

UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO  
ESCOLA POLITÉCNICA

ALINE ANSARA STEFANI

**AVALIAÇÃO DA MOBILIDADE E DISTRIBUIÇÃO VERTICAL DE VOCS E  
SVOCS EM INDÚSTRIA QUÍMICA CONTAMINADA POR MEIO DE  
FERRAMENTAS ESTATÍSTICAS**

São Paulo  
2024

# **AVALIAÇÃO DA MOBILIDADE E DISTRIBUIÇÃO VERTICAL DE VOCS E SVOCS EM INDÚSTRIA QUÍMICA CONTAMINADA POR MEIO DE FERRAMENTAS ESTATÍSTICAS**

## **Monografia**

Monografia apresentada à Escola Politécnica da Universidade de São Paulo como parte dos requisitos para a obtenção do título de Especialista em Gestão de Áreas Contaminadas, Desenvolvimento Urbano Sustentável e Revitalização de Brownfields.

Orientador: Prof. Dr. Marcio Costa Alberto

São Paulo

2024

Autorizo a reprodução e divulgação total ou parcial deste trabalho, por qualquer meio convencional ou eletrônico, para fins de estudo e pesquisa, desde que citada a fonte.

#### Catálogo na Publicação

Stefani, Aline Ansara

AVALIAÇÃO DA MOBILIDADE E DISTRIBUIÇÃO  
VERTICAL DE VOCS E SVOCS EM INDÚSTRIA QUÍMICA  
CONTAMINADA POR MEIO DE FERRAMENTAS ESTATÍSTICAS/  
A. A. Stefani – São Paulo, 2024.

Monografia (MBA em Gestão de Áreas Contaminadas,  
Desenvolvimento Urbano Sustentável e Revitalização de *Brownfields*) -  
Escola Politécnica da Universidade de São Paulo.

1. Áreas Contaminadas 2. Contaminação do Solo 3.  
Contaminação em Água Subterrânea 4. Mecanismos de  
transporte 5. Mobilidade de compostos orgânicos

## RESUMO

Stefani, Aline Ansara. Avaliação da mobilidade e distribuição vertical de VOCs e SVOCs em indústria química contaminada por meio de ferramentas estatísticas. 2024. Monografia (MBA em Gestão de Áreas Contaminadas, Desenvolvimento Urbano Sustentável e Revitalização de Brownfields) – Escola Politécnica, Universidade de São Paulo, São Paulo, 2024.

O presente estudo apresenta uma avaliação qualitativa e estatística da distribuição vertical de compostos orgânicos voláteis e semi-voláteis em uma propriedade industrial contaminada desativada. A área de estudo possui um longo histórico de contaminação, marcado pelo vazamento de misturas complexas de substâncias químicas de interesse (SQIs) provenientes de múltiplas fontes em ambiente de geologia heterogênea, o que dificulta a previsibilidade da distribuição dessas SQIs e requer altos investimentos com investigação e remediação.

Com o objetivo de compreender a distribuição de SQIs no site e estabelecer raciocínios que auxiliem na previsibilidade dos compartimentos não avaliados do *site*, o estudo englobou a avaliação de propriedades físico-químicas das SQIs isoladamente, avaliação estatística descritiva e multi-variada e avaliação qualitativa da composição de amostras em profundidade. Resultados analíticos de 372 amostras de solo coletadas entre 2012 e 2019 e 32 amostras de água subterrânea (segundo semestre de 2021) foram avaliados.

Os grupos de SQIs do site são BTEX, cloroanilinas, clorobenzenos, nitroclorobenzenos, pesticidas e “outros”. A presença destes compostos foi avaliada por matriz (solo e água subterrânea) e por unidade estratigráfica (UH). Discussões foram traçadas em âmbito qualitativo e semelhanças estatísticas foram avaliadas a partir de análise estatísticas de escalonamento multidimensional não métrico (*non-metric multidimensional scaling* – NMDS).

Dentre as principais conclusões do estudo, destaca-se que, apesar de haver a discriminação de 7 áreas fonte no modelo conceitual do site (A, B, C, D, E, F e G), a avaliação estatística multi-variada revelou grupos de amostras de composições semelhantes em áreas fontes diferentes e *clusters* diferentes de amostra de mesmo nível estratigráfico numa única área. Amostras de água subterrânea apresentaram compatibilidade com composições apresentadas por amostras de solo.

Em suma, em se tratando da previsibilidade de distribuição de substâncias no site, percebe-se que há maiores massas em solo na UH 1, SQIs mais solúveis e voláteis em zonas de fluxo da UH 2, máximo de massas em água na UH 3, e substâncias que se distanciaram mais de suas áreas fonte foram as mais solúveis e de menor K<sub>oc</sub> e K<sub>ow</sub>, que apareceram em concentrações

traços na UH 6 e 8 (1,2-dicloroetano e clorobenzeno). Em solo, tolueno, clorobenzeno, benzeno e 1,2-dicloroetano foram as predominantes (UH 6)..

O estudo sugere, portanto, que não há necessidade de realizar mais perfurações para amostragem nas UHs 6 e 8, que a barreira tem atraído compostos mais solúveis para as unidades HSUs 3 e 4, a UH 2 deve representar expressiva fonte secundária mas contém muita massa de substâncias de baixa mobilidade e a UH 1 foi bem caracterizada, com densidade de amostragem próximo às áreas fonte justificáveis para delimitação de potenciais volumes detalhados para remediação.

## LISTA DE FIGURAS

Figura 1. Hidroestratigrafia da área de estudo (modificado de fonte confidencial) .....	12
Figura 2. Mapa esquemático do site, suas áreas fonte (A – G) e mapa potenciométrico.....	14
Figura 3. Seção hidrogeológica A-A' (oteste-leste).....	14
Figura 4. Gráfico de caixa (Box Plot): peso molecular das SQIs do site .....	20
Figura 5. Gráfico de caixa (Box Plot): Densidade das SQIs do site.....	21
Figura 6. Gráfico de caixa (Box Plot): Solubilidade das SQIs do site .....	22
Figura 7. Gráfico de caixa (Box Plot): Pressão de vapor das SQIs do site .....	22
Figura 8. Gráfico de caixa (Box Plot): Ponto de fusão das SQIs do site.....	23
Figura 9. Gráfico de caixa (Box Plot): Coeficiente de partição carbono orgânico-água das SQIs do site.....	24
Figura 10. Gráfico de caixa (Box Plot): Coeficiente de partição octanol-água das SQIs do site .....	25
Figura 11. Gráfico NMDS – eixos primários e secundários são compostos semelhantes; UHs representadas em cores e matrizes AS (água subterrânea) e SO (solo) com símbolos. ....	29
Figura 12. Gráfico NMDS – eixos primários e secundários são compostos semelhantes; UHs representadas por símbolos e áreas fonte representativas da coleta da amostra representada com cores. ....	30
Figura 13. Gráfico NMDS – eixos primários e secundários são compostos semelhantes; áreas fonte representadas em cores e matrizes com símbolos. ....	30
Figura 14. Gráfico NMDS representativo da Área A - eixos primários e secundários são compostos semelhantes; áreas fonte representadas em cores e matrizes com símbolos. ....	31
Figura 15. Gráfico NMDS representativo da Área B - eixos primários e secundários são compostos semelhantes; áreas fonte representadas em cores e matrizes com símbolos. ....	31
Figura 16. Gráfico NMDS representativo da Área C - eixos primários e secundários são compostos semelhantes; áreas fonte representadas em cores e matrizes com símbolos. ....	32
Figura 17. Gráfico NMDS representativo da Área D - eixos primários e secundários são compostos semelhantes; áreas fonte representadas em cores e matrizes com símbolos. ....	32
Figura 18. Gráfico NMDS representativo da Área E - eixos primários e secundários são compostos semelhantes; áreas fonte representadas em cores e matrizes com símbolos. ....	33
Figura 19. Gráfico NMDS representativo da Área F - eixos primários e secundários são compostos semelhantes; áreas fonte representadas em cores e matrizes com símbolos. ....	33
Figura 20. Gráfico NMDS representativo da Área G - eixos primários e secundários são compostos semelhantes; áreas fonte representadas em cores e matrizes com símbolos. ....	34
Figura 21. Compilação de gráficos de parâmetros físico-químicos .....	36
Figura 22. Avaliação de clusters de amostras de solo e água subterrânea por nível estratigráfico a cada área em diagramas NMDS .....	40
Figura 23. Gráficos de barras empilhadas apresentando a predominância de SQIs por amostras em sondagens representativas de cada área .....	43

## LISTA DE TABELAS

Tabela 1. Avaliação estatística descritiva de dados de solo .....	27
Tabela 2. Avaliação estatística descritiva de dados de água subterrânea .....	28
Tabela 3. Compilação da avaliação estatística descritiva - SQIs predominantes por nível e matriz.....	37

## SUMÁRIO

1. INTRODUÇÃO.....	9
2. REVISÃO BIBLIOGRÁFICA.....	10
2.1 Geologia regional e local.....	10
2.2 Hidrogeologia regional e local .....	11
2.3 Propriedades físico-químicas das substâncias químicas de interesse.....	14
2.4 Comportamento de compostos químicos em subsuperfície .....	16
2.5 Avaliação estatística NMDS.....	16
3. OBJETIVOS.....	17
4. MATERIAIS E MÉTODOS.....	18
5. RESULTADOS OBTIDOS.....	20
a. Avaliação de propriedades físico-químicas das SQIs.....	20
b. Avaliação estatística descritiva de resultados analíticos .....	25
c. Avaliação estatística NMDS de resultados analíticos .....	29
d. Avaliação qualitativa de resultados analíticos.....	34
6. DISCUSSÃO DOS RESULTADOS .....	35
7. CONCLUSÕES.....	44
8. REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS .....	46
ANEXO I - TABELAS .....	47



## 1. INTRODUÇÃO

Áreas industriais são grandes responsáveis pela contaminação de solo e água subterrânea e podem gerar risco ecológico e à saúde humana. Enquanto 35% da água consumida por humanos é proveniente de aquíferos e 20% da população mundial depende de água subterrânea, um significativo volume dos aquíferos estão contaminados.

A condução de investigação ambiental, o desenvolvimento de tecnologias de remediação, implantação de técnicas de remediação e o monitoramento demandam investimentos consideravelmente altos quando comparados aos custos recorrentes das indústrias. Muitas vezes, estratégias de remediação são implementadas enquanto o modelo conceitual da área ainda está imaturo e acabam por ser falhas ou ineficientes. A ineficiência de sistemas de remediação demanda novas investigações seguidas do planejamento e implementação de novas estratégias de remediação, o que impacta negativamente na credibilidade da atividade frente ao cliente, maior duração da atividade com relação ao originalmente previsto e maior custo para o cliente. Essa falta de resolução no diagnóstico de áreas contaminadas tem como consequência elevados custos para o gerenciamento do passivo da área e espalhamento da contaminação em maiores volumes de solo e água subterrânea.

Neste contexto, a necessidade de conhecer o comportamento e distribuição de contaminantes em subsuperfície é de extrema relevância para o planejamento de sistemas de remediação mais eficientes. Modelos matemáticos hidrogeológicos computacionais têm papel importante na previsão da dispersão destes contaminantes no meio físico para estabelecimento de medidas institucionais, de remediação, contenção e de engenharia. Entretanto, o comportamento de misturas complexas não é facilmente compreendido e pode compor padrões particulares em cada *site*.

Neste trabalho, a distribuição vertical de compostos orgânicos em solo e água subterrânea subjacente à uma indústria química contaminada será avaliada. A área de estudo possui um longo histórico de contaminação, marcado pelo vazamento de misturas complexas de compostos orgânicos voláteis e semi-voláteis provenientes de múltiplas fontes em ambiente de geologia heterogênea, o que dificulta a previsibilidade do alcance e distribuição de substâncias químicas de interesse (SQIs). Neste estudo, serão avaliadas propriedades de compostos isoladamente e, em seguida, a presença destes compostos será avaliada por matriz (solo e água subterrânea) e por nível estratigráfico. Discussões serão traçadas em âmbito qualitativo e semelhanças estatísticas serão avaliadas a partir de análise estatísticas de escalonamento multidimensional não métrico (*non-metric multidimensional scaling* – NMDS).

## 2. REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

A construção de um modelo conceitual suficientemente robusto para fundamentar projetos de remediação eficientes e eficazes para o gerenciamento de áreas contaminadas, conta com etapas de revisão bibliográfica. A caracterização a nível regional do meio físico de um *site* e o comportamento e padrão de transporte de compostos simples são bem compreendidos pela comunidade científica e devem servir de base para a elaboração de planos de investigação e remediação.

Este capítulo apresenta os materiais revisados para construção do presente estudo, partindo do entendimento da geologia regional e local da área de estudo, seguindo para propriedades físico-químicas das substâncias químicas de interesse (SQI) do *site*, comportamento esperado para os compostos presentes no *site* e conceitos estatísticos aplicados para tratamento de dados obtidos em um caso real.

Importante salientar que a localização e a identificação da área estudada foram obliterados, visando proteger as informações confidenciais fornecidas gentilmente pelo cliente.

### 2.1 Geologia regional e local

A área de estudo se localiza sobre uma bacia sedimentar do tipo *rift*, que compreende sedimentos continentais relacionados à sedimentação fluvial e lacustre nas eras Jurássica e Cretácea. Esses sedimentos representam uma espessura máxima estimada superior a 6.000,0 metros e contêm uma ampla variedade de fácies litológicas.

Com base na revisão da bibliografia regional, a litologia aflorante na área de estudo corresponde a sedimentos quaternários eólicos (dunas quaternárias), abaixo dos quais ocorre uma formação depositada durante a fase pós-*rift* da evolução da bacia. Esta formação é composta por arenitos e siltitos fracamente consolidados e intercalados, depositado sobre um conglomerado basal. Por motivos de confidencialidade, essa formação será denominada neste documento como “Formação Pós-Rift”. Essa formação possui uma espessura média de 50,0 metros na bacia regionalmente, com aproximadamente 30,0 metros de espessura na área de estudo.

Subjacente à “Formação Pós-Rift” ocorre uma formação depositada em momentos tardios da evolução da bacia (*sin-rift*), separada da Formação Pós-Rift por uma discordância erosiva. Esta formação, que receberá a nomenclatura de “Formação Sin-Rift” neste estudo, apresenta estruturas aluvionares de grande escala, marcada por pacotes mais espessos (dezenas de metros)

de arenitos maduros (com baixa porcentagem de sedimentos feldspáticos e caulinita) intercalados com camadas argilosas de dezenas de metros de espessura.

Sedimentos terciários e quaternários foram muito utilizados para a composição de aterros na construção de propriedades na região.

## **2.2 Hidrogeologia regional e local**

A Formação Sin-Rift possui aproximadamente sete mil quilômetros quadrados de área aflorante, cobrindo cerca de dois-terços da bacia estudada. O aquífero associado à Formação Sin-Rift se estende até cerca de mil metros de profundidade, sendo que, aproximadamente 70% da espessura saturada, corresponde a arenitos relativamente permeáveis. O aquífero é heterogêneo e localmente anisotrópico. Em algumas áreas, as condições do aquífero são confinadas ou semi-confinadas por estar assentado sobre unidades argilosas e siltosas de baixa permeabilidade. Em escala regional, o aquífero Sin-Rift é contínuo devido às dimensões e geometria das suas lentes de arenito.

A maioria do fluxo ocorre dentro das camadas arenosas e a vazão dos poços é fortemente influenciada pela presença destas lentes, quando interceptam a seção filtrante. A condutividade hidráulica do aquífero estimada está entre  $10^{-4}$  e  $10^{-2}$  centímetros por segundo (cm/s). Localmente, o aquífero Sin-Rift serve como fonte de abastecimento de água para áreas industriais e cidades vizinhas. Os filtros dos poços de produção no aquífero Sin-Rift estão entre 53,0 e 452,0 m. O aquífero é cortado por múltiplas falhas normais que podem atuar localmente como barreiras impermeáveis ao fluxo horizontal ou caminho preferencial para o fluxo de água subterrânea. A infiltração é a principal fonte de recarga do aquífero dentro da bacia e existe provavelmente uma componente de recarga lateral profunda do aquífero Sin-Rift proveniente de áreas a noroeste.

A Formação Pós-Rift sobreposta aflora a aproximadamente 3 km da área de estudo e seus níveis saturados apresentam condutividades hidráulicas na ordem de  $10^{-7}$  e  $10^{-3}$  cm/s. Devido à sua dependência hidráulica do aquífero Sin-Rift subjacente, não se interpreta a Formação Pós-Rift como uma unidade de aquífero única. Entretanto, a Formação Pós-Rift apresenta alta vulnerabilidade devido ao intenso uso industrial do solo localmente e a potenciais fontes de impactos ambientais. O gradiente hidráulico estimado para o sistema aquífero Pós-Rift/Sin-Rift é de 3,5 metros por quilômetro (m/km).

A hidrogeologia local é definida por unidades hidroestratigráficas (UH) específicas e condições de fluxo controladas por duas barreiras hidráulicas instaladas no limite oeste do *site*, para conter

a migração potencial de SQIs para fora do terreno. A relação entre as UHs e níveis de aquífero definidos para estudo da área é apresentado na Figura 1.

Estratigrafia		Unidade Hidroestratigráfica	
Fm Pós-Rift	Quaternário	1	Aterro (aquífero suspenso sazonal)
	Superior	2	Formação Pós-Rift Superior (Aquífero superior do site)
	Inferior	3	Formação Pós-Rift Inferior (Aquífero inferior do site)
Formação Sin-Rift	Superior	4	Formação Sin-Rift Superior (Aquífero inferior do site)
		5	Formação Sin-Rift Superior (Aquitarde do site)
	Inferior	6	Formação Sin-Rift Inferior (Aquífero Regional Superior)
		7	Formação Sin-Rift Inferior (Aquitarde Regional)
		8	Formação Sin-Rift Inferior (Aquífero Regional Inferior)

Figura 1. Hidroestratigrafia da área de estudo (modificado de fonte confidencial)

- **UH 1 – Aterro (0 – 7 m):** Aterro composto por sedimentos terciários e quaternários retrabalhados, delimitada na base por camada de argila orgânica plástica descontínua horizontalmente, eventualmente substituída por camada de silte arenoso marrom escuro, possui 5 a 7 m de espessura e apresenta condição de aquífero suspenso localmente e sazonalmente;
- **UH 2 – Formação Pós-Rift superior / Aquífero superior do site (7 – 15 m):** depósitos cretácios fluvio-eólicos heterogêneos, com intercalações de camadas arenosas, areno siltosas e areno-argilosas, com condutividades hidráulicas variando de  $10^{-3}$  a  $10^{-4}$  cm/s e coloração majoritariamente média a esbranquiçada;
- **UH 3 – Formação Pós-Rift inferior / Aquífero inferior do site (15 – 25 m):** composta por sedimentos da mesma formação da HSU 2, também de coloração majoritariamente esbranquiçada, porém com maior teor de finos e maior compactação, sendo impenetrável a sondagem *direct-push* e condutividade hidráulica variando de  $10^{-4}$  a  $10^{-5}$  cm/s;
- **UH 4 – Formação Sin-Rift superior / Aquífero inferior do site (25 – 45 m):** arenitos maduros, com menor teor de finos, homogêneos, com coloração bege, compactação maior que as camadas subjacentes e média geométrica de condutividades hidráulicas de  $10^{-3}$  cm/s;

- **UH 5 – Formação Sin-Rift superior / Aquitarde do site (45 – 55 m):** camadas silto argilosas avermelhadas com condutividade hidráulica em ordem de grandeza inferior a  $10^{-5}$  cm/s;
- **UH 6 – Formação Sin-Rift inferior / Aquífero Regional superior (55 – 75 m):** arenitos de coloração bege semelhantes à UH 4, homogêneos, com condutividade hidráulica de  $10^{-3}$  a  $10^{-4}$  cm/s;
- **UH 7 – Formação Sin-Rift inferior / Aquitarde Regional (75 – 85 m):** argila plástica rija (localmente descrita como folhelho) acimentado, com condutividade hidráulica inferior a  $10^{-6}$  cm/s; e
- **HSU 8 – Formação Sin-Rift inferior / Aquífero Regional inferior (> 85 m):** arenitos de coloração bege semelhantes às UH 4 e 6, homogêneos, com condutividade hidráulica em ordem de grandeza de  $10^{-3}$  a  $10^{-4}$  cm/s.

Há duas barreiras hidráulicas operando na extremidade Oeste do *site*:

- Barreira hidráulica “superior”: instalada no Aquífero Superior do *Site* (descrito abaixo), composta por cinco poços de bombeamento (BH-01, BH-02, BH-03, BH-04 e BH-05) com seção filtrante de 5,0 a 15,5 m (UH 2). As operações desta barreira hidráulica foram iniciadas em 2002.
- Barreira hidráulica “inferior”: instalada no Aquífero Inferior do *Site* (descrito abaixo), composta por três poços de bombeamento (BH-01B, BH-02B e BH-03B) com profundidade dos filtros variando de 23,0 a 53,0 m (UHs 3 e 4). A barreira hidráulica profunda teve início das operações em 1993.

Na área de estudo, o fluxo da água subterrânea se dá majoritariamente a oeste (Figuras 2 e 3), com componente vertical descendente entre as UHs 2 e 4 e ascendente das UHs 8 a 6 e 6 a 4. Entende-se que a barreira hidráulica “inferior” exerce expressiva influência na UH 4 (UH mais condutiva do site) e contribui para a convergência de linhas de fluxo de água subterrânea na mesma.

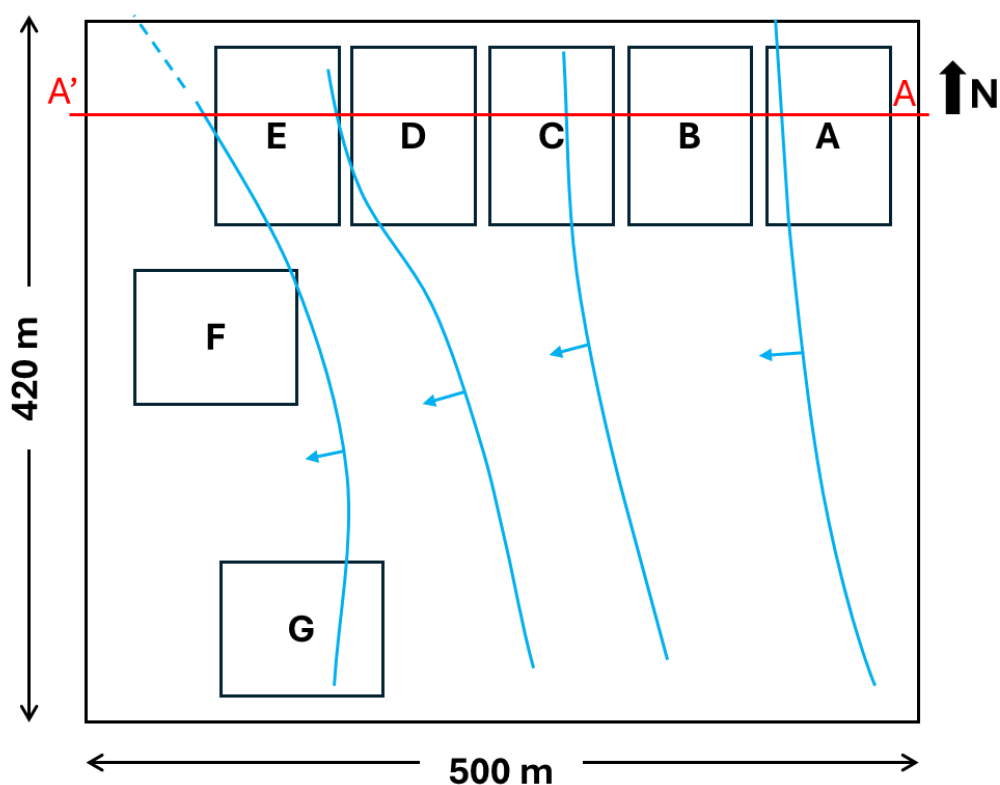


Figura 2. Mapa esquemático do site, suas áreas fonte (A – G) e mapa potenciométrico.

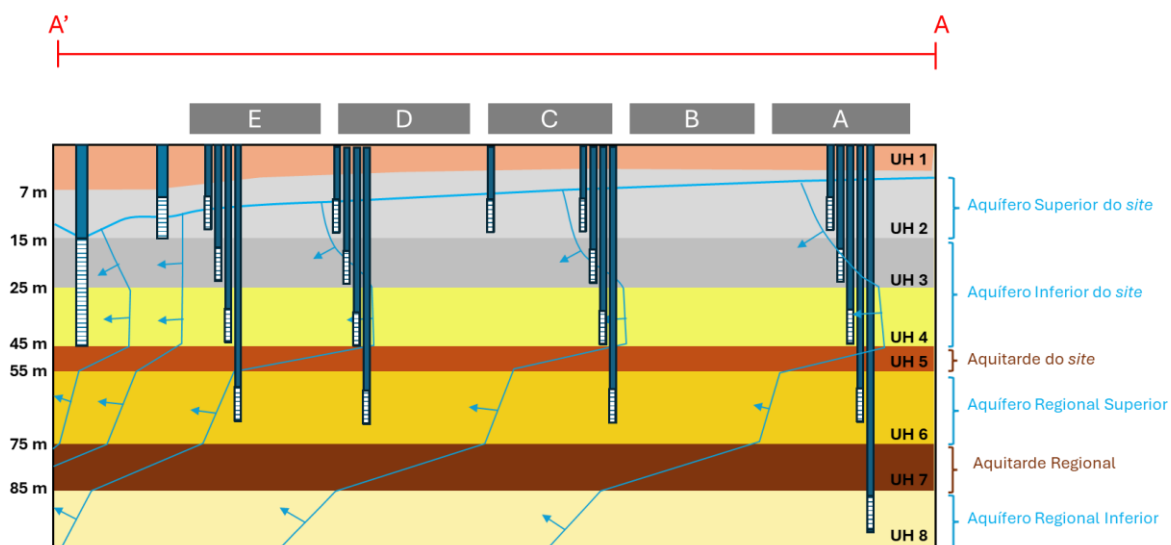


Figura 3. Seção hidrogeológica A-A' (oteste-leste)

### 2.3 Propriedades físico-químicas das substâncias químicas de interesse

Para avaliação do comportamento de substâncias, as propriedades físico-químicas das SQIs a seguir foram compiladas:

- Peso molecular (Z) – propriedade que condiciona moléculas mais pesadas a se moverem a maiores profundidades quando presentes em solução aquosa e mais leves a se manterem mais próximas à superfície em solução ou apresentarem maior facilidade para

particionarem para fase vapor (a depender das demais propriedades físico-químicas da substância);

- Densidade ( $d$ ) – de maneira similar ao peso molecular, compostos mais densos devem se mover a maiores profundidades quando em solução aquosa;
- Solubilidade em água ( $S$ ) – compostos solúveis tenderão a se dissolver em água subterrânea;
- Pressão de vapor ( $p_v$ ) – quanto maior a pressão de vapor de uma substância, maior é sua facilidade de romper as tensões intermoleculares e particionar para fase vapor;
- Temperatura de fusão/ebulição ( $T$ ) – parâmetro indicativo do estado físico da substância pura a temperatura ambiente. Compostos estarão em fase líquida quando sua temperatura de fusão for menor que a temperatura ambiente (considera-se neste estudo como temperatura ambiente para o meio subterrâneo o intervalo de 20 a 30°C);
- Constante de Henry ( $H$ ) – quanto maior a constante de Henry, mais volátil é o composto;
- Coeficiente de partição solo-água ( $K_d$ ) – coeficiente que dita o particionamento de um composto entre fase sólida e líquida, de forma que um  $K_d$  maior corresponde a maior sorção e, portanto, maior facilidade de um composto permanecer em fase sólida e consequentemente com menor mobilidade;
- Coeficiente de partição carbono orgânico-água ( $K_{oc}$ ) – propriedade que descreve a facilidade de um composto ocorrer em fase aquosa ou associado à matéria orgânica, de forma que maiores  $K_{oc}$  representam maior facilidade de um composto permanecer associado a matéria orgânica apresentando, portanto, menor mobilidade; e
- Coeficiente de partição octanol-água ( $K_{ow}$ ) – indica a afinidade de um composto por moléculas apolares, como octanol ou ácidos graxos, ou polares, como a água. Compostos com maiores valores de  $K_{ow}$  representam maior afinidade dos compostos à óleos e/ou ácidos graxos.

As propriedades das SQIs existentes no *site* são apresentadas na Tabela I.1 (Anexo I). Considerando os parâmetros físico-químicos apresentados para substâncias puras nesta seção, espera-se que compostos mais voláteis particionem para a atmosfera e tenham suas concentrações reduzidas em subsuperfície com o tempo, compostos solúveis sejam transportados a distâncias maiores da fonte seguindo o movimento de adveccão da água subterrânea e compostos com maior coeficiente de distribuição sólido-solução ( $K_d$ ) sejam encontrados mais próximos às áreas fonte. Entretanto, estes não são os únicos fatores que devem ser levados em consideração, conforme detalhado na próxima seção.

## 2.4 Comportamento de compostos químicos em subsuperfície

Além das propriedades físico-químicas mencionadas na seção acima, outros parâmetros que influenciam na mobilidade de contaminantes são:

- Propriedades da substância / mistura de interesse: viscosidade, molhabilidade, temperatura do vazamento;
- Características do meio físico: Permeabilidade do meio, tamanho e conectividade de poros, teor de matéria orgânica, teor de parâmetros inorgânicos, heterogeneidade das camadas geológicas;
- Condições físico-químicas do meio físico: pH, ORP, condutividade elétrica, salinidade; e
- Presença de bactérias degradadoras.

As propriedades físico-químicas de contaminantes puros podem ser modificadas por outros compostos. O fenômeno de co-solvência pode explicar a presença de contaminantes insolúveis ou pouco solúveis em água subterrânea. Adicionalmente, a Lei de Raoult explica o efeito de misturas de substâncias na pressão de vapor de uma solução: a pressão de vapor da solução será que dependente da pressão de vapor de cada substância e da fração molar de cada composto (**Equação 1**).

$$P_{\text{solução}} = (P_1)_{\text{puro}}X_1 + (P_2)_{\text{puro}}X_2 + \dots + (P_i)_{\text{puro}}X_i \quad [\text{Equação 1}]$$

- Onde:  $(P_i)_{\text{puro}}$  – pressão de vapor da substância pura
- $X_i$  – fração molar da substância na solução

Neste trabalho, a variabilidade composicional das amostras em profundidade será avaliada em caráter descritivo. Apesar do conhecimento da complexidade dos fenômenos que ditam a distribuição de SQIs em subsuperfície, interpretações avançadas quanto a mobilidade das misturas de SQIs derramadas no meio em fase livre não serão incluídas, bem como interpretações quanto às transformações das substâncias derramadas, biodegradação e co-solvência.

## 2.5 Avaliação estatística NMDS

O presente estudo envolve o tratamento de dados analíticos de um elevado número de amostras de solo e água subterrânea e identificação de semelhanças entre os dados obtidos. Como diversas variáveis (propriedades físico-químicas contrastantes de 25 parâmetros provenientes de 502 amostras de duas matrizes, coletadas em 8 níveis e em 7 áreas-fonte diferentes),



percebeu-se a possibilidade de obtenção de informações padronizadas por meio de uma análise estatística multivariada. Análises multivariadas reduzem variáveis a dois e três eixos principais. O primeiro eixo explica a maioria da variância dos dados, enquanto o segundo representa a segunda variância, e o terceiro, a terceira variância. No presente estudo, discutiremos a distribuição de dados entre os dois primeiros eixos.

O escalonamento multidimensional não métrico (*non-metric Multi-dimensional Scaling - NMDS*) é um método da estatística multivariada utilizado para avaliar o grau de semelhança das unidades amostrais de acordo com a composição da amostra. O NMDS é muito utilizado em projetos de bioinformática mas, no presente estudo, o uso da ferramenta para dados ambientais normalizados foi adotado.

### **3. OBJETIVOS**

Este estudo tem por objetivo (i) compreender a distribuição vertical das misturas de substâncias químicas de interesse (SQIs) derramadas na área de estudo ao longo de seu histórico de produção e (ii) identificar padrões de distribuição de grupos de compostos visando (iii) auxiliar *stakeholders* na previsão de níveis estratigráficos potencialmente atingidos por cada grupo de SQIs e profundidade de ocorrência de SQIs com relação à fonte para definição de volumes-alvo para remediação.

#### 4. MATERIAIS E MÉTODOS

Os dados necessários para condução deste projeto foram fornecidos pela indústria química em estudo, que foi descaracterizada ao longo do material por questões de confidencialidade. Os dados foram disponibilizados em formato editável e estão completos e validados quanto à sua acurácia e representatividade. Este trabalho consiste na compilação de dados históricos de solo e água subterrânea e avaliação de resultados analíticos utilizando *softwares* específicos. Materiais e ferramentas utilizadas são descritas abaixo:

- Resultados analíticos históricos fornecidos pela indústria química, quais sejam:
  - 32 amostras de água subterrânea (campanha do segundo semestre de 2021);
  - 472 amostras de solo (coletados entre os anos de 2012 e 2021);
- *Software* Excel, para tratamento de dados em planilhas;
- *Software* RStudio versão 2023.12-R v4.3.2, pacotes *vegan* v.6 e *ggplot2* v3.4.4 para as análises estatísticas; e
- *Software* Powerpoint, para composição de ilustrações.

Em momento preliminar, foi realizada uma revisão bibliográfica e avaliação preliminar de propriedades físico-químicas de compostos. Em seguida, os dados históricos foram compilados e avaliados seguindo uma sequência lógica:

1. Analitos que não haviam sido avaliados em água subterrânea foram removidos da avaliação de solo;
2. Um novo ID de amostras foi desenvolvido para manter a confidencialidade do projeto, visando identificar origem (área-fonte) e nível hidroestratigráfico coletado;
3. Um banco de dados foi composto para avaliação de dados no *Software* RStudio;
4. Avaliação estatística no *Software* Rstudio:
  - a. Foram gerados gráficos pela técnica estatística multivariada NMDS utilizando todas as amostras de água subterrânea e todas as amostras de solo categorizadas por nível, área e matriz;
  - b. *Clusters* foram delimitados sobre os gráficos gerados.
5. Gráficos de barras empilhadas foram gerados com os resultados analíticos de solo provenientes de sondagens com múltiplos níveis de amostragem;
6. Avaliação qualitativa de dados de solo:
  - a. Analitos de grupos semelhantes foram coloridos com tons semelhantes;
  - b. Sondagens foram agrupadas por área fonte para discussão de dados;
7. Foi avaliada a distribuição vertical de compostos de cada grupo em cada faixa de profundidade.

Os resultados da avaliação estatística e qualitativa foram compilados em uma tabela resumo que indica a profundidade em relação à fonte que cada grupo de composto ocorre em maior concentração na área de estudo.

## 5. RESULTADOS OBTIDOS

Os resultados obtidos são apresentados nos subitens abaixo.

### a. Avaliação de propriedades físico-químicas das SQIs

Com o objetivo de compreender a variedade de comportamentos esperados para os compostos avaliados neste estudo, propriedades físico-químicas dos grupos de compostos foram apresentados em gráficos de caixa ou “*box plot*” (Figuras 4 a 11).

Vale ressaltar que os comentários apresentados sobre o comportamento das SQIs do *site* nesta seção têm como referência as propriedades de substâncias puras, podendo essas apresentar comportamento diferente na área de estudo, a depender das interações químicas que podem vir a acontecer entre os compostos orgânicos coexistentes no meio (efeito de co-solvência) e interações com o meio físico.

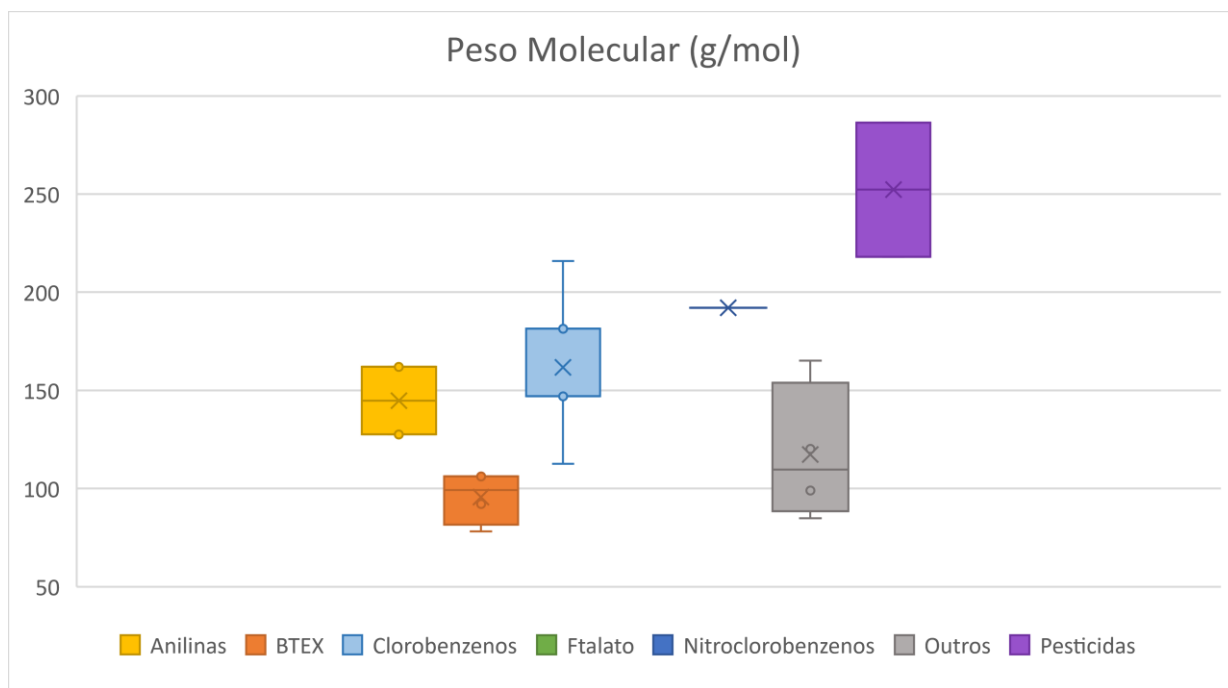


Figura 4. Gráfico de caixa (Box Plot): peso molecular das SQIs do site

Anilinas, BTEX, clorobenzenos, nitroclorobenzenos e pesticidas englobam compostos com pesos moleculares distintos, sendo os compostos do grupo BTEX os mais leves, seguido das anilinas, clorobenzenos, nitroclorobenzenos e pesticidas (Figura 4). O grupo “Outros” abrange pesos moleculares próximos à média dos BTEX ao topo do primeiro quartil dos clorobenzenos.

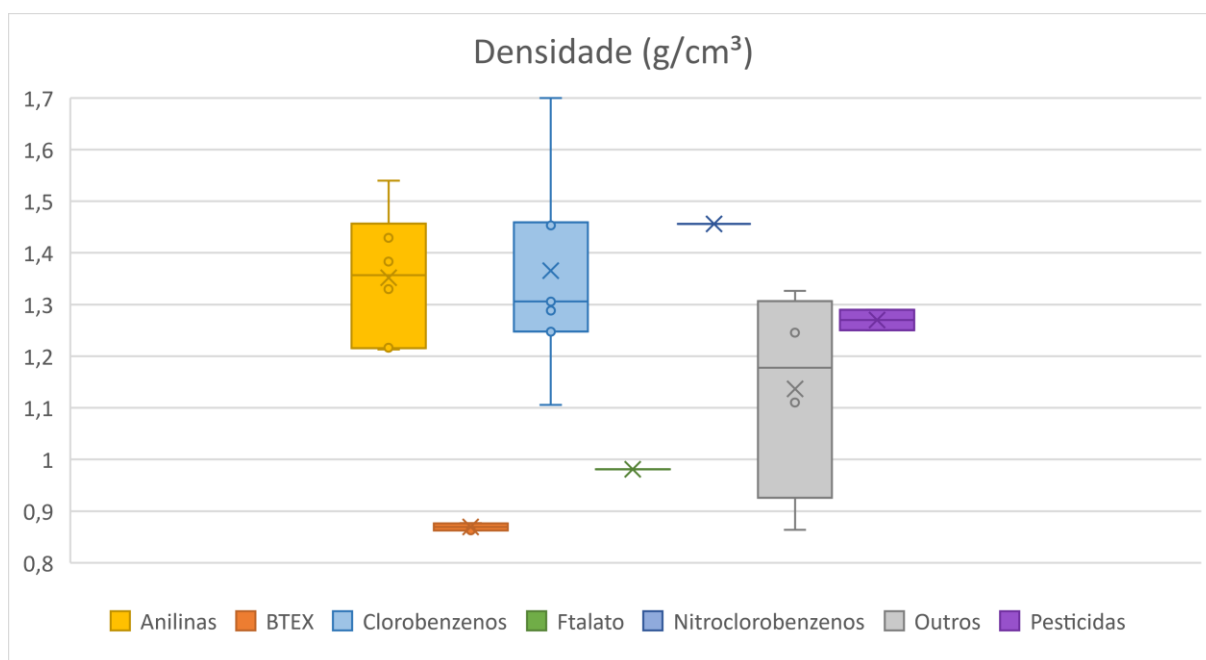


Figura 5. Gráfico de caixa (Box Plot): Densidade das SQIs do site

Compostos pertencentes aos grupos das anilinas, clorobenzenos, nitroclorobenzenos e pesticidas são mais densos que a água (densidade 1 g/cm<sup>3</sup>), conforme indicado pelos diagramas de caixa de valor acima de 1,00 g/cm<sup>3</sup> (Figura 5). Os grupos BTEX e ftalato, por outro lado, são menos densos que a água e o grupo “Outros” é o único que abrange compostos mais e menos densos que a água, englobando compostos cujas densidades variam de 0,86 g/cm<sup>3</sup> (isopropilbenzeno) a 1,33 g/cm<sup>3</sup> (diclorometano).

De maneira geral, os compostos do site apresentam densidades que variam de 0,86 g/cm<sup>3</sup> (tolueno) a 1,70 g/cm<sup>3</sup> (1,2,3,4-tetraclorobenzeno).

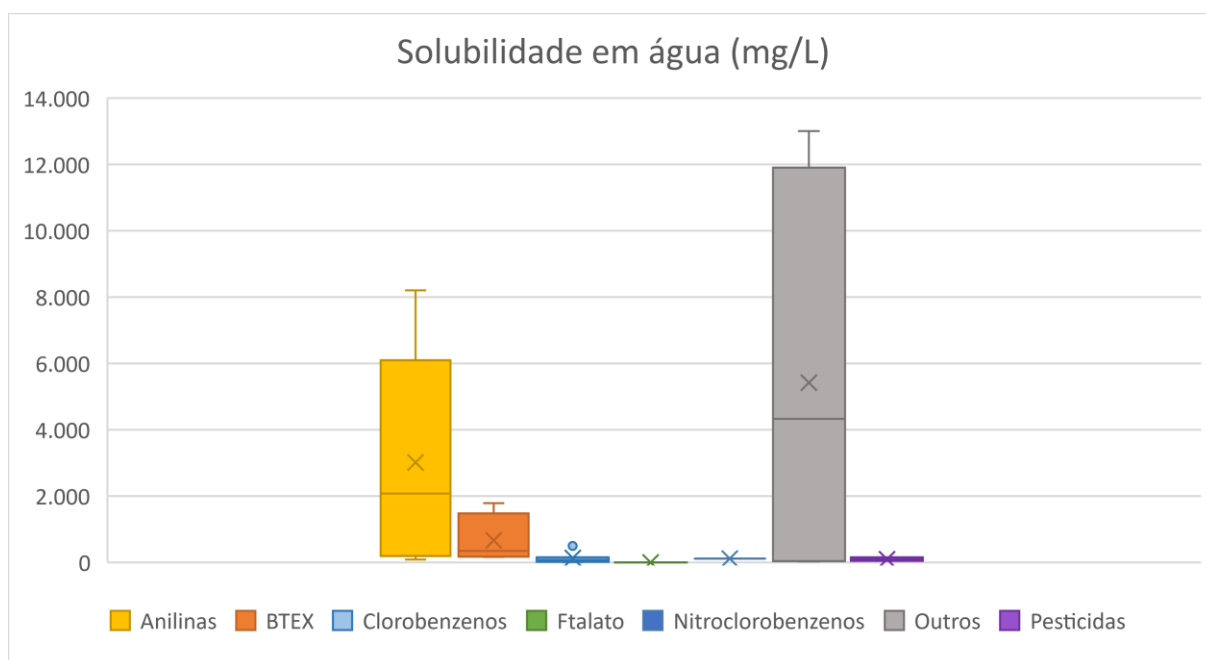


Figura 6. Gráfico de caixa (Box Plot): Solubilidade das SQIs do site

Com relação à solubilidade em água (Figura 6), observa-se que os compostos dos grupos clorobenzeno, ftalatos, nitroclorobenzenos e pesticidas apresentam as menores solubilidades (valores abaixo de 500 mg/L). BTEX varia de 178 a 1.790 mg/L (o-xileno e benzeno, respectivamente), cloroanilinas variam de 92 mg/L (3,4-dicloroanilina) a 8.200 mg/L (2-dicloroanilina) e o grupo “Outros” compreende compostos com solubilidades expressivamente distintas, variando de 61,3 mg/L (isopropilbenzeno) a 13.000 mg/L (diclorometano).

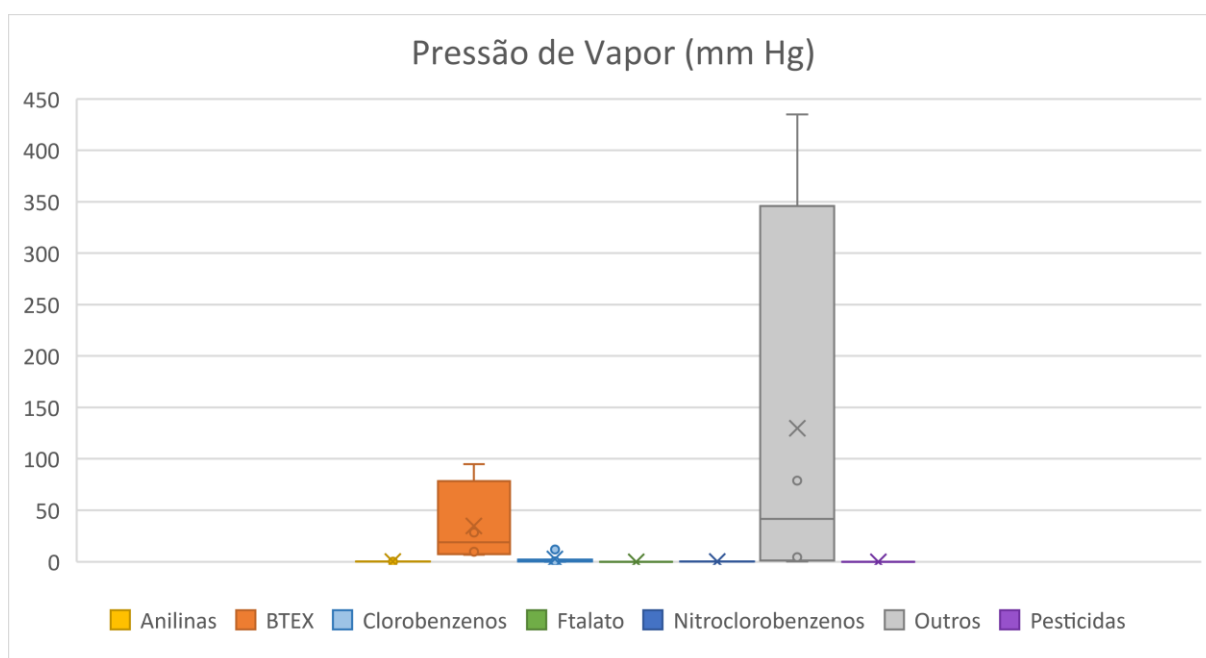


Figura 7. Gráfico de caixa (Box Plot): Pressão de vapor das SQIs do site

A maioria dos compostos avaliados no *site* apresentam pressões de vapor menores que 1 mm Hg (Figura 7), característica esperada para compostos orgânicos semi-voláteis (SVOC). Os compostos semi-voláteis estão contidos nos grupos pesticidas, nitroclorobenzenos, ftalatos, anilinas e os compostos mais pesados do grupo “clorobenzenos” (tri e tetraclorobenzenos). Dentre os SVOC, pressões de vapor variam de  $9,1 \times 10^{-7}$  mm Hg (propanil, composto do grupo “pesticidas”) a 0,43 mm Hg (1,2,4-triclorobenzeno).

Em contrapartida, o grupo BTEX contém compostos mais voláteis e, novamente, o grupo “Outros” engloba compostos com características expressivamente discrepantes, com pressões de vapor variando de 0,015 mm Hg (nitrocumeno) a 435 mm Hg (diclorometano).

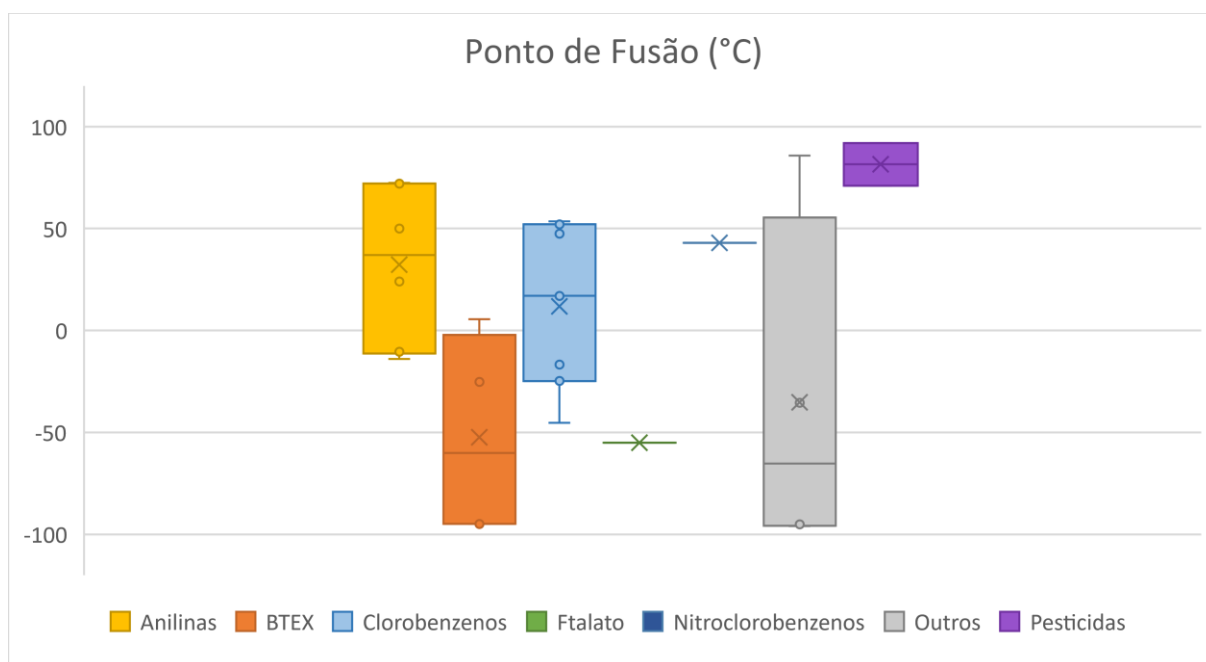


Figura 8. Gráfico de caixa (Box Plot): Ponto de fusão das SQIs do site

Os pontos de fusões e ebulição são propriedades que permite a interpretação do estado físico de cada substância pura a temperatura ambiente. Como todas as SQIs avaliadas possuem temperaturas de ebulição superiores a 40°C, é sabido que nenhuma delas ocorreria em estado gasoso na área de estudo. A avaliação do ponto de fusão das SQIs do site, por outro lado, revela que parte delas ocorrem em estado sólido e parte em estado líquido.

Conforme apresentado na Figura 8, compostos dos grupos BTEX e ftalatos são líquidos a temperatura ambiente (25 °C). Os grupos anilinas, clorobenzenos e “outros” incluem compostos

líquidos e sólidos a temperatura ambiente e os grupos nitroclorobenzenos e pesticidas contém compostos exclusivamente sólidos a temperatura ambiente.

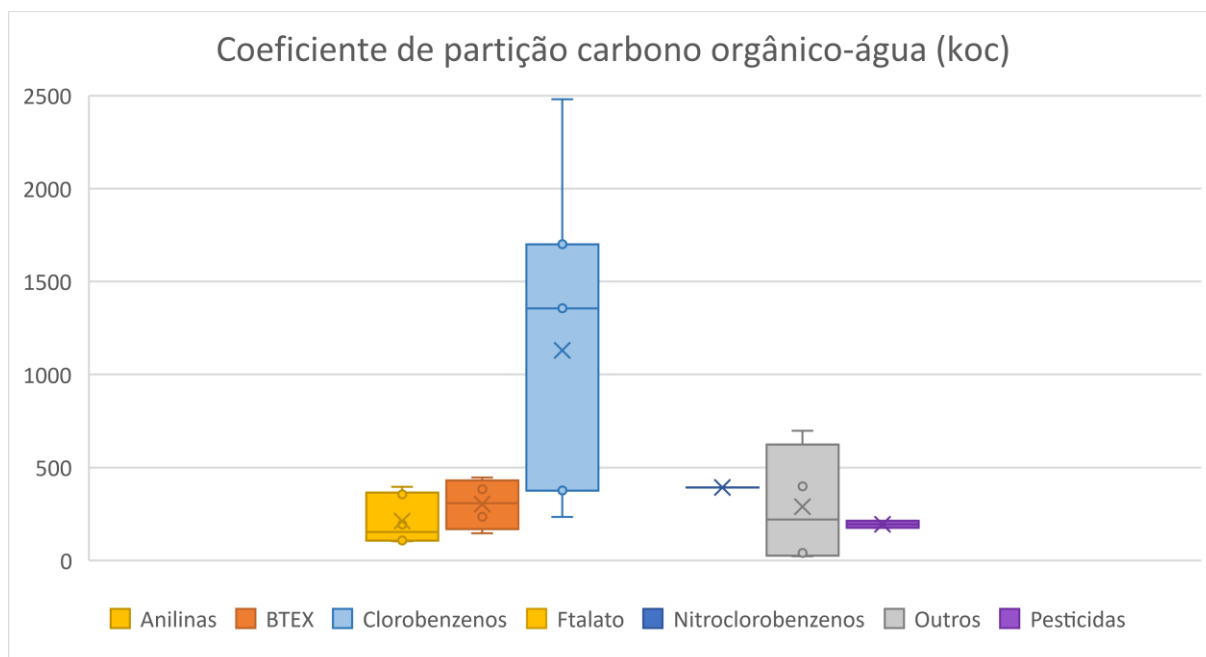


Figura 9. Gráfico de caixa (Box Plot): Coeficiente de partição carbono orgânico-água das SQIs do site

Na área de estudo, estão presentes compostos de alto potencial de mobilidade ( $K_{oc} < 100$ ) a baixa mobilidade ( $K_{oc} > 1000$ ). Na Figura 9, observa-se que apenas dois dos compostos do grupo “Outros”, quais sejam diclorometano (21,73) e 1,2-dicloroetano (39,60), apresentam alto potencial de mobilidade. Dentre os compostos de potencial mobilidade intermediária, citam-se todos os parâmetros dos grupos BTEX, anilinas, pesticidas, 3,4-dinitroclorobenzeno e os três compostos de menor peso molecular do grupo dos clorobenzenos (clorobenzeno, 1,2-diclorobenzeno, 1,3-diclorobenzeno e 1,4-diclorobenzeno). Por fim, dentre os compostos de baixo potencial de mobilidade estão o 1,2,4-triclorobenzeno (1356), 1,2,3-triclorobenzeno (1383), 1,2,3,4-tetraclorobenzeno (2480) e bis(2-etilhexil)ftalato (119.600).



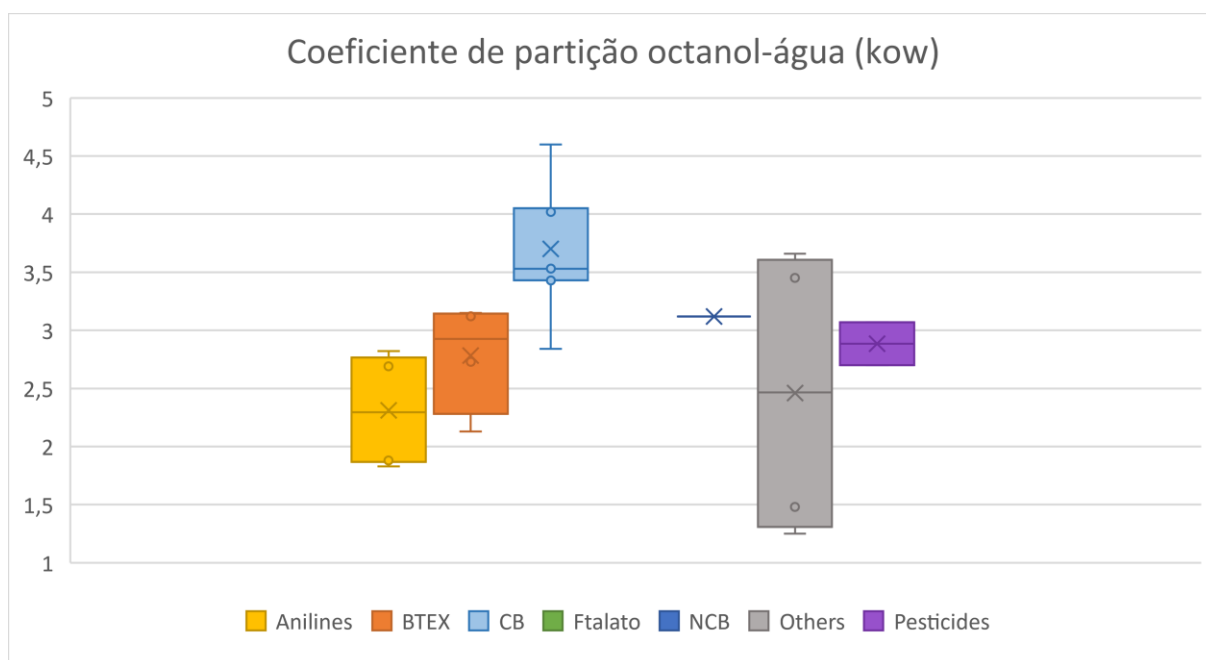


Figura 10. Gráfico de caixa (Box Plot): Coeficiente de partição octanol-água das SQIs do site

Para inferir sobre a hidrofobicidade das SQIs, a observação do coeficiente de partição octanol-água ( $K_{ow}$ ) é de suma importância. Na Figura 10, observa-se que as SQIs do site apresentam valores de  $K_{ow}$  de 1,25 (diclorometano) a 4,60 (1,2,3,4-tetraclorobenzeno). Segundo Zimdahl, 1999; Kogan e Bayer 1996; Rossi et al. 1994, esses valores indicam que as SQIs do site possuem hidrofobicidade intermediária ( $K_{ow}$  entre 1 e 4) a alta ou forte ( $K_{ow} > 4$ ).

De maneira semelhante a outros parâmetros físico-químicos, observa-se que compostos do grupo “outros” abrangem  $K_{ow}$  variados (de 1,25 [diclorometano] a 3,66 [isopropilbenzeno]), que englobam os  $K_{ow}$  dos grupos BTEX (2,13 benzeno a 3,15 etilbenzeno), Cloroanilinas (de 1,83 [4-cloroanilina] a 2,69 [3,4-dicloroanilina]), pesticidas (2,70 [etofumesato] a 3,07 [propanil]) e nitroclorobenzeno (3,12). O grupo de  $K_{ow}$  mais elevado e, portanto, de maior hidrofobicidade, é o grupo de clorobenzenos, que varia de 2,84 (clorobenzeno) a 4,60 (1,2,3,4-tetraclorobenzeno, o composto mais hidrofóbico do site).

#### b. Avaliação estatística descritiva de resultados analíticos

Para compreensão preliminar dos resultados analíticos históricos, dado o elevado o número de amostras a ser levado em consideração para realização deste estudo, a avaliação estatística descritiva dos dados obtidos foi realizada (Tabelas 1 e 2).

Nesta avaliação, buscou-se o entendimento da frequência de detecção de cada composto por unidade hidroestratigráfica, predominância de cada SQI dentre os orgânicos detectados em cada UH, SQIs que ocorrem a maiores concentrações a cada UH e média de concentrações de cada

substância em cada UH. A correlação desses dados com suas áreas fonte não foi realizada nesta avaliação, mas foi coberta nas avaliações apresentadas nos itens c e d deste capítulo.

A partir da avaliação estatística descritiva, foi possível observar a predominância de 3,4-dinitroclorobenzeno, 3+4 cloroanilina, 2,3 dicloroanilina e bis(2-etilhexilftalato) em solo próximas a áreas fonte (UH 1). Entretanto, 3,4-dinitroclorobenzeno só continuou dentre as SQIs predominantes em solo até a UH 2, desta vez acompanhado não somente pela 2,3-dicloroanilina mas pela 3,4-dicloroanilina. Estas cloroanilinas são as SQIs predominantes nas UHs 3-5 também. Na UH 6, nível estratigráfico mais profundo que teve solo caracterizado quimicamente, as SQIs predominantes foram 1,2-dicloroetano, clorobenzeno e 1,2-diclorobenzeno.

Em água subterrânea, de maneira coincidente com solo, há predominância de 2,3- e 3,4-dicloroanilina na UH 2. A partir das UHs 3 – 5, os compostos orgânicos predominantes passam a ser clorobenzeno, 1,2-diclorobenzeno (que não são predominantes em solo) e, em terceiro lugar, 3,4-dicloroanilina. Clorobenzeno e 1,2-diclorobenzeno continuam como as SQIs predominantes na UH 6 mas, neste nível, estas mesmas SQIs, juntamente com 1,2-dicloroetano, são as SQIs predominantes no solo também. Por fim, a UH 8 apresenta concentrações traço de diclorometano e 2-dicloroanilina. Entretanto, neste nível não há amostras de solo.

Correlações entre as principais observações descritas neste item, demais avaliações realizadas e interpretações são apresentadas no item 6.

Tabela 1. Avaliação estatística descritiva de dados de solo

Composto	# Detecções				% Orgânicos por nível				Concentração máxima (mg/kg)				Concentração média (mg/kg)			
	UH 1	UH 2	UH 3 - 5	UH 6	UH 1	UH 2	UH 3 - 5	UH 6	UH 1	UH 2	UH 3 - 5	UH 6	UH 1	UH 2	UH 3 - 5	UH 6
Benzeno	127	54	30	0	0,1%	0,4%	0,0%	0,0%	926,4	443,5	10,7	0,0	7,3	8,2	0,4	0,0
Tolueno	132	52	35	3	0,5%	2,7%	1,3%	9,8%	3.687,9	2.980,7	799,3	0,3	27,9	57,3	22,8	0,1
Etilbenzeno	11	0	2	0	0,0%	0,0%	0,0%	0,0%	1,8	0,0	0,4	0,0	0,2	0,0	0,2	0,0
Xilenos, 3+4	13	0	3	0	0,0%	0,0%	0,0%	0,0%	1,5	0,0	0,3	0,0	0,1	0,0	0,1	0,0
Xileno, 2	8	1	2	0	0,0%	0,0%	0,0%	0,0%	0,8	0,6	0,1	0,0	0,1	0,6	0,1	0,0
Diclorometano	0	0	0	0	0,0%	0,0%	0,0%	0,0%	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
1,2-dicloroetano	14	15	22	1	0,0%	0,1%	0,4%	24,9%	1,5	98,4	261,3	0,7	0,1	6,6	11,9	0,7
Clorobenzeno	202	100	56	3	1,2%	6,5%	2,6%	29,6%	9.824,9	7.188,5	1.598,0	0,8	48,6	71,9	28,5	0,3
1,2-diclorobenzeno	204	100	41	3	3,0%	3,4%	1,1%	35,7%	23.320,5	3.724,1	654,0	1,0	114,3	37,2	16,0	0,3
1,3-diclorobenzeno	171	58	30	0	0,7%	0,7%	0,5%	0,0%	5.528,0	778,4	281,0	0,0	32,3	13,4	9,4	0,0
1,4-diclorobenzeno	209	89	56	0	1,7%	2,4%	2,7%	0,0%	13.020,0	2.673,6	1.655,5	0,0	62,3	30,0	29,6	0,0
1,2,4-triclorobenzeno	62	4	5	0	0,5%	0,0%	7,2%	0,0%	3.661,9	24,9	4.359,2	0,0	59,1	6,2	871,8	0,0
1,2,3-triclorobenzeno	56	5	4	0	0,2%	0,1%	1,7%	0,0%	1.664,6	128,0	1.025,1	0,0	29,7	25,6	256,3	0,0
1,2,3,4-tetraclorobenzeno	28	0	2	0	0,0%	0,0%	0,3%	0,0%	262,5	0,0	209,7	0,0	9,4	0,0	104,8	0,0
3,4-dicloronitrobenzeno	112	19	10	0	14,6%	33,2%	44,2%	0,0%	115.095,0	36.701,1	26.739,7	0,0	1.027,6	1.931,6	2.674,0	0,0
2-cloroanilina	54	22	3	0	0,1%	0,5%	0,0%	0,0%	1.150,6	595,0	28,9	0,0	21,3	27,0	9,6	0,0
(3+4)-cloroanilina	71	21	4	0	31,5%	0,7%	0,0%	0,0%	247.931,0	794,2	7,6	0,0	991,7	6,0	0,1	0,0
2,3-dicloroanilina	163	61	16	0	21,5%	27,4%	18,9%	0,0%	169.419,6	30.235,0	11.407,7	0,0	1.039,4	495,7	713,0	0,0
2,5-dicloroanilina	86	23	6	0	3,6%	2,0%	3,6%	0,0%	28.618,8	2.220,2	2.196,4	0,0	332,8	96,5	366,1	0,0
3,4-dicloroanilina	167	67	30	0	4,9%	9,8%	1,3%	0,0%	38.348,3	10.801,8	755,8	0,0	229,6	161,2	25,2	0,0
Isopropilbenzeno	31	7	2	0	0,0%	0,0%	0,0%	0,0%	17,4	2,0	0,5	0,0	0,6	0,3	0,3	0,0
4-nitrocumeno	59	10	5	0	0,9%	6,2%	0,1%	0,0%	7.459,2	6.871,0	32,5	0,0	126,4	687,1	6,5	0,0
Propanil	41	3	5	0	0,7%	0,0%	0,0%	0,0%	5.393,3	20,2	20,5	0,0	131,5	6,7	4,1	0,0
Etofumesato	65	9	3	0	0,2%	1,2%	0,4%	0,0%	1.216,3	1.272,5	256,4	0,0	18,7	141,4	85,5	0,0
Bis(2-etilhexil)ftalato	131	48	39	0	14,0%	2,6%	13,5%	0,0%	110.409,5	2.841,5	8.141,5	0,0	842,8	59,2	208,8	0,0

Tabela 2. Avaliação estatística descritiva de dados de água subterrânea

Composto	# Detecções				% Orgânicos por nível				Concentração Máxima (ug/L)				Concentração média (ug/L)			
	UH 2	UH 3 - 5	UH 6	UH 8	UH 2	UH 3 - 5	UH 6	UH 8	UH 2	UH 3 - 5	UH 6	UH 8	UH 2	UH 3 - 5	UH 6	UH 8
Benzeno	20	13	1	0	2,9%	5,9%	2,1%	2,7%	<b>12.300,0</b>	3.890,0	411,0	0,5	917,6	386,0	37,8	0,5
Tolueno	15	8	1	0	0,8%	1,3%	2,0%	2,7%	3.210,0	1.870,0	379,0	0,5	239,0	87,0	34,9	0,5
Etilbenzeno	4	1	0	0	0,0%	0,0%	0,0%	2,7%	6,0	2,0	0,5	0,5	0,8	0,6	0,5	0,5
Xilenos, 3+4	31	29	11	2	0,0%	0,0%	0,1%	5,3%	12,0	4,0	1,0	1,0	1,4	1,1	1,0	1,0
Xileno, 2	1	2	0	0	0,0%	0,0%	0,0%	2,7%	5,0	12,0	0,5	0,5	0,6	0,9	0,5	0,5
Diclorometano	31	29	11	2	0,0%	0,0%	0,1%	<b>10,6%</b>	2,0	2,0	2,0	2,0	2,0	2,0	2,0	2,0
1,2-dicloroetano	6	5	1	0	0,0%	0,4%	0,6%	2,7%	133,0	<b>510,0</b>	103,0	0,5	13,7	24,3	9,8	0,5
Clorobenzeno	22	19	2	0	10,2%	<b>20,1%</b>	<b>16,7%</b>	2,7%	<b>41.000,0</b>	16.800,0	3.270,0	0,5	<b>3.254,2</b>	<b>1.327,1</b>	297,8	0,5
1,2-diclorobenzeno	23	19	2	0	9,0%	<b>18,6%</b>	<b>39,5%</b>	2,7%	<b>34.000,0</b>	11.600,0	7.730,0	0,5	<b>2.880,0</b>	<b>1.224,0</b>	703,5	0,5
1,3-diclorobenzeno	19	15	1	0	0,7%	0,8%	2,0%	2,7%	3.430,0	420,0	381,0	0,5	233,1	51,2	35,1	0,5
1,4-diclorobenzeno	22	18	1	0	3,3%	3,6%	<b>9,7%</b>	2,7%	<b>21.700,0</b>	1.920,0	1.900,0	0,5	<b>1.042,9</b>	240,4	173,2	0,5
1,2,4-triclorobenzeno	16	11	1	0	0,2%	0,1%	0,4%	2,7%	721,0	82,0	82,0	0,5	66,0	7,6	7,9	0,5
1,2,3-triclorobenzeno	8	9	1	0	0,1%	0,0%	0,1%	2,7%	376,0	23,0	23,0	0,5	32,2	2,5	2,5	0,5
1,2,3,4-tetraclorobenzeno	2	2	0	0	0,0%	0,0%	0,0%	0,5%	24,0	4,6	0,1	0,1	1,0	0,3	0,1	0,1
3,4-dicloronitrobenzeno	12	12	1	0	3,8%	10,4%	1,8%	2,7%	<b>12.927,0</b>	8.178,0	345,0	0,5	<b>1.203,4</b>	685,3	31,8	0,5
2-chloroanilina	20	18	1	1	<b>12,1%</b>	2,4%	4,1%	<b>14,6%</b>	<b>37.527,0</b>	1.183,0	791,0	5,0	<b>3.854,8</b>	160,8	72,4	2,8
(3+4)-cloroanilina	21	18	1	1	<b>12,2%</b>	4,3%	6,3%	9,3%	<b>42.825,0</b>	2.197,0	1.238,0	3,0	<b>3.878,0</b>	281,3	113,0	1,8
2,3-dicloroanilina	20	19	1	1	<b>25,3%</b>	12,2%	6,5%	9,3%	<b>67.541,0</b>	7.767,0	1.279,0	3,0	<b>8.048,3</b>	803,5	116,7	1,8
2,5-dicloroanilina	20	16	1	0	3,7%	1,3%	0,8%	2,7%	<b>27.114,0</b>	696,0	147,0	0,5	<b>1.189,6</b>	88,1	13,8	0,5
3,4-dicloroanilina	21	17	1	0	<b>15,5%</b>	<b>17,0%</b>	6,0%	2,7%	<b>47.233,0</b>	8.758,0	1.166,0	0,5	<b>4.952,7</b>	<b>1.123,3</b>	106,5	0,5
Isopropilbenzeno	9	5	1	0	0,0%	0,0%	0,0%	2,7%	27,0	45,0	4,0	0,5	2,7	2,9	0,8	0,5
4-nitrocumeno	7	8	1	0	0,1%	1,3%	1,1%	2,7%	344,0	<b>1.813,0</b>	207,0	0,5	37,2	83,6	19,3	0,5
Propanil	6	2	0	0	0,0%	0,0%	0,0%	2,7%	37,0	19,0	0,5	0,5	3,7	1,6	0,5	0,5
Etofumesato	11	4	0	0	0,0%	0,1%	0,0%	2,7%	142,0	212,0	0,5	0,5	14,5	8,2	0,5	0,5
Bis(2-etilhexil)ftalato	0	0	0	0	0,0%	0,0%	0,0%	2,7%	0,5	0,5	0,5	0,5	0,5	0,5	0,5	0,5

### c. Avaliação estatística NMDS de resultados analíticos

Resultados de solo e água subterrânea foram avaliados segundo a técnica de estatística multivariada NMDS. Para a geração de diagramas NMDS, concentrações de cada composto em cada amostra foram normalizadas e resultados analíticos foram apresentados em porcentagem. A distribuição de amostras em NMDS é observada nas Figuras 11 a 13. Como a visualização do ID de amostras dentro do gráfico NMDS não foi possível, três gráficos foram gerados com o mesmo conjunto de dados, variando apenas simbologias e colorações conforme as legendas a direita.

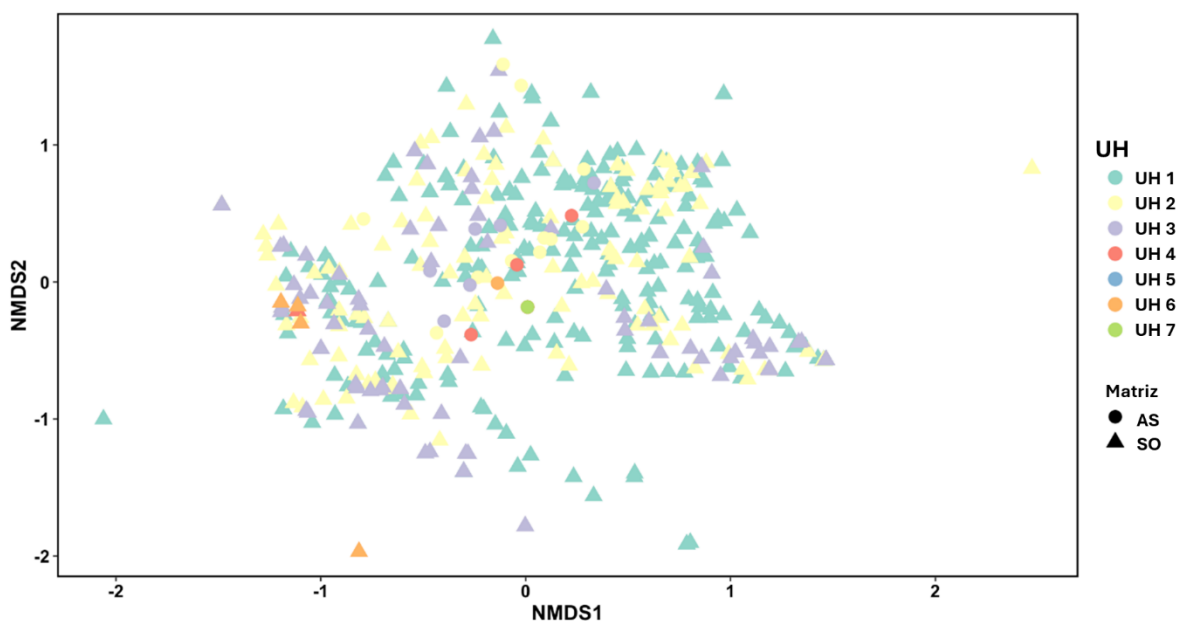


Figura 11. Gráfico NMDS – eixos primários e secundários são compostos semelhantes; UHs representadas em cores e matrizes AS (água subterrânea) e SO (solo) com símbolos.

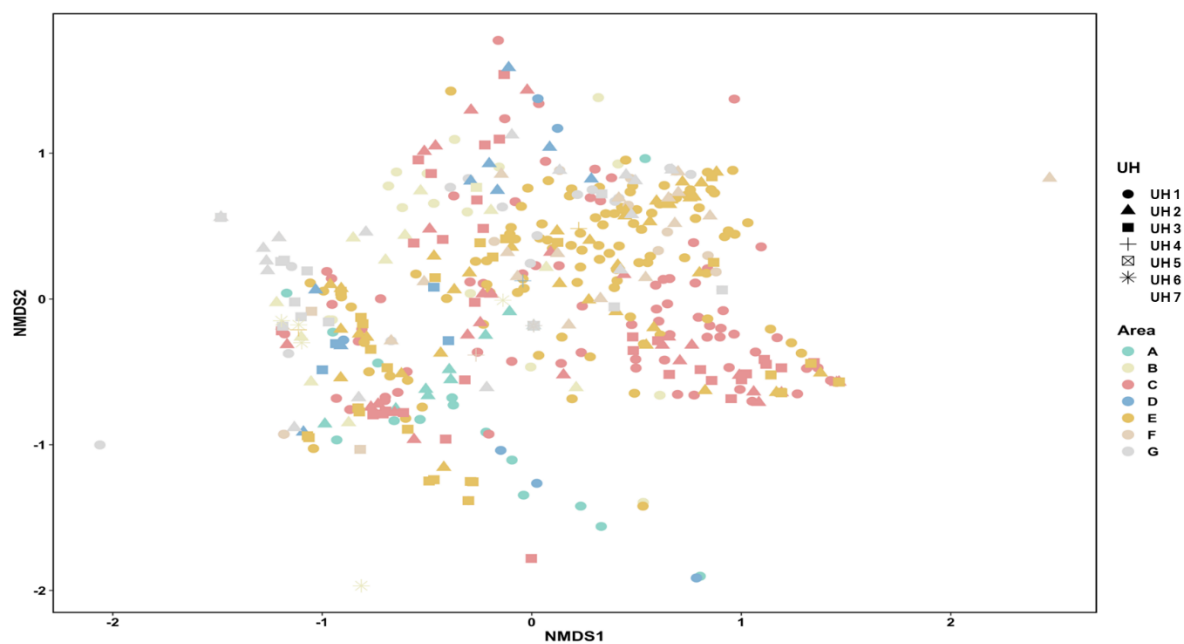


Figura 12. Gráfico NMDS – eixos primários e secundários são compostos semelhantes; UHs representadas por símbolos e áreas fonte representativas da coleta da amostra representada com cores.

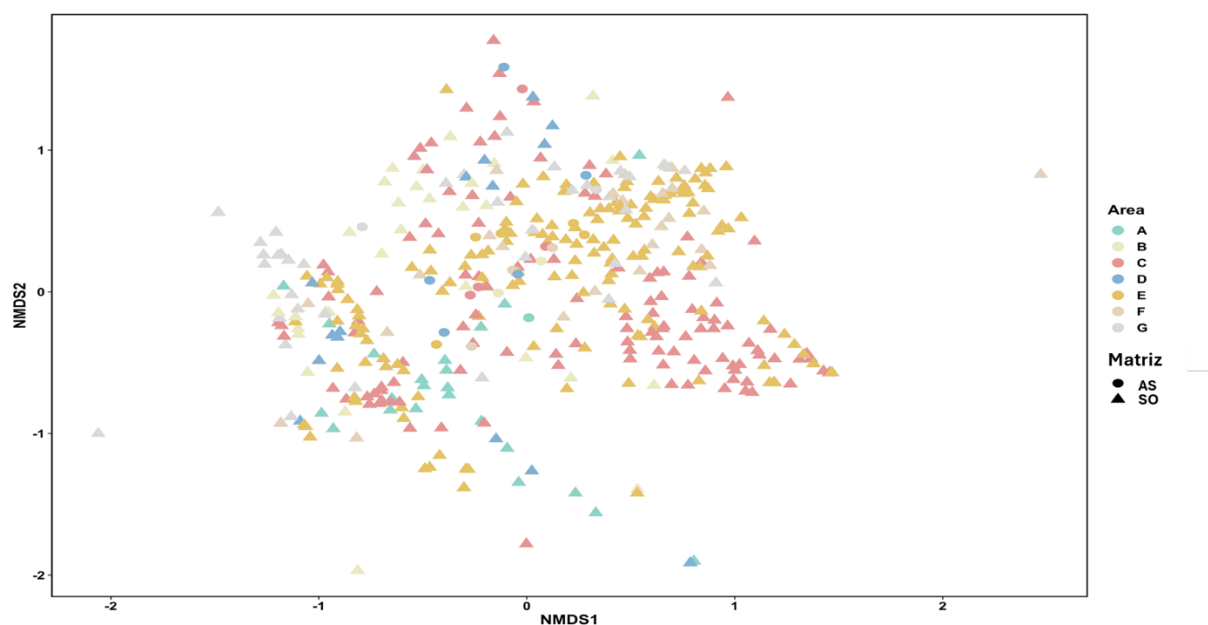


Figura 13. Gráfico NMDS – eixos primários e secundários são compostos semelhantes; áreas fonte representadas em cores e matrizes com símbolos.

Nos diagramas NMDS acima, *clusters* por nível, matriz ou área não são claramente identificados. Por outro lado, a comparação entre a dispersão de dados de solo e água subterrânea permite a observação imediata de que amostras de solo e água subterrânea possuem composição semelhante, uma vez que ocorrem em áreas próximas ou coincidentes do diagrama. A discussão dos pontos nestes diagramas e interpretações são apresentadas no item 6.

Buscando visualizar a existência de *clusters* associados às áreas fonte, foram criados diagramas NMDS com dados específicos de cada área, representando os níveis analisados com cores e matrizes com símbolos (Figuras 14 a 20).

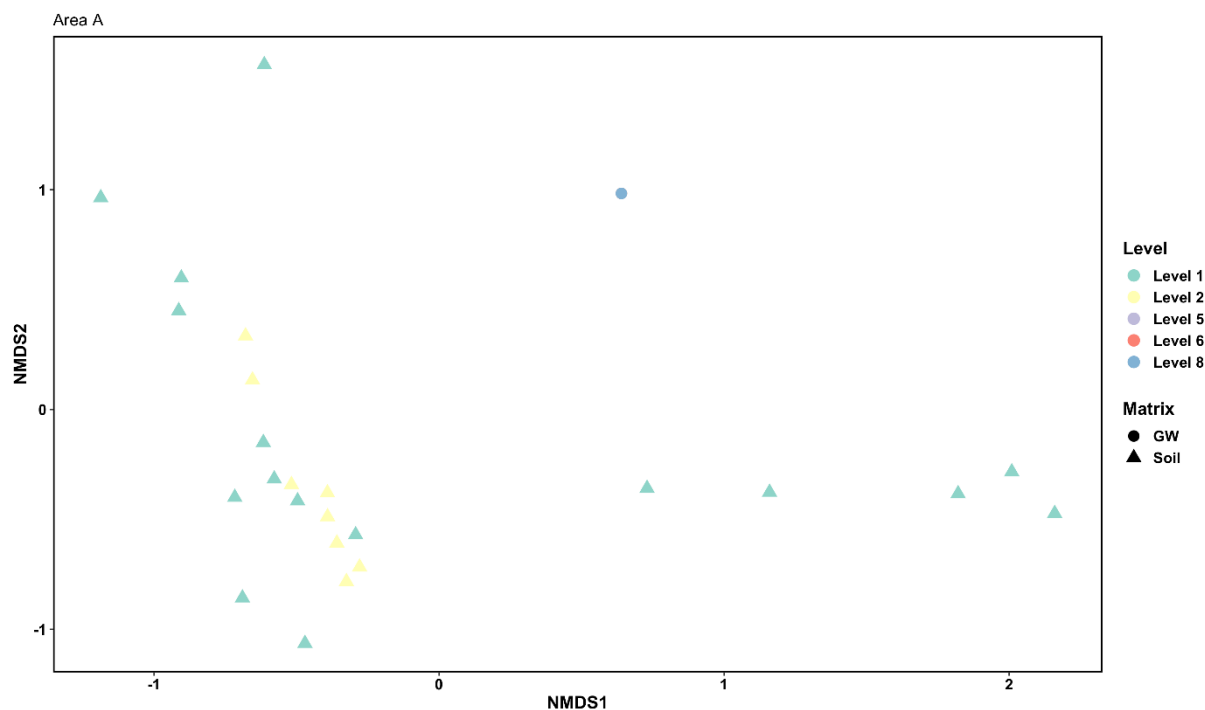


Figura 14. Gráfico NMDS representativo da Área A - eixos primários e secundários são compostos semelhantes; áreas fonte representadas em cores e matrizes com símbolos.

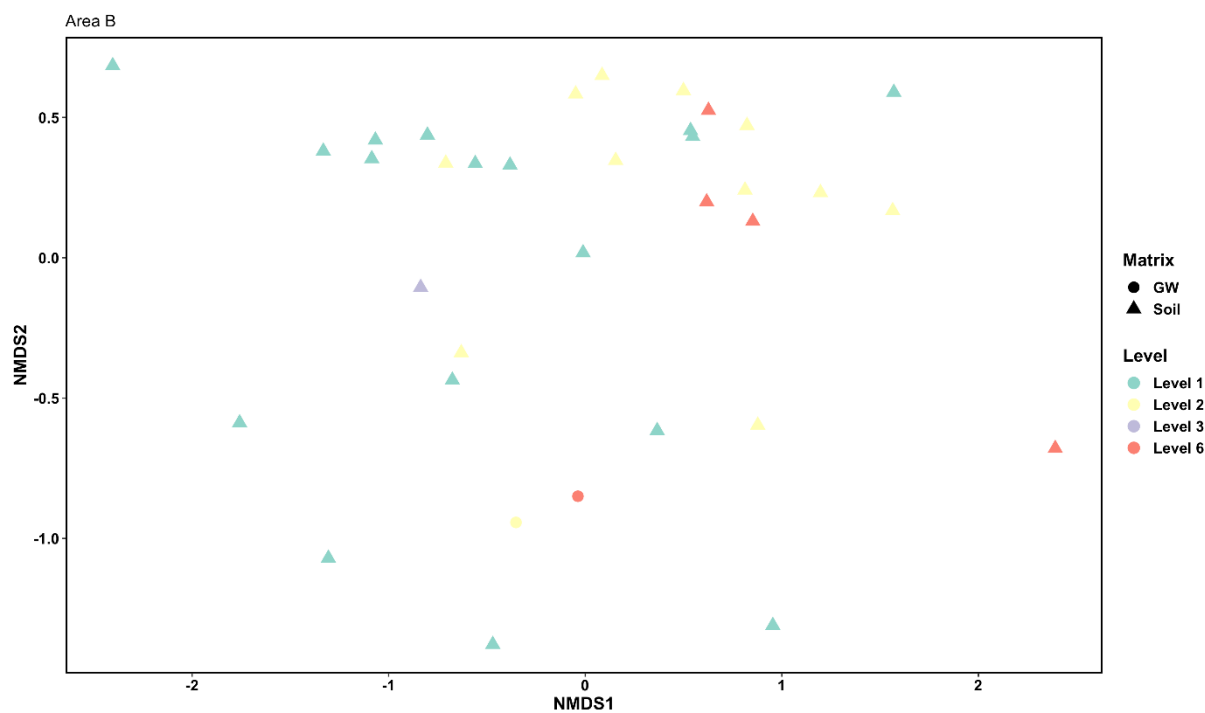


Figura 15. Gráfico NMDS representativo da Área B - eixos primários e secundários são compostos semelhantes; áreas fonte representadas em cores e matrizes com símbolos.

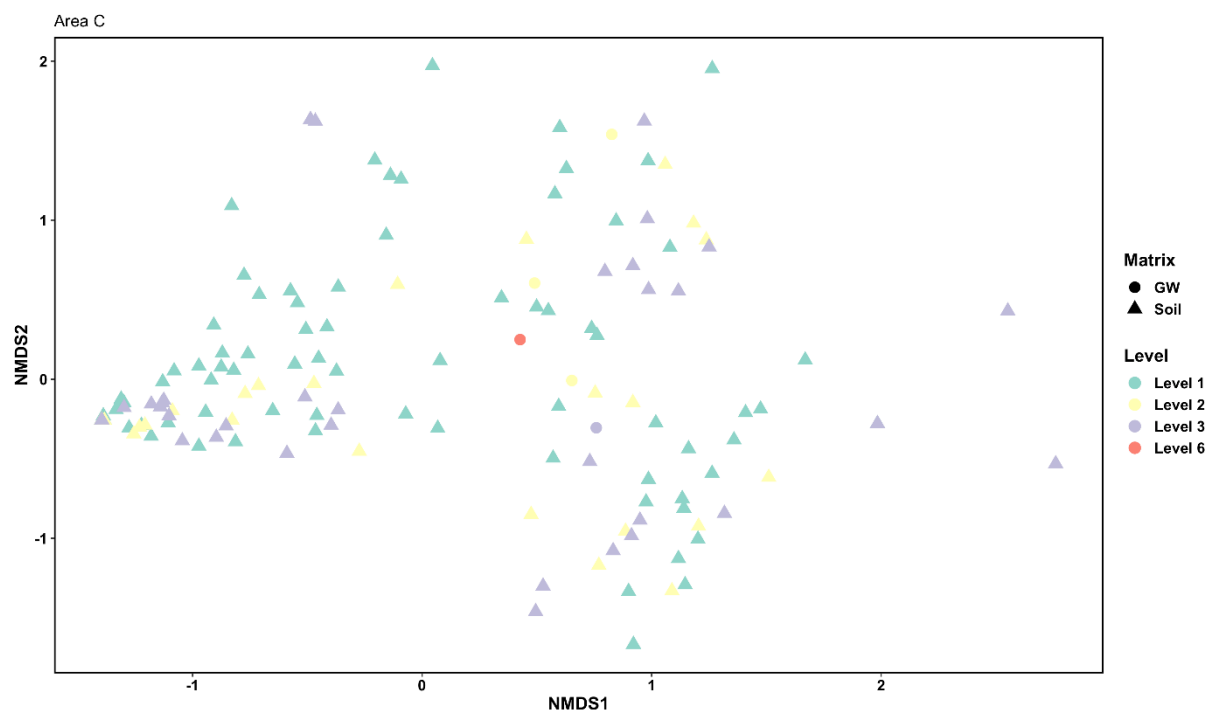


Figura 16. Grafico NMDS representativo da Área C - eixos primários e secundários são compostos semelhantes; áreas fonte representadas em cores e matrizes com símbolos.

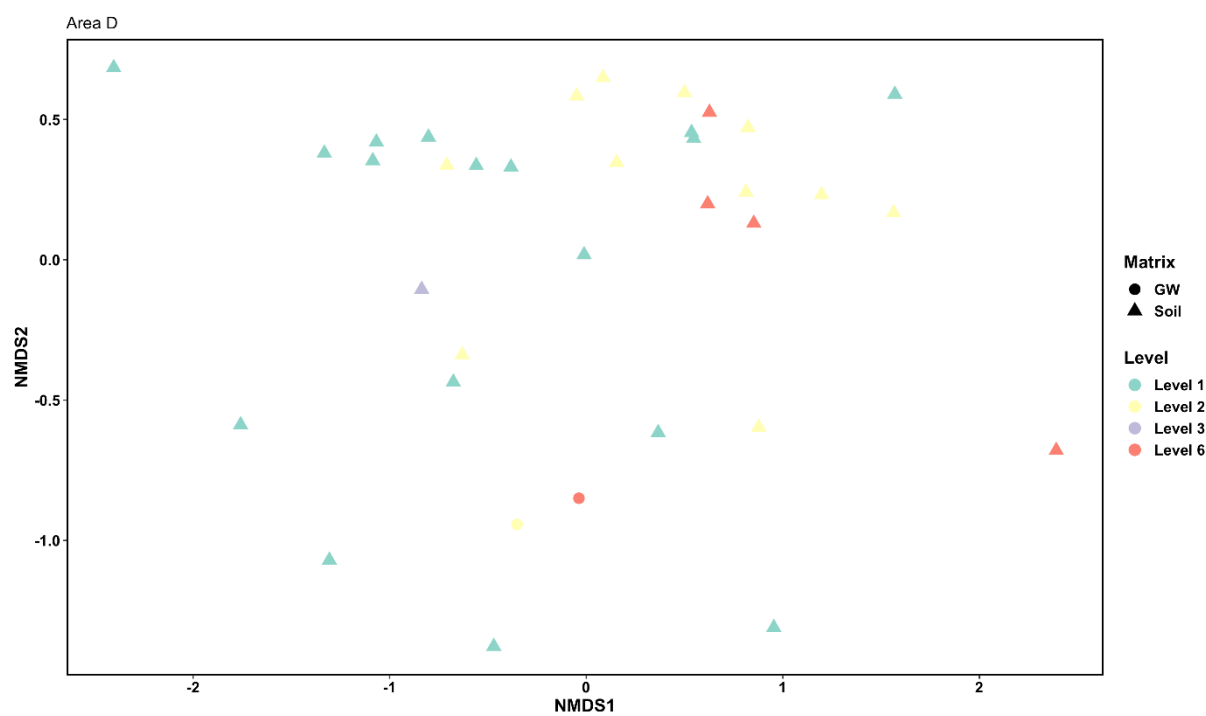


Figura 17. Grafico NMDS representativo da Área D - eixos primários e secundários são compostos semelhantes; áreas fonte representadas em cores e matrizes com símbolos.



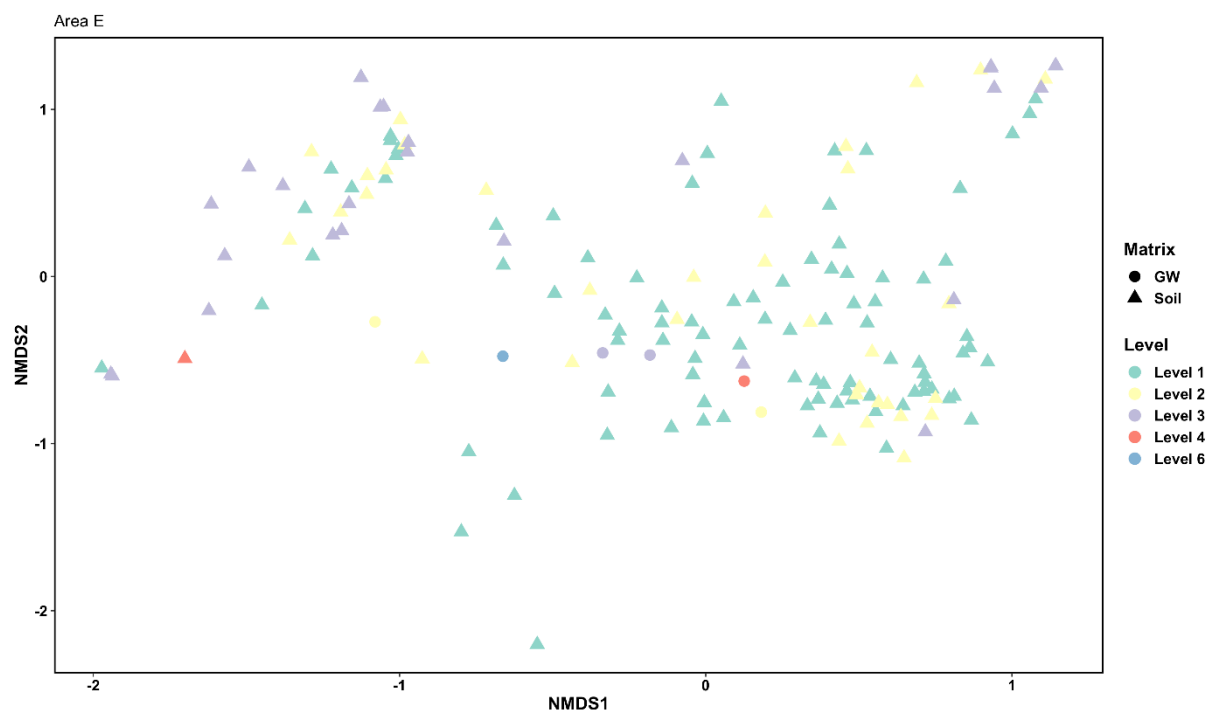


Figura 18. Grafico NMDS representativo da Área E - eixos primários e secundários são compostos semelhantes; áreas fonte representadas em cores e matrizes com símbolos.

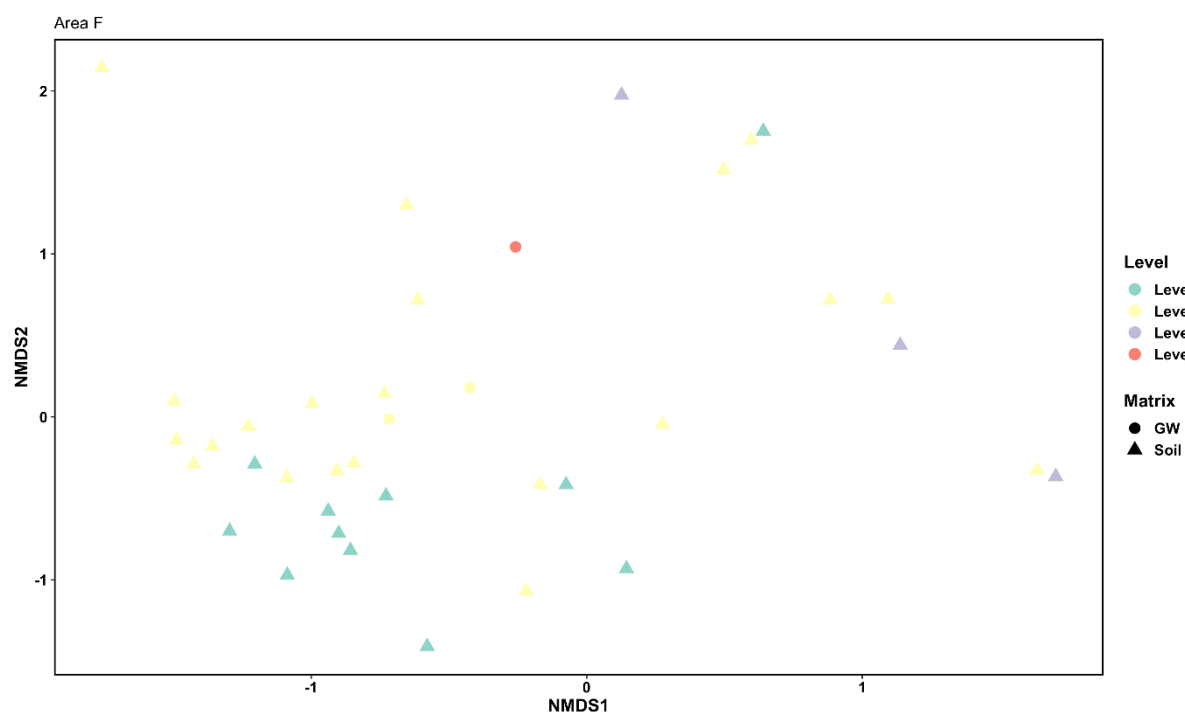


Figura 19. Grafico NMDS representativo da Área F - eixos primários e secundários são compostos semelhantes; áreas fonte representadas em cores e matrizes com símbolos.

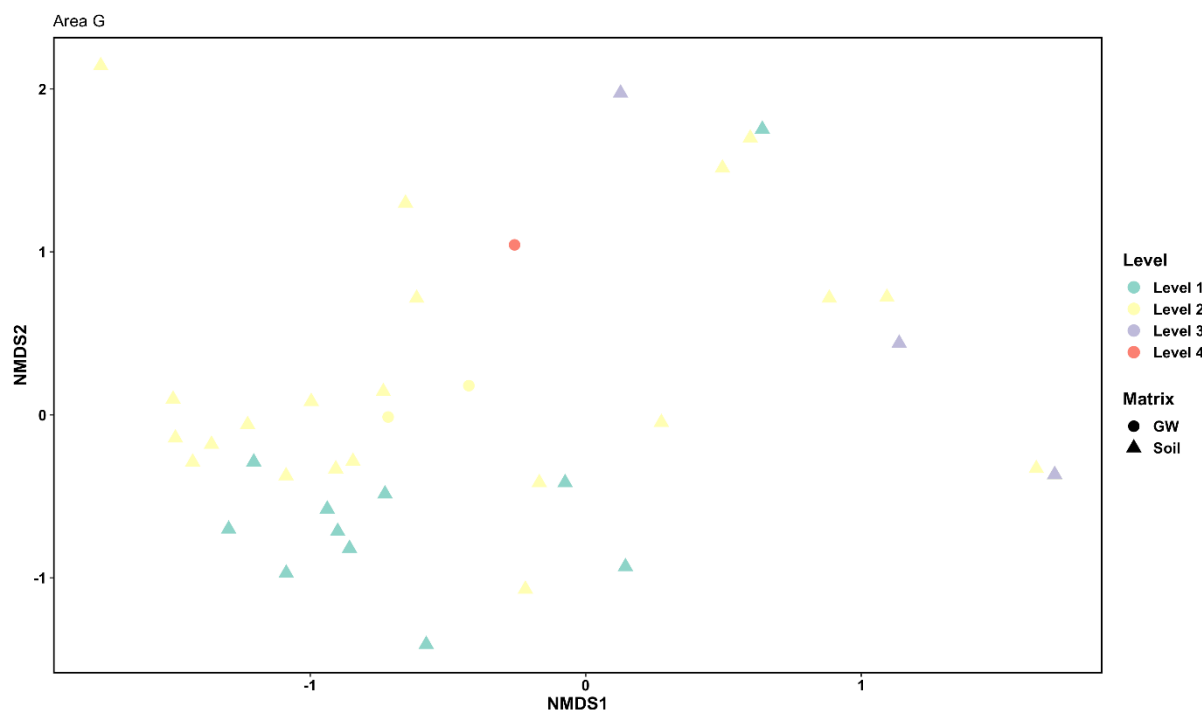


Figura 20. Gráfico NMDS representativo da Área G - eixos primários e secundários são compostos semelhantes; áreas fonte representadas em cores e matrizes com símbolos.

Apesar da existência de *clusters* por área não ser nitidamente observada nos gráficos acima, o traçado de polígonos sobre grupos de amostras coletadas num mesmo nível fornece informações relevantes relacionadas a grupos de amostras de composições compatíveis num mesmo nível, numa mesma área fonte (discussão na seção 6).

#### d. Avaliação qualitativa de resultados analíticos

Para avaliação qualitativa da distribuição de compostos verticalmente, foram gerados gráficos de barras empilhadas por sondagem, com separação por áreas e indicação das UH às quais as amostras se referem. Nesses gráficos, apenas amostras que tiveram detecções em mais de uma amostra foram representadas (Anexo II).

A avaliação dos gráficos teve por objetivo identificar a presença de SQIs semelhantes nas porções mais rasas (a profundidades menores que 3 m) e observar visualmente quaisquer padrões na variação da composição das amostras com profundidade.

Apesar de esperar-se que amostras rasas provenientes de uma mesma área fonte apresentasse composições semelhantes, foi possível observar que as SQIs presentes nas amostras rasas de cada área não são necessariamente coincidentes. Ademais, não há distinção clara entre composições de amostras rasas por área, podendo haver amostras rasas de composições semelhantes em áreas fonte diferentes. Discussões detalhadas quanto aos dados observados e avaliações de diferentes linhas de evidência são apresentadas na seção 6.

## 6. DISCUSSÃO DOS RESULTADOS

Os resultados das avaliações de propriedades físico-químicas das SQIs do site, avaliação estatística descritiva dos resultados analíticos de solo e água subterrânea, avaliação estatística pelo método NMDS e avaliação qualitativa foram compilados e comparados nesta seção.

### **Parâmetros físico-químicos versus estatística descritiva**

Inicialmente, ao se tratar das propriedades físico-químicas dos compostos, observa-se que as SQIs do site são majoritariamente semi-voláteis, insolúveis em água, apresentam-se nos estados líquido e sólido a temperatura ambiente, podem ser mais densas e menos densas que a água (e, portanto, formar LNAPL e DNAPL no *site*), possuem mobilidade baixa a alta e hidrofobicidade intermediária a alta (marcada apenas pelo parâmetro 1,2,3,4-tetraclorobenzeno). Estas propriedades são apresentadas nos gráficos compilados com anotações na Figura 21.

Esta variedade de comportamentos confere ao site uma elevada complexidade na distribuição das SQIs nos diferentes compartimentos do meio, matrizes e distâncias das áreas fonte. Por este motivo, uma avaliação detalhada de resultados analíticos se fez necessária.

A partir da avaliação estatística descritiva dos resultados estatísticos, observa-se que, na UH 1, clorobenzenos ocorrem com mais frequência em solo mas não representam as maiores concentrações no nível em massa. Maiores massas são de 3+4 cloroanilinas, 2,3-dicloroanilinas, 3,4-dicloronitrobenzeno e Bis(2-etilhexil)ftalato. Essas concentrações elevadas desses compostos justifica a predominância desse grupo na UH 1.

Esta observação permite a interpretação de que houveram derrames de clorobenzenos em diversas porções do site. Entretanto, por serem móveis e voláteis, estes compostos podem ter suas concentrações significativamente decrescidas com o tempo. Nitroclorobenzenos e Bis-2-etilhexilftalato, por outro lado, são as substâncias que apresentam maiores  $K_{ow}$  e menores coeficientes de solubilidade, podendo atuar como bons marcadores de áreas fonte e/ou indicadores da passagem de volumes de NAPL historicamente.

Para discussão da distribuição de SQIs nas UHs 2 a 8, a predominância de SQIs nas matrizes solo e água foram comparadas a propriedades físico-químicas indicativas de sua mobilidade (afinidade por matéria orgânica, hidrofobicidade e solubilidade em água) na Tabela 3.

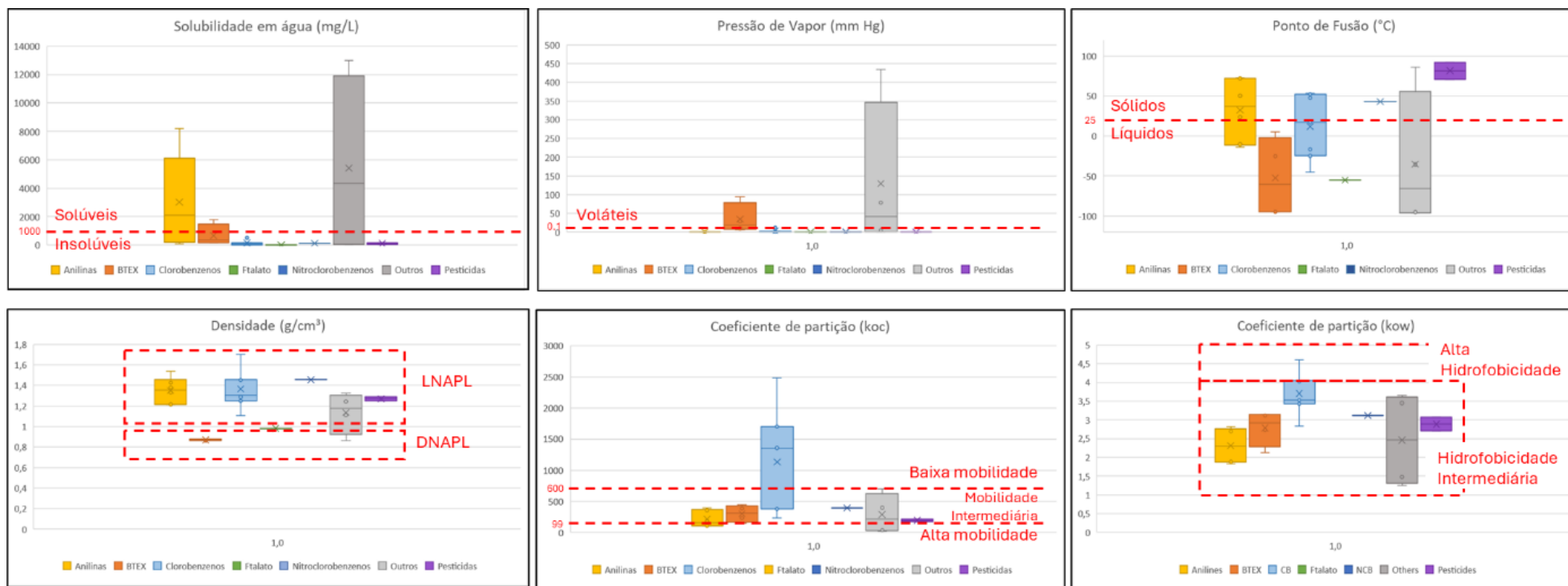


Figura 21. Compilação de gráficos de parâmetros físico-químicos

Tabela 3. Compilação da avaliação estatística descritiva - SQIs predominantes por nível e matriz

SQI	K <sub>oc</sub>	K <sub>ow</sub>	S (mg/L)	UH				
				1	2	3 - 5	6	8
Benzeno	145,80	2,13	1790,00					
Tolueno	233,90	2,73	526,00					
Ethylbenzeno	446,10	3,15	169,00					
Xleno, 2	382,90	3,12	178,00					
Diclorometano	21,73	1,25	13000,00					
1,2-DCE	39,60	1,48	8600,00					
Chlorobenzeno	233,90	2,84	498,00					
1,2-DCB	382,90	3,43	156,00					
1,3-DCB	1700,00	3,53	125,00					
1,4-DCB	375,30	3,44	81,30					
1,2,4-TCB	1356,00	4,02	49,00					
1,2,3-TCB	1383,00	4,05	18,00					
1,2,3,4-PCB	2480,00	4,60	5,92					
3,4-DCNB	393,00	3,12	121,00					
2-cloroanilina	106,66	1,90	8200,00					
(3+4)-CA*	108,18	1,86	4650,00					
2,3-DCA	396,64	2,82	262,00					
2,5-DCA	355,00	2,75	230,00					
3,4-DCA	193,00	2,69	92,00					
Isopropilbenzeno	697,80	3,66	61,30					
4-nitrocumeno	399,00	3,45	29,90					
Propanil	175,90	3,07	152,00					
Etofumesato	213,00	2,70	50,00					
BEHP	119600,00	7,60	0,27					

Nota: UH – Unidade Hidroestratigráfica; \* Foram representadas as três a quatro maiores SQIs de uma dada matriz e um dado nível; células preenchidas em marrom representam compostos majoritários detectados em solo; células com contorno azul representam compostos predominantes detectados em água subterrânea.

Conforme mencionado no item 5b, na UH 2 há predominância de nitroclorobenzenos em solo e 2,3- e 3,4-dicloroanilinas em solo e água subterrânea. Este é o nível mais profundo em que nitroclorobenzenos são predominantes em solo, o que pode ser facilmente explicado pelo seu elevado K<sub>oc</sub>, K<sub>ow</sub> e diminuta solubilidade, que corrobora com sua permanência em solo e baixa mobilidade em água.

Nas UH 3 a 5, 2,3-dicloroanilina (dentre as dicloroanilinas, esta é a de maior K<sub>oc</sub> e maior solubilidade em água) é predominante em solo, 3,4-dicloroanilina (referente a dicloroanilina de menor K<sub>oc</sub> e menor solubilidade em água) é predominante em solo e água subterrânea, e Clorobenzeno e 1,2-diclorobenzeno (com menor K<sub>oc</sub> e maior solubilidade em água dos compostos do grupo dos “clorobenzenos”) passam a predominar em água subterrânea também. Apesar de não haver diferenças substanciais entre valores de K<sub>oc</sub> e solubilidade de dicloroanilinas e clorobenzenos, observa-se que clorobenzenos ocorrem em água não apenas nas UH 3 a 5 como em solo e água subterrânea na UH 6, conforme descrito a seguir.

Na UH 6, concentrações traço de SQIs foram detectadas, com predominância de 1,2-dicloroeteno em solo e clorobenzeno, 1,2-diclorobenzeno tanto em solo quanto em água subterrânea. Apesar de 1,2-dicloroeteno não ser uma das principais SQIs do site, compreende-se que este foi capaz de alcançar camadas mais profundas do site devido a sua mobilidade (baixo  $K_{oc}$  e elevada solubilidade em água). A predominância de clorobenzenos em solo, por outro lado, pode corroborar com hipótese de que a composição dos líquidos derramados ao subsolo durante os anos de operação da fábrica eram ricos em clorobenzenos. A ideia de que clorobenzenos foram substâncias utilizadas em grandes volumes e em diversas regiões do *site* vem da observação de que essas são as substâncias detectadas em maior número de pontos na UH 1.

Na UH 8, apenas compostos de alta mobilidade (diclorometano e 2-cloroanilina) foram detectados em água subterrânea (única matriz avaliada para VOC e SVOC), ainda que em concentrações traço.

### **Interpretações da avaliação estatística multivariada (NMDS)**

Com relação a distribuição de parâmetros por área, a avaliação estatística NMDS confirma a complexidade do entendimento da distribuição de SQIs em profundidade (ou seja, entre diferentes UHs) e entre diferentes áreas do site. Na Figura 11, foi possível observar que há amostras de diferentes UHs dispersas por toda a área do gráfico. De maneira complementar, a combinação entre os gráficos apresentados nas Figuras 12 e 13 permitiu a compreensão de semelhança composicional de *clusters* de amostras por área, UH e matriz.

Esta combinação foi gerada utilizando a Figura 12 como base e adicionando pontos azuis sobre os símbolos que representam amostras de água subterrânea, sendo a informação sobre quais pontos representam a matriz água subterrânea proveniente da Figura 13. A partir da construção deste “diagrama NMDS composto”, que representa quatro variáveis (distribuição de SQIs, área, UH e matriz), *clusters* de amostras de áreas e níveis coincidentes foram delineados.

A Figura 22 apresenta um mosaico elaborado a partir da utilização de um “gráfico combinado” como base para delimitação de *clusters* representativos de cada área (A a G). Esperava-se observar, com esse exercício, um agrupamento de amostras por nível, refletindo um padrão de diferenciação composicional das amostras. Esta diferenciação poderia indicar possíveis interações de SQIs com o meio físico e efeito das propriedades físico-químicas das substâncias em sua mobilidade e solubilidade, por exemplo. Este agrupamento por nível seria mais facilmente observado se a composição original dos eventos de contaminação de cada área fosse

a mesma em todos os pontos avaliados. Entretanto, foi possível observar na Figura 22 mais de um *cluster* de amostras provenientes de uma mesma UH em cada área, o que sugere que houveram vazamentos de diferentes composições dentro de cada área. Ademais, a figura sugere que há *clusters* de amostras de áreas diferentes com composição semelhante.

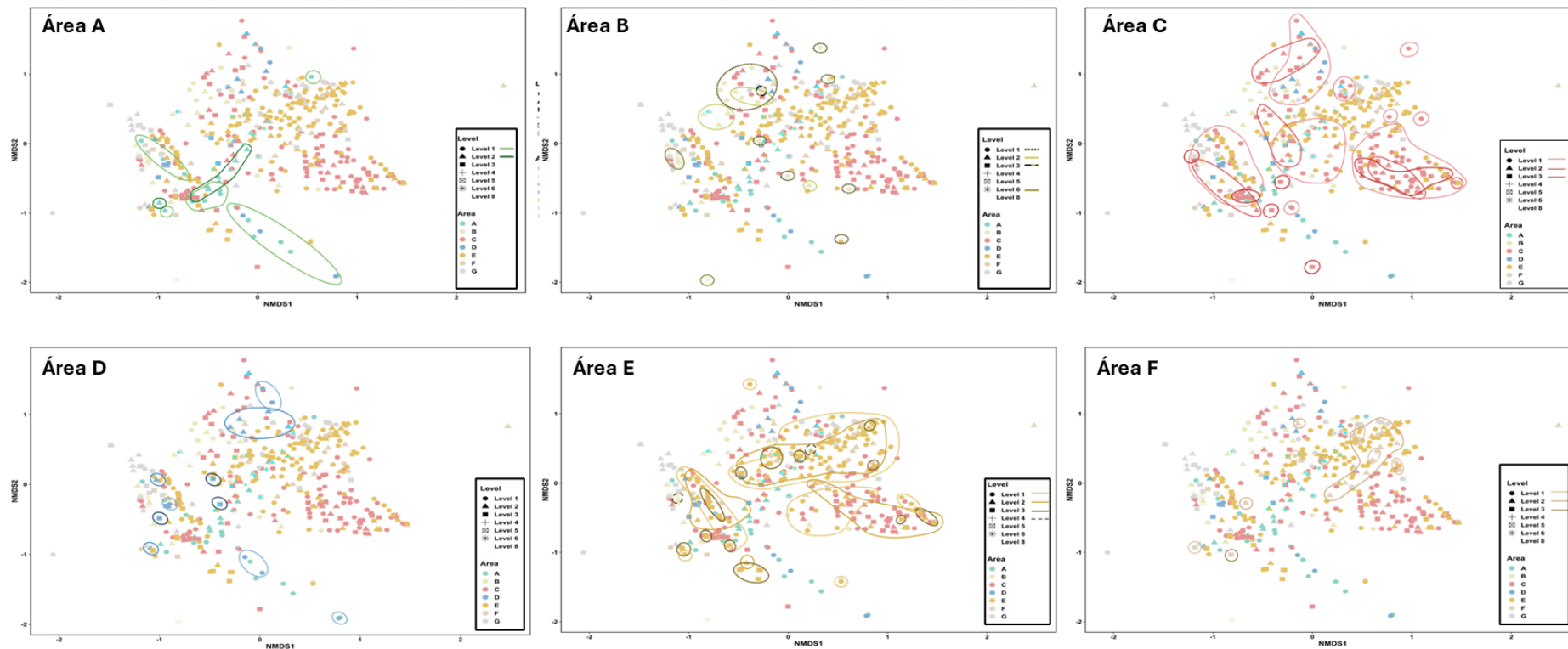


Figura 22. Avaliação de clusters de amostras de solo e água subterrânea por nível estratigráfico a cada área em diagramas NMDS



## **Comparação entre avaliação qualitativa e resultados analíticos**

A presença de amostras rasas com composições semelhantes em áreas diferentes e composições diferentes numa mesma UH de uma mesma área indica que a ocorrência de SQIs não são unicamente associadas às suas áreas fonte (A, B, C, D, E, F ou G), sugerindo a ocorrência de vazamentos de composições diferentes em áreas diferentes.

Os gráficos do Anexo II representam com clareza as diferenças composicionais entre amostras de solo com profundidade. É possível observar semelhanças entre a composição das amostras mais rasas de algumas áreas e padrão de diferenciação comum com profundidade. Entretanto, observou-se que a diferenciação de composição das amostras de solo em sondagens das áreas C a E não necessariamente seguiriam padrão unicamente condizente com a composição das misturas de SQIs derramadas sobre o respectivo ponto do site. Entende-se que o motivo dessa “imprevisibilidade” da diferenciação de SQIs nas sondagens avaliadas é existência de áreas fonte a montante destas, que poderiam influenciar no aporte de SQIs a níveis saturados das áreas C a E, a jusante.

Visando facilitar a avaliação, clusters de amostra representativas de UHs coincidentes também foram delineados sobre diagramas NMDS criados para cada área, e comparados aos gráficos de barras empilhadas gerados com amostras de solo (maioria dos dados disponíveis) agrupados por sondagem.

A Figura 23 apresenta o resultado da compilação de gráficos provenientes do Anexo 2 com Figuras 14-20, sobre as quais *clusters* de diferentes UH foram delineados dentro do diagrama NMDS de cada área. As áreas fonte A a E foram representadas em sequência condizente ao fluxo da água subterrânea apresentado na Figura 2 (seção A-A') para que fosse possível observar a presença de SQIs provenientes de áreas a montante em níveis mais profundos de sondagens a jusante.

De maneira geral, observa-se a existência de mais de uma área fonte dentro das áreas A a E, indicada por diferentes composições de amostras rasas (coletadas a profundidades menores que 3 m) de cada área. A diminuta ocorrência de compostos orgânicos voláteis em níveis rasos (UH 1) alinhados ao conhecimento do histórico do site (em que é sabido que os eventos de contaminação aconteceram há mais de 15 anos), sugerem que o conteúdo original de voláteis nesses níveis já tenha particionado para a fase vapor e substâncias mais móveis já tenham migrado para níveis mais profundos. Por este motivo, compostos predominantes nas amostras mais rasas comumente são os compostos menos móveis, tais como 3,4-nitroclorobenzeno,

bis(2-etilhexil)ftalado, tetraclorobenzenos e cloroanilinas. Estes compostos de baixa mobilidade, quando presentes em níveis mais profundos (especialmente UH 2), podem ser sugestivos do caminho de percolação de volumes antigos de orgânicos. Dentro de UHs saturadas, é possível observar a tendência de aumento na proporção de compostos mais móveis e solúveis, como clorobenzeno, benzeno e dicloroetano. Entretanto, algumas amostras eventualmente apresenta maior proporção de compostos menos móveis (como cloroanilinas) a profundidade maiores que 10m. Essa intercalação entre amostras com predominância de compostos móveis/solúveis e compostos menos solúveis/de maior  $K_{oc}$  são indicativas da presença de zonas de fluxo e armazenamento que se intercalam dentro das UHs. Conforme descrito no item 2.2, a geologia local da área de estudo é marcada por substancial heterogeneidade, condizente com o ambiente deposicional e contexto geológico regional.

Em geral, espera-se que os níveis com predominância de compostos solúveis sejam zonas de fluxo (exemplo 8,3 m da sondagem apresentada à direita como representativa da Área B, Figura 23) e os níveis com compostos menos móveis sejam possíveis zonas de lenta advecção ou de armazenamento. Estas zonas de lenta advecção ou armazenamento possivelmente receberam um volume substancial de SQIs historicamente e, hoje, armazenam certa massa dessas SQIs e as libera às zonas de fluxo lentamente, por difusão.

1,2-diclorobenzeno, Clorobenzeno, 1,2 dicloroetano e Tolueno atingiram os níveis mais profundos no site em solo (HSU 6). É importante ressaltar que bis 2-etilhexilftalato aparenta ocorrer em abundância em alguns níveis de profundidade maior que 5 metros, porém sua presença mais profunda geralmente é associada a amostras de baixas concentrações de orgânicos totais. Isso provavelmente ocorre devido à sua baixa mobilidade e solubilidade, elevada hidrofobicidade ( $K_{ow}$ ) e coeficiente de adsorção ( $K_{oc}$ ). Compreende-se que sua presença seja indicativa da passagem histórica de pulsos de misturas de SQIs pelos níveis de amostragem. Entende-se que este composto tenha sido um dos componentes de misturas de orgânicos que teriam sido derramadas ao meio subterrâneo durante a operação da fábrica (há mais de 15 anos). Este tempo seria suficiente para que muitos destes orgânicos tenham particionado para outros compartimentos do meio, sido degradados ou transportados.

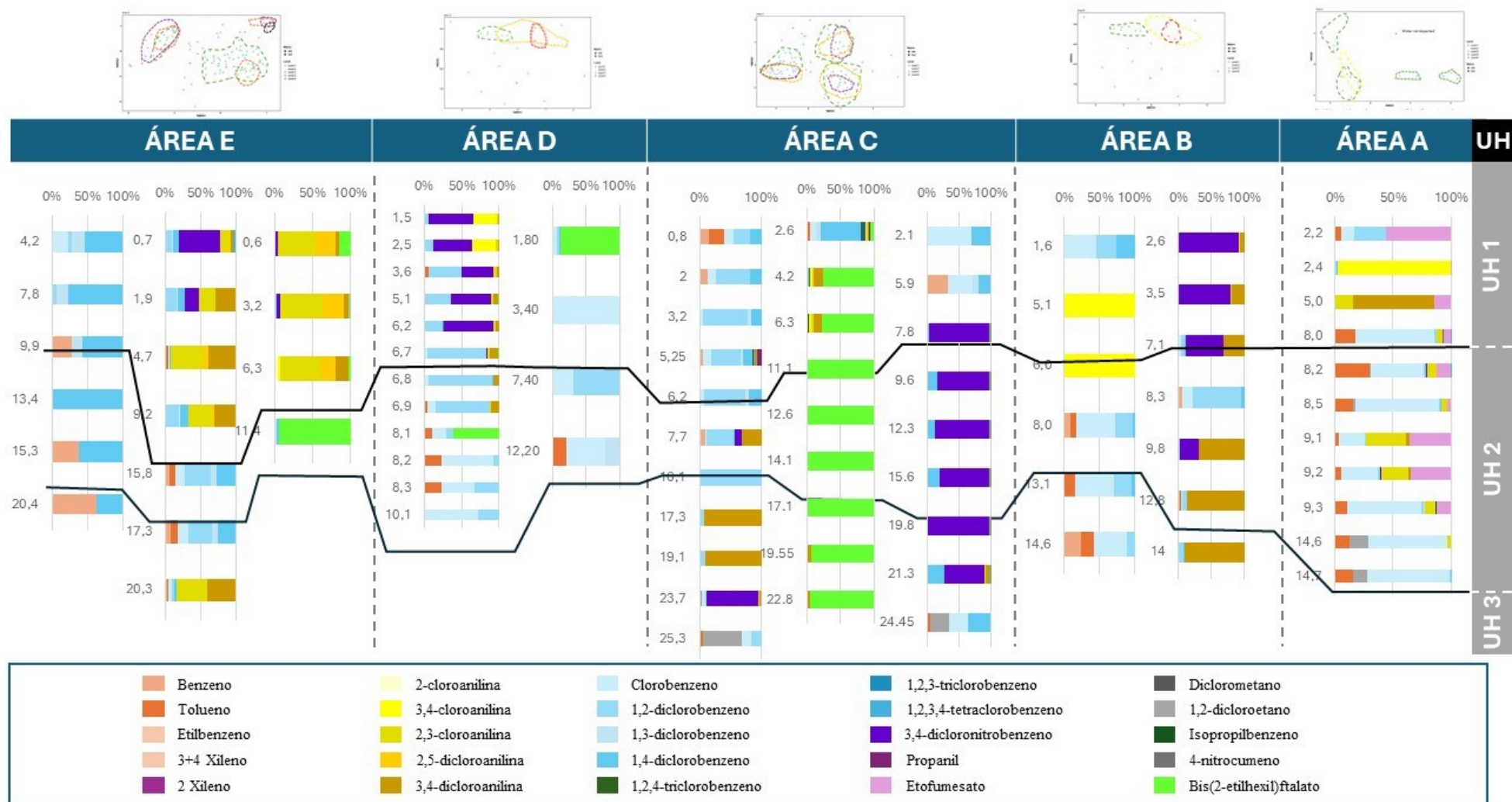


Figura 23. Gráficos de barras empilhadas apresentando a predominância de SQIs por amostras em sondagens representativas de cada área

## 7. CONCLUSÕES

O presente estudo apresenta uma avaliação qualitativa e estatística da distribuição vertical de compostos orgânicos voláteis e semi-voláteis em uma propriedade industrial contaminada desativada. A área de estudo possui um longo histórico de contaminação, marcado pelo vazamento de misturas complexas de substâncias químicas de interesse (SQIs) provenientes de múltiplas fontes em ambiente de geologia heterogênea, o que dificulta a previsibilidade da distribuição dessas SQIs e requer altos investimentos com investigação e remediação.

Com o objetivo de compreender a distribuição de SQIs no site e estabelecer raciocínios que auxiliem na previsibilidade dos compartimentos não avaliados do *site*, o estudo englobou a avaliação de propriedades físico-químicas das SQIs isoladamente, avaliação estatística descritiva e multi-variada e avaliação qualitativa da composição de amostras em profundidade. Resultados analíticos de 372 amostras de solo coletadas entre 2012 e 2019 e 32 amostras de água subterrânea (segundo semestre de 2021) foram avaliados.

Para facilitar o entendimento e discussão dos dados, as SQIs dos sites foram discutidas em grupos e individualmente. Os grupos de SQIs do site são BTEX, cloroanilinas, clorobenzenos, nitroclorobenzenos, pesticidas e “outros”. A presença destes compostos foi avaliada por matriz (solo e água subterrânea) e por unidade estratigráfica (UH). Discussões foram traçadas em âmbito qualitativo e semelhanças estatísticas foram avaliadas a partir de análise estatísticas de escalonamento multidimensional não métrico (*non-metric multidimensional scaling* – NMDS).

Dentre as principais conclusões do estudo, destaca-se que, apesar de haver a discriminação de 7 áreas fonte no modelo conceitual do site (A, B, C, D, E, F e G), a avaliação estatística multi-variada revelou grupos de amostras de composições semelhantes em áreas fontes diferentes e *clusters* diferentes de amostra de mesmo nível estratigráfico numa única área. Amostras de água subterrânea apresentaram compatibilidade com composições apresentadas por amostras de solo.

Com relação à dispersão de compostos no site, observa-se que aqueles de menor mobilidade (maior  $K_{oc}$ ,  $K_{ow}$  e menor solubilidade em água), como Bis(2-etilhexil)ftalato, pesticidas e Nitroclorobenzeno, ocorrem em maiores concentrações na UH 1 e, em seguida, na UH 2. Amostras de solo com predominância de Bis 2-etilhexilftalato em profundidades maiores que 5 m geralmente apresentavam baixas concentrações ( $< 50$  mg/kg) de orgânicos totais. Estas ocorrências podem ser indicativas do caminho de percolação de volumes significativos de mistura de orgânicos, uma vez que o composto é o que apresenta menor mobilidade no meio,

pois foi detectado muito presente em amostras de baixa concentração (provavelmente foi o único remanescente).

2,3- e 3,4-dicloroanilinas ocorrem próximas à area fonte e dissolvidas em água até a UH-4. Presença de clorobenzenos em água subterrânea neste nível e em solo e água na UH-6 parece indicar grandes pulsos antigos de contaminação.

Ademais, percebe-se que a zona próxima às UHs 3-5 concentra grande variedades de SQIs e as maiores massas de orgânicos em água subterrânea, uma vez que corresponde a um nível de elevada condutividade hidráulica, sob influência da barreira hidráulica profunda, que atrai partículas de orgânicos presentes nos níveis adjacentes.

Com relação a avaliação descritiva de resultados analíticos, observou-se que a composição de amostras de solo costuma indicar predominancia de compostos mais móveis com a profundidade e em níveis correspondentes a zonas de fluxo. Zonas de armazenamento costumam apresentar compostos menos móveis com significativa predominância na composição. Ademais, o alinhamento das áreas fonte A a E à direção de fluxo da água subterrânea favoreceu a ocorrência de compostos diferentes dos encontrados nas áreas fonte em níveis mais profundos (> 20 m, já na UH 3).

Em suma, em se tratando da previsibilidade de distribuição de substâncias no site, percebe-se que há maiores massas em solo na UH 1, SQIs mais solúveis e voláteis em zonas de fluxo da UH 2, máximo de massas em água na UH 3, e substâncias que se distanciaram mais de suas áreas fonte foram as mais solúveis e de menor K<sub>oc</sub> e K<sub>ow</sub>, que apareceram em concentrações traços na UH 6 e 8 (1,2-dicloroetano e clorobenzeno). Em solo, tolueno, clorobenzeno, benzeno e 1,2-dicloroetano foram as predominantes (UH 6)..

O estudo sugere, portanto, que não há necessidade de realizar mais perfurações para amostragem nas UHs 6 e 8, que a barreira tem atraído compostos mais solúveis para as unidades HSUs 3 e 4, a UH 2 deve representar expressiva fonte secundária mas contém muita massa de substâncias de baixa mobilidade e a UH 1 foi bem caracterizada, com densidade de amostragem próximo às areas fonte justificáveis pra delimitação de potenciais volumes detalhados para remediação.

## **8. REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS**

Brost, E. J. and DeVaul, G. 2000. "Non-Aqueous Phase Liquid (NAPL) Mobility in Soil. American Petroleum Institute, GRI, No.9

Cohen, R. and Mercer, J. 1993. DNAPL Site Evaluation

ITRC DNAPL Site evaluation

Kueper, B and Davis, K. 2009. Assessment and Delineation of DNAPL Source Zones at Hazardous Waste Sites. USEPA

Suthan SUTHERSAN et al 2015. The new ROI: return on investigations by utilizing smart characterization methods.

Zimdahl, 1999; Kogan e Bayer 1996; Rossi et al. 1994

## **ANEXO I - TABELAS**

Tabela I. 1. Propriedades físico-químicas dos compostos

Composto	CAS	Grupo	Peso Molecular	Volatilidade	Pressão de Vapor	Ponto de fusão	Ponto de ebulição	Densidade	Coeficientes de Partição		Solubilidade em água
			MW	H' (*)	VP (mm Hg)	MP (°C)	BP (°C)	d (g/cm <sup>3</sup> )	K <sub>oc</sub> (L/kg)	log K <sub>ow</sub> (*)	S (mg/L)
Benzeno	71-43-2	BTEX	78,12	0,23	94,80	5,50	80,00	0,88	145,80	2,13	1790,00
Tolueno	108-88-3	BTEX	92,14	0,27	28,40	-94,90	110,60	0,86	233,90	2,73	526,00
Ethylbenzeno	100-41-4	BTEX	106,17	0,32	9,60	-94,90	136,10	0,86	446,10	3,15	169,00
2-Xileno	95-47-6	BTEX	106,17	0,21	6,61	-25,20	144,50	0,88	382,90	3,12	178,00
Diclorometano	75-09-2	Outros	84,93	0,13	435,00	-95,10	40,00	1,33	21,73	1,25	13000,00
1,2-dicloroetano	107-06-2	Outros	98,96	0,05	78,90	-35,50	83,50	1,25	39,60	1,48	8600,00
Clorobenzeno	108-90-7	CB	112,56	0,13	11,97	-45,31	131,70	1,11	233,90	2,84	498,00
1,2-diclorobenzeno	95-50-1	CB	147,00	0,08	1,36	-16,70	180,00	1,31	382,90	3,43	156,00
1,3-diclorobenzeno	541-73-1	CB	147,00	0,11	2,15	-24,80	173,00	1,29	375,30	3,53	125,00
1,4-diclorobenzeno	106-46-7	CB	147,00	0,10	1,74	52,09	174,00	1,25	375,30	3,44	81,30
1,2,4-triclorobenzeno	120-82-1	CB	181,45	0,06	0,46	17,00	213,50	1,46	1356,00	4,02	49,00
1,2,3-triclorobenzeno	87-61-6	CB	181,45	0,05	0,21	53,50	218,50	1,45	1383,00	4,05	18,00
1,2,3,4-tetraclorobenzeno	634-66-2	CB	215,90	0,03	0,00	47,50	254,00	1,70	2480,00	4,60	5,92
3,4-dicloronitrobenzeno	99-54-7	NCB	192,00	0,00	0,01	43,00	255,50	1,46	393,00	3,12	121,00
2-chloroanilina	95-51-2	Anilinas	127,57	0,00	0,20	-14,00	208,80	1,21	106,66	1,90	8200,00
3-chloroanilina	108-42-9	Anilinas	127,57	0,00	0,07	-10,40	230,50	1,22	103,66	1,88	5400,00
4-chloroanilina	106-47-8	Anilinas	127,57	0,00	0,03	72,50	232,00	1,43	112,70	1,83	3900,00
2,3-dichloroanilina	608-27-5	Anilinas	162,01	0,00	0,03	24,00	252,00	1,38	396,64	2,82	262,00
2,5-dichloroanilina	95-82-9	Anilinas	162,01	0,00	0,02	50,00	251,00	1,54	355,00	2,75	230,00
3,4-dichloroanilina	95-76-1	Anilinas	162,01	0,00	0,01	72,00	272,00	1,33	193,00	2,69	92,00
Isopropilbenzeno	98-82-8	Others	120,20	0,47	4,50	-96,00	152,40	0,86	697,80	3,66	61,30
4-nitrocumeno	1817-47-6	Others	165,19	0,00	0,02	85,74	106,70	1,11	399,00	3,45	29,90
Propanil	709-98-8	Pesticidas	218,08	0,00	0,00	92,00	351,00	1,25	175,90	3,07	152,00
Etofumesato	26225-79-6	Pesticidas	286,35	0,00	0,00	71,00	382,36	1,29	213,00	2,70	50,00
is(2-etillhexil)ftalato	117-81-7	Ftalato	390,57	0,00	0,00	-55,00	384,00	0,98	119600,00	7,60	0,27



