

DISTRIBUIÇÃO AMBIENTAL DE POLUENTES ORGÂNICOS ENCONTRADOS EM EFLUENTES INDUSTRIAIS

Aluno: Maria Luisa Nerys de Moraes Carneiro

Orientador: Roberto José de Carvalho

Introdução

Neste projeto foi desenvolvido um banco de dados de compostos orgânicos potencialmente poluentes do meio ambiente, tais como BTEXs, HPAs, PCBs, dioxinas e pesticidas. O banco contém, até o momento, 150 substâncias incluindo os dados relevantes para aplicação em *softwares* de modelagem que descrevem o destino de compostos químicos no ambiente.

Objetivos

Obter a distribuição ambiental de substâncias orgânicas encontradas em efluentes de diversas indústrias entre os compartimentos de um sistema ambiental hipotético. Aplicar indicadores do comportamento ambiental de compostos orgânicos para identificar os compartimentos preferenciais.

Metodologia

O projeto inicialmente destinou-se à confecção de uma tabela contendo os dados necessários para a utilização do modelo de multimeios CEMC Nível I. Para isto, foram procurados os seguintes dados de cada composto químico selecionado para estudo:

- Nome completo utilizado pela IUPAC;
- Número de CAS (Chemical Abstracts Service), registro único de controle universal de substâncias químicas;
- Massa molar (g/mol);
- Solubilidade em água (mg/L);
- Pressão de vapor na unidade (Pa);
- Ponto de fusão (°C);
- Coeficiente de partição octanol-água;
- Constante da lei de Henry (Pa.m³/mol);

Além destes, buscou-se classificar a substância em classes, de modo que fosse possível colocá-las em grupos de acordo com sua característica orgânica e funcional. As classes nomeadas foram: Fenóis, BTEX (benzeno, tolueno, etilbenzeno e xileno), HPA (hidrocarbonetos poliaromáticos) dioxinas e furanos, PCBs (bifenis policlorados), solventes, éteres, alcoóis, cetonas, aminas, ácidos, outros compostos poliaromáticos, ésteres e pesticidas.

Os compostos que não puderam ser classificados em nenhuma destas classes receberam uma classificação genérica.

De posse de tais dados, utilizou-se o programa de modelagem desenvolvido pelo Centro Para Modelagem e Química Ambiental (CEMC) da Universidade de Trent, chamado Nível I. Este modelo calcula a distribuição de equilíbrio de uma quantidade fixa de uma

substância em um sistema de controle fechado, sem reações de degradação, transportes advectivos e difusivos. Esta etapa de estudo objetiva a análise dos poluentes no estágio final de dispersão, isto é, quando já se encontram em equilíbrio no ambiente, baseando-se no modo mais simplificado de distribuição. O modelo não estuda os diferentes tipos de saída que o poluente pode ter no meio, visando apenas avaliar qual seu comportamento preferencial de distribuição, isto é, em que tipo de compartimento (água, ar, solo ou sedimento) ele tenderá a permanecer.

O modelo permitiu obter novos parâmetros a partir dos dados fornecidos. Tais parâmetros foram acrescentados à tabela para compor o banco de dados:

- K_{oc} - coeficiente de adsorção de carbono orgânico no solo ou sedimento (L/kg) utilizado para estimar a mobilidade do composto nesses meios.
- K_{aw} - coeficiente de partição ar-água que indica a hidrofobicidade do composto e sua tendência a volatilizar.

A partir dos valores de K_{oc} , calculou-se o log (K_{oc}), que é o parâmetro normalmente empregado nos modelos, e, a partir do K_{aw} , calculou-se o índice de distribuição no ar. Este índice permitiu três classificações das substâncias: “não volátil”, “volátil” e “controlada”; indicando se a dispersão do poluente no ambiente acarretaria em acúmulo ou não no ar, ou ainda uma dispersão intermediária na atmosfera, e, portanto, controlável.

A segunda etapa de confecção da tabela deu-se pela pesquisa dos parâmetros de tempo de meia vida na água, ar, solo e sedimento, objetivando o cálculo do segundo índice de distribuição da tabela, o índice GUS (índice de Gustafson), referente ao potencial de lixiviação do composto em águas subterrâneas. A partir do cálculo deste índice, foi possível classificar as substâncias em “lixivante”, “não lixivante” e “indeterminada”. O terceiro índice de distribuição da tabela foi o índice BCF (fator de bioconcentração), indicador do grau de concentração de uma substância em organismos vivos. Quanto maior o BCF, mais bioconcentrante é o poluente e maior o perigo para os organismos no topo da cadeia alimentar.

Por fim, objetivando avaliar o índice de toxicidade das substâncias, coletaram-se dados do parâmetro LD50 - dose oral para ratos (mg/kg) - o qual diz respeito à dose letal para metade de uma população desses animais. Quanto menor o LD50, mais tóxico é o composto.

Conclusões

O projeto determinou índices importantes para a avaliação do comportamento de poluentes na biosfera. Estimou também o destino final no ar, água e organismos vivos, visando uma ampla caracterização da história da substância uma vez dispersa na natureza.

Referências

3 – MACKAY, D. **Multimedia Environmental Models: The Fugacity Approach**. 2nd.ed. Boca Raton, Fla.: Lewis Publishers, 2001. 261p.