan un área interfacial de aire-agua. La adsorción de PFOS y PFOA en la interfase de aire-agua puede aumentar el factor de retardo para el transporte en fase acuosa.

En concentraciones más altas, las PFAA pueden formar conglomerados (aggregates) en los que las porciones hidrofílicas interactúan con la fase de agua y las porciones hidrofóbicas interactúan entre sí (por ejemplo, micelas o hemimicelas (hemimicelles)). Esta tendencia a conglomerar puede hacer que las PFAA actúen de manera diferente a altas concentraciones y puede mejorar o reducir la adsorción en el medio ambiente.

### La Transformación de las PFAS

Transformaciones bióticas y abióticas de algunas sustancias polifluoradas (PFAS precursoras) pueden formar PFAA. Sin embargo, es probable que las PFAA no se degradan ni se transforman en condiciones ambientales en el medio ambiente. A diferencia de las PFAA fluoradas, las PFAS precursoras contienen carbono-hidrógeno (C-H) y enlaces de carbono-oxígeno (C-O) que están sujetos a una variedad de reacciones bióticas y abióticas que finalmente forman los productos terminales. Mientras que los estudios disponibles sobre la transformación biótica y abiótica de las PFAS precursoras consisten principalmente en experimentos controlados de laboratorio (discutidos a continuación), varios estudios en campo han demostrado la importancia de las PFAS precursoras en una variedad de sitios (por ejemplo, Weber et al. 2017; Dassuncao et al. 2017).

### La Transformación abiótica

Los procesos abióticos que pueden transformar las PFAS precursoras en condiciones ambientales en el medio ambiente incluyen hidrólisis, fotólisis, y oxidación. La hidrólisis de algunas PFAS precursoras seguido de una biotransformación subsecuente puede producir PFCA y PFSA. Por ejemplo, la PFOS se produce de fluoruro de sulfonilo de perfluorooctano (POSF) (Martin et al. 2010) y PFOA y otras PFCA son producidas por el hidrólisis y las PFAS precursoras derivadas de fluorotelómeros (fluorotelomer) (Washington y Jenkins 2015). Mientras que no se ha observado la fotólisis directa de PFAS, la fotólisis indirecta de algunas PFAS precursoras, en particular alcoholes fluoroteloméricos (FTOH), ocurre en la atmósfera y puede contribuir a la deposición de PFCA (Armitage, MacLeod, and Cousins 2009; Yarwood et al. 2007).

También se pueden degradar abióticamente las sulfonamidas de perfluoroalcanos a través de la oxidación en la atmósfera para formar PFCA en cantidades (yields) que pueden ser 10 veces mayor que las FTOH (Martin et al. 2006). También se pueden producir PFAS de cadena corta como PFBS por reacciones de oxidación entre radicales hidroxilo y derivados de sulfonamidas (sulfonamido) (D'Eon et al. 2006). Finalmente, en algunos casos,

## El destino ambiental y transporte de PFAS *continuación*

es posible que las transformaciones de las PFAS precursoras abióticas no produzcan ninguna PFAA inicialmente aunque la formación de PFAA eventualmente aún pueda ser posible (Martin et al. 2010).

### La transformación biótica

Mientras que la PFOA, PFOS, y otras PFAA son resistentes a la degradación microbiana, varios estudios han reportado biotransformaciones de varias PFAS precursoras similares a las transformaciones abióticas discutidas en este documento. La literatura actual indica que existen varias vías de biotransformación aeróbica, con cinéticas relativamente rápidas y todas las PFAS precursoras polifluoradas pueden tener el potencial de biotransformar aeróbicamente en PFAA. Se han publicado menos estudios sobre biotransformación anaeróbica de PFAS. Se ha observado que las FTOH se biotransforman anaeróbicamente pero parecen formar ácidos polifluorados estables en lugar de PFCA o PFSA (Zhang, Szostek et al. 2013; Allred et al. 2015). Se observó la desfluoración de PFOA y PFOS durante la oxidación anaeróbica de amonio en condiciones de reducción de hierro (Huang y Jaffé 2019).

## 4 Referencias y acrónimos

Las referencias citadas en esta ficha y otras referencias se pueden encontrar en <https://pfas-1.itrcweb.org/references/> (en inglés). Los acrónimos usados en esta ficha y en el documento de orientación se pueden encontrar en <https://pfas-1.itrcweb.org/acronyms/> (en inglés).

Traducción a español:

Ivy Torres, MA ([irtorres@uci.edu](mailto:irtorres@uci.edu)) Program in Public Health, University of California, Irvine (UCI)

y Christopher Olivares, PhD ([chris.olivares@uci.edu](mailto:chris.olivares@uci.edu)) Civil & Environmental Engineering, UCI



### Contactos del equipo de sustancias per- y polifluoroalquiladas (PFAS)

**Robert Mueller** • New Jersey Department of Environmental Protection  
609-940-4018 • [Bob.Mueller@dep.nj.gov](mailto:Bob.Mueller@dep.nj.gov)

**Kate Emma Schlosser** • New Hampshire Department of Environmental Services  
603-271-2910 • [KateEmma.Schlosser@des.nh.gov](mailto:KateEmma.Schlosser@des.nh.gov)

August 2020



**ITRC**  
1250 H St. NW, Suite 850  
Washington, DC 20005  
[itrcweb.org](http://itrcweb.org)

