



Joana Filipa Alves Monteiro

Licenciada em Engenharia do Ambiente

**Avaliação do potencial de atenuação
natural do passivo ambiental das
bacias de lamas oleosas da RESIM -
Águas de St. André - Caso de estudo**

Dissertação para obtenção do Grau de Mestre em
Engenharia do Ambiente – Perfil Engenharia Sanitária

Orientador: Artur João Lopes Cabeças – Professor
Auxiliar Convidado, FCT/UNL
Co-orientador: Professora Susete Maria Martins Dias,
IST/UL

Júri:

Presidente: Prof. Maria da Graça Madeira Martinho
Arguente: Prof. Ana Isabel da Espinha Silveira
Vogal: Artur João Lopes Cabeças – Professor Auxiliar Convidado

“Avaliação do potencial de atenuação natural do passivo ambiental das bacias de lamas oleosas da RESIM – Águas de Sto. André – Caso de estudo” Joana Filipa Alves Monteiro
Copyright ©, FCT/UNL

A Faculdade de Ciências e Tecnologia e a Universidade Nova de Lisboa têm o direito, perpétuo e sem limites geográficos, de arquivar e publicar esta dissertação através de exemplares impressos reproduzidos em papel ou de forma digital, ou por qualquer outro meio conhecido ou que venha a ser inventado, e de a divulgar através de repositórios científicos e de admitir a sua cópia e distribuição com objetivos educacionais ou de investigação, não comerciais, desde que seja dado crédito ao autor e editor.

Agradecimentos

Ao Engº Artur Cabeças por acreditar neste trabalho e pelo seu apoio e motivação.

À Professora Susete Dias pela disponibilidade de meios, atenção e pelo conhecimento transmitido.

Um agradecimento especial à Mestre Joana Fonseca Duarte, do Instituto Superior Técnico, por todo o apoio, paciência e tempo dispendidos durante a realização deste trabalho.

Ao Engº Edward Zungailia pela atenção, preocupação e disponibilidade.

À minha família e agregado por tudo o que fizeram por mim durante toda a minha vida. O maior agradecimento é para a minha avó e amiga, que sempre acreditou em mim e que esteve e sempre estará comigo.

Resumo

As bacias de lamas oleosas do Ecoparque RESIM de Santo André constituem um passivo ambiental devido à contaminação dos seus solos.

O presente trabalho consistiu no estudo de amostras de solo provenientes das bacias de lamas oleosas com o objectivo de avaliar o potencial de atenuação natural nas mesmas. As amostras foram caracterizadas para vários parâmetros físico-químicos como pH, potencial redox, condutividade eléctrica, aniões (através do método de cromatografia iónica), textura, teor de humidade e densidade e foram ainda determinados os compostos orgânicos voláteis e semi-voláteis das amostras de forma a conhecer a natureza da contaminação. A determinação dos compostos orgânicos voláteis foi realizada com os métodos *Headspace* - Cromatografia Gasosa - Espectrometria de massa. Os compostos semi-voláteis foram extraídos através do método *Soxhlet Warm* e determinados através de Cromatografia Gasosa - Espectrometria de Massa.

Tanto a caracterização físico-química como a determinação dos compostos foram realizadas antes e após um ensaio de respirometria. Os ensaios de respirometria foram realizados em frascos *OxiTop* e conduzidos em ambiente controlado a uma temperatura média de 23,5 °C durante alguns dias.

Os contaminantes detetados foram essencialmente hidrocarbonetos aromáticos policíclicos (PAH), mais concretamente o naftaleno, compostos BTEX e uma vasta gama de hidrocarbonetos do petróleo.

As amostras em estudo apresentaram variações nas abundâncias e natureza dos compostos presentes após os ensaios de respirometria. O método de respirometria utilizado não se mostrou apropriado para amostras com elevadas abundâncias de compostos orgânicos voláteis.

Palavras-chave: contaminação de solos, naftaleno, PAH, hidrocarbonetos do petróleo, respirometria.

Abstract

The basins of oily sludge of Ecoparque RESIM of Sto. André constitute an environmental liability due to their soil contamination. The present work consisted in the study of soil samples from the oily sludge basins in order to evaluate their natural attenuation potential.

The samples were characterized for various physico-chemical parameters such as pH, redox potential, electric conductivity, anions (via ion chromatography method), texture, moisture content and density, volatile and semi-volatile organic compounds were also determined in order to know the nature of the contamination. The determination of volatile organic compounds was performed using the methods Headspace - Gas Chromatography - Mass Spectrometry. The semi-volatiles were extracted by the Soxhlet Warm method and determined by Gas Chromatography - Mass Spectrometry.

Both the physical and chemical characterization and the determination of the compounds were performed before and after a respirometry assay. The respirometric assays were performed in OxiTop bottles and conducted in a controlled environment at an average temperature of 23.5 ° C for a few days.

The contaminants detected were mainly polycyclic aromatic hydrocarbons (PAH), namely naphthalene, BTEX compounds and a wide range of petroleum hydrocarbons.

The samples analyzed showed variations in the abundance and nature of the compounds present after the respirometry assays.

The respirometric method used is not suitable for the analysis of microbial respiration of the samples under study.

Keywords: soil contamination, naphthalene, PAH, petroleum hydrocarbons, respirometry.

Índice de matérias

1. Introdução	1
2. Revisão da Literatura	3
2.1 Proteção do Solo	3
2.2 Contaminação do solo	6
2.3 Contaminação por Hidrocarbonetos do Petróleo	18
3. Remediação de Solos	25
3.1 <i>In-situ</i>	26
3.1.1. Extração de vapor do solo (“ <i>Soil Vapor Extraction- SVE</i> ”)	26
3.1.2. Biorremediação	27
3.1.3. Oxidação Química.....	28
3.1.4. Atenuação Natural Monitorizada (ANM)	29
3.2. <i>Ex-situ</i>	30
3.2.1. Dessorção Térmica.....	30
3.2.2 <i>Landfarming</i>	31
3.2.3. Biopilhas.....	32
4. Caso de Estudo.....	35
3.1 RESIM.....	35
3.2 Bacias de deposição de lamas oleosas	36
5. Materiais e Métodos	39
5.1. Materiais	40
5.2 Métodos	42
5.2.1 Condutividade Eléctrica (CE), Potencial Redox (Eh) e pH	42
5.2.2 Iões Fluoreto, Cloreto, Nitrito, Nitrato, Sulfato e Fosfato	42
5.2.3 Teor de humidade (%H).....	43
5.2.4 Densidade (d).....	44
5.2.5 Textura	44
5.2.6 Matéria Orgânica (MO)	45
5.2.7 Compostos Orgânicos Semi-Voláteis (COSV)	45
5.2.8 Compostos Orgânicos Voláteis (COV)	49
5.2.9 Respirimetria	51
6. Resultados e Discussão.....	55
6.1 Caracterização preliminar.....	55
6.2 Otimização do método de Respirimetria	57
6.3 Caracterização de amostras da barreira impermeabilizante e de um talude	58
6.4 Caracterização da Bacia 3.....	65
6.4.1. Caracterização das amostras dos taludes – B e C.....	65

6.4.2. Caracterização das amostras da zona basal a diferentes profundidades – E e F	71
6.4.3. Caracterização das amostras da zona basal de diferentes células – D e G	77
7. Conclusões.....	83
8. Trabalho Futuro.....	85
9. Referências Bibliográficas.....	87
ANEXO I – COSV detetados por GC-MS	93
ANEXO II – COV detetados por GC-MS (amostras sem adição de sal).....	153

Índice de Figuras

Figura 2.1. Locais Contaminados, Potencialmente Contaminados e Remediados.....	8
Figura 2.2. Principais passos do processo de gestão de locais contaminados.....	8
Figura 2.3. Principais atividades geradoras de contaminação do solo	9
Figura 2.4. Principais contaminantes presentes no solo	10
Figura 2.5. Influência de algumas propriedades de um contaminante no seu destino.....	18
Figura 2.6. Constituintes dos produtos do petróleo	19
Figura 2.7. Estruturas dos 16 PAH da U.S. EPA	22
Figura 3.1. Tecnologias de remediação de solos	25
Figura 4.1. Localização do RESIM.....	36
Figura 4.2. Bacia de lamas oleosas da RESIM.....	37
Figura 5.1. Esquema representativo da caracterização físico-química das amostras	39
Figura 6.1. Determinação da eficácia da forma utilizada do agente absorvente	57
Figura 6.2. Otimização da quantidade de massa a utilizar nos ensaios de respirometria.....	58
Figura 6.3. Ensaio de respirometria das amostras A e T com dois replicados.....	60
Figura 6.4. Variação da abundância dos COV da amostra A após ensaio de respirometria com dois replicados.....	61
Figura 6.5. Variação da abundância dos COV da amostra T após ensaio de respirometria com dois replicados.....	62
Figura 6.6. Variação da abundância dos COSV da amostra A após ensaio de respirometria com dois replicados.....	63
Figura 6.7. Variação da abundância dos COSV da amostra T após ensaio de respirometria com dois replicados.....	64
Figura 6.8. Ensaio de respirometria das amostras de taludes B e C com dois replicados	67
Figura 6.9. Variação da abundância dos COV da amostra B após ensaio de respirometria com dois replicados.....	68
Figura 6.10. Variação da abundância dos COV da amostra C após ensaio de respirometria com dois replicados.....	69
Figura 6.11. Variação da abundância dos COSV da amostra B após ensaio de respirometria com dois replicados.....	70
Figura 6.12. Variação da abundância dos COSV da amostra C após ensaio de respirometria com dois replicados.....	70
Figura 6.13. Ensaio de Respirometria das amostras E e F com dois replicados	73
Figura 6.14. Variação da abundância dos COV da amostra E após ensaio de respirometria com dois replicados.....	73
Figura 6.15. Variação da abundância dos COV da amostra F após ensaio de respirometria com dois replicados.....	74
Figura 6.16. Variação da abundância dos COSV da amostra E após ensaio de respirometria com dois replicados.....	75
Figura 6.17. Variação da abundância dos COSV da amostra F após ensaio de respirometria com dois replicados.....	76
Figura 6.18. Ensaio de Respirometria das amostras G e D com dois replicados	79
Figura 6.19. Variação da abundância dos COV da amostra D após ensaio de respirometria com dois replicados.....	79
Figura 6.20. Variação da abundância dos COV da amostra G após ensaio de respirometria com dois replicados.....	80
Figura 6.21. Variação da abundância dos COSV da amostra D após ensaio de respirometria com dois replicados.....	80

Índice de Tabelas

Tabela 2.1. Legislação que contempla a proteção do solo em Portugal	5
Tabela 2.2. Caracterização dos solos através do seu Eh, a pH 7	13
Tabela 2.3. Diâmetros das partículas que definem a textura do solo	13
Tabela 2.4. Frações dos TPH	20
Tabela 2.5. Propriedades físico-químicas do naftaleno	23
Tabela 3.1. Principais vantagens e desvantagens do SVE	27
Tabela 3.2. Principais vantagens e desvantagens do Bioventing.....	28
Tabela 3.3. Principais vantagens e desvantagens da Oxidação Química.....	29
Tabela 3.4. Principais vantagens e desvantagens da ANM.....	30
Tabela 3.5. Vantagens e desvantagens da Dessorção Térmica	31
Tabela 3.6. Principais vantagens e desvantagens da aplicação do Landfarming	32
Tabela 3.7. Principais vantagens e desvantagens das biopilhas	33
Tabela 5.1. Informação sobre as amostras de solo	41
Tabela 5.2. Tempos de Retenção dos Aniões	43
Tabela 5.3. Condições utilizadas nas extrações de compostos orgânicos.....	47
Tabela 5.4. Condições de injeção dos eluatos	49
Tabela 5.5. Variações na rampa de temperaturas aplicadas nos dois métodos	49
Tabela 5.6. Condições utilizadas no HS	50
Tabela 5.7. Condições utilizadas no GC	50
Tabela 5.8. Rampas de temperatura utilizadas na análise das amostras	51
Tabela 5.9. Otimização da quantidade de amostra a utilizar nos ensaios de respirometria	53
Tabela 5.10. Determinação da eficácia do agente absorvente.....	53
Tabela 5.11. Resumo dos ensaios realizados	54
Tabela 6.1. Resultados da caracterização físico-química das amostras S1, S2 e S3 (média ± desvio padrão; n=4).....	56
Tabela 6.2. Resultados da caracterização físico-química das amostras A e T (média ± desvio padrão; n=4)	59
Tabela 6.3. COV detetados nos replicados da amostra A e tempos de retenção	61
Tabela 6.4. COV detetados em ambos os replicados da amostra T e tempos de retenção	62
Tabela 6.5. COSV detetados nos replicados T1 e/ou T2 e tempos de retenção	64
Tabela 6.6. Variações de pH, CE e Eh nos replicados das amostras A e T (média ± desvio padrão; n=4)	65
Tabela 6.7. Resultados da caracterização físico-química das amostras B e C (média ± desvio padrão; n=4)	66
Tabela 6.8. COV detetados em ambos os replicados da amostra B e tempos de retenção	68
Tabela 6.9. COV detetados em ambos os replicados da amostra B e tempos de retenção	69
Tabela 6.10. COSV detetados em ambos os replicados da amostra C e tempos de retenção ..	71
Tabela 6.11. Variações de pH, CE e Eh nos replicados das amostras B e C (média ± desvio padrão; n=4)	71
Tabela 6.12. Resultados da caracterização físico-química das amostras E e F (média ± desvio padrão; n=4)	72
Tabela 6.13. COV detetados em ambos os replicados da amostra E e tempos de retenção	74
Tabela 6.14. COV detetados em ambos os replicados da amostra F e tempos de retenção	75
Tabela 6.15. COSV detetados em ambos os replicados da amostra E e tempos de retenção ..	76
Tabela 6.16. COSV detetados em ambos os replicados da amostra F e tempos de retenção ..	77
Tabela 6.17. Variações de pH, CE e Eh nos replicados das amostras E e F (média ± desvio padrão; n=4)	77
Tabela 6.18. Resultados da caracterização físico-química das amostras D e G (média ± desvio padrão; n=4)	78

Tabela 6.19. Variações de pH, CE e Eh nos replicados das amostras D e G (média ± desvio padrão; n=4)	81
Tabela A.1. Compostos detetados na amostra A inicial (Nome, CAS, área, método e número de replicados em que foram detetados)	93
Tabela A.2. Compostos detetados no replicado A1 após ensaio de respirometria (Nome, CAS, área, método e número de replicados em que foram detetados)	95
Tabela A.3. Compostos detetados no replicado A2 após ensaio de respirometria (Nome, CAS, área, método e número de replicados em que foram detetados)	97
Tabela A.4. Compostos detetados na amostra T inicial (Nome, CAS, área, método e número de replicados em que foram detetados)	99
Tabela A.5. Compostos detetados no replicado T1 após ensaio de respirometria (Nome, CAS, área, método e número de replicados em que foram detetados)	101
Tabela A.6. Compostos detetados no replicado T2 após ensaio de respirometria (Nome, CAS, área, método e número de replicados em que foram detetados)	106
Tabela A.7. Compostos detetados na amostra B inicial (Nome, CAS, área, método e número de replicados em que foram detetados)	108
Tabela A.8. Compostos detetados no replicado B1 após ensaio de respirometria (Nome, CAS, área, método e número de replicados em que foram detetados)	109
Tabela A.9. Compostos detetados no replicado B2 após ensaio de respirometria (Nome, CAS, área, método e número de replicados em que foram detetados)	111
Tabela A.10. Compostos detetados na amostra C inicial (Nome, CAS, área, método e número de replicados em que foram detetados)	113
Tabela A.11. Compostos detetados no replicado C1 após ensaio de respirometria (Nome, CAS, área e método em que foram detetados)	117
Tabela A.12. Compostos detetados no replicado C2 após ensaio de respirometria (Nome, CAS, área e método em que foram detetados)	122
Tabela A.13. Compostos detetados na amostra D inicial (Nome, CAS, área, método e número de replicados em que foram detetados)	126
Tabela A.14. Compostos detetados no replicado D1 após ensaio de respirometria (Nome, CAS, área e método em que foram detetados)	127
Tabela A.15. Compostos detetados no replicado D2 após ensaio de respirometria (Nome, CAS, área e método em que foram detetados)	128
Tabela A.16. Compostos detetados na amostra E inicial (Nome, CAS, área, método e número de replicados em que foram detetados)	130
Tabela A.17. Compostos detetados no replicado E1 após ensaio de respirometria (Nome, CAS, área, método e número de replicados em que foram detetados)	134
Tabela A.18. Compostos detetados no replicado E2 após ensaio de respirometria (Nome, CAS, área, método e número de replicados em que foram detetados)	139
Tabela A.19. Compostos detetados na amostra F inicial (Nome, CAS, área, método e número de replicados em que foram detetados)	143
Tabela A.20. Compostos detetados no replicado F1 após ensaio de respirometria (Nome, CAS, área e método em que foram detetados)	146
Tabela A.21. Compostos detetados no replicado F2 após ensaio de respirometria (Nome, CAS, área e método em que foram detetados)	149
Tabela A.22. Compostos detetados no replicado A1 após ensaio de respirometria (Nome, CAS e área)	153
Tabela A.23. Compostos detetados no replicado A1 após ensaio de respirometria (Nome, CAS e área)	155
Tabela A.24. Compostos detetados no replicado A2 após ensaio de respirometria (Nome, CAS e área)	156
Tabela A.25. Compostos detetados na amostra B inicial (Nome, CAS e área)	158
Tabela A.26. Compostos detetados no replicado B1 após ensaio de respirometria (Nome, CAS e área)	160

Tabela A.27. Compostos detetados no replicado B2 após ensaio de respirometria (Nome, CAS e área)	161
Tabela A.28. Compostos detetados na amostra C inicial (Nome, CAS e área)	163
Tabela A.29. Compostos detetados no replicado C1 após ensaio de respirometria (Nome, CAS e área)	165
Tabela A.30. Compostos detetados no replicado C2 após ensaio de respirometria (Nome, CAS e área)	167
Tabela A.31. Compostos detetados na amostra D inicial (Nome, CAS e área)	169
Tabela A.32. Compostos detetados no replicado D1 após ensaio de respirometria (Nome, CAS e área)	171
Tabela A.33. Compostos detetados no replicado D2 após ensaio de respirometria (Nome, CAS e área)	171
Tabela A.34. Compostos detetados na amostra E inicial (Nome, CAS e área)	172
Tabela A.35. Compostos detetados no replicado E1 após ensaio de respirometria (Nome, CAS e área)	174
Tabela A.36. Compostos detetados no replicado E2 após ensaio de respirometria (Nome, CAS e área)	176
Tabela A.37. Compostos detetados na amostra F inicial (Nome, CAS e área).....	178
Tabela A.38. Compostos detetados no replicado F1 após ensaio de respirometria (Nome, CAS e área)	180
Tabela A.39. Compostos detetados no replicado F2 após ensaio de respirometria (Nome, CAS e área)	182
Tabela A.40. Compostos detetados na amostra T inicial (Nome, CAS e área).....	184
Tabela A.41. Compostos detetados no replicado T1 após ensaio de respirometria (Nome, CAS e área)	186
Tabela A.42. Compostos detetados no replicado T2 após ensaio de respirometria (Nome, CAS e área)	188

Lista de abreviaturas

%H – Teor de Humidade

AdSA - Águas de Santo André, S.A.

AEA – Agência Europeia do Ambiente

ANM - Atenuação Natural Monitorizada

APA - Agência Portuguesa do Ambiente

ATSDR - *Agency for Toxic Substances & Disease Registry*

BTEX - Benzeno, Tolueno, Etilbenzeno e isómeros do Xileno

CAS – *Chemical Abstracts Service Number*

CBO – Carência Bioquímica de Oxigénio

CE - Condutividade eléctrica

CHCL - Hidrocarbonetos clorados

CI - Cromatografia Iónica

COSV - Compostos orgânicos semi-voláteis

COV - Compostos orgânicos voláteis

d - Densidade

Eh - Potencial redox

EIO-NET - *European Environment Information and Observation Network*

EP - Equipa de Projeto

ETAR - Estação de Tratamento de Águas Residuais

FRTR - *Federal Remediation Technologies Roundtable*

GAS - Gabinete da Área de Sines

GC-MS - Cromatografia Gasosa-Espectrometria de Massa

HS-GC-MS - *Headspace*- Cromatografia Gasosa-Espectrometria de Massa

H - Constante da Lei de Henry

INAG - Instituto da Água

JRC - *Joint Research Centre*

K_{oc} - Coeficiente de adsorção ao solo

K_{ow} - Coeficiente de partição octanol-água

MO - Matéria Orgânica

PAA - Programa de Acção em matéria de Ambiente

PAHs - Hidrocarbonetos Aromáticos Policíclicos

PNPOT - Programa Nacional da Política do Ordenamento do Território

PNAAS - Plano Nacional de Acção Ambiente e Saúde

P_{vp} - Pressão de vapor

POVT - Programa de Ordenamento e Valorização do Território

QREN - Quadro de Referência Estratégico Nacional

RESIM – Gestão de Resíduos Industriais de Santo André, S.A.

S - Solubilidade

SVE – Extração de Vapor do Solo (“*Soil Vapor Extraction*”)

T - Temperatura

T_{eb} - Ponto de ebulição

T_f - Ponto de fusão

TPH - Hidrocarbonetos do petróleo

TPHCWG - *Total Petroleum Hydrocarbons Criteria Working Group*

TR - Tempo de Retenção

UE - União Europeia

U.S. EPA - *United States Environmental Protection Agency*

ZILS - Zona Industrial e Logística de Sines

1. Introdução

Objetivo

O presente trabalho teve como objetivo a avaliação do potencial de atenuação natural de amostras de solos provenientes das bacias de lamas oleosas da RESIM – Águas de Sto. André. Foi realizada a caracterização físico-química e a determinação dos compostos presentes nas amostras antes e após um intervalo de tempo em ambiente controlado, com o objetivo de averiguar se neste intervalo ocorriam processos de atenuação natural.

Limitações

Durante o período de trabalhos desenvolvidos nas bacias do RESIM, surgiram algumas limitações ao andamento dos trabalhos que condicionaram no tempo a possibilidade de desenvolverem ensaios *in-situ* para avaliação do grau de contaminação dos solos subjacentes à camada basal.

Com efeito a pluviosidade ocorrida antes e durante o período de Verão, com a conseqüente inundação dos espaços abertos das bacias (resultante da retirada das lamas oleosas e saneamento da camada de solos da zona basal), dificultou de fato o planejamento das ações definidas antecipadamente para o desenvolvimento dos trabalhos de campo.

Assim recorreu-se a um maior número de ensaios em laboratório, ultrapassando assim o condicionamento de presença no terreno. Todavia a obtenção de informação nos ensaios descritos demorou o tempo necessário ao desenvolvimento da pesquisa pretendida (variável que temos de cumprir para obter a necessária informação específica) que por sua vez se refletiu na obtenção de informação complementar face ao tempo disponível para a elaboração da presente dissertação.

2. Revisão da Literatura

2.1 Proteção do Solo

O solo é considerado um recurso não renovável devido aos seus lentos processos de formação e regeneração e rápidas taxas de degradação. Reconhecendo este fato, e tendo em conta que o solo desempenha funções importantes tanto para os ecossistemas como para muitas atividades socio-econômicas, é crucial investir na sua proteção e utilização sustentável. O solo encontra-se exposto a várias pressões ambientais, a maioria resultantes ou agravadas pelas atividades humanas. A degradação dos solos afeta outros domínios ambientais, atualmente protegidos por legislação comunitária específica (água, biodiversidade entre outros) (Akça *et al.*, 2005 e CCE, 2006b).

Proteção do Solo na União Europeia

Apesar de não existir legislação comunitária específica para a proteção do solo na União Europeia (UE) têm sido desenvolvidas propostas legislativas, aplicáveis a todos os Estados-Membros, para a utilização sustentável e proteção do solo. A grande variabilidade de algumas características do solo europeu e o facto de este ser, em muitos casos, propriedade privada, torna o desenvolvimento de uma política de proteção comunitária mais difícil (Akça *et al.*, 2005).

Diferentes políticas da UE têm contribuído para uma proteção fragmentada e incompleta do solo. As directivas adoptadas para a proteção das águas, poluição industrial e resíduos têm contribuído como uma via de proteção, ainda que indirecta, deste compartimento ambiental e na Europa vários países possuem já disposições legais específicas para a sua proteção. Países como Espanha, Itália, Reino Unido, Alemanha, Holanda, Áustria têm políticas em vigor específicas para a proteção e utilização sustentável do solo (CCE, 2006a e EP Solos e Sedimentos, 2012).

Uma das estratégias temáticas abordadas no 6º Programa de acção em matéria de ambiente (PAA) da União Europeia “Ambiente 2010: o nosso futuro, a nossa escolha” foi a proteção do solo como recurso natural e foi a primeira abordagem directa sobre esta temática (CCE, 2001).

A Comissão Europeia publicou em 2006 duas comunicações: a Estratégica Temática de proteção do Solo - COM(2006) 231 final e uma proposta de Directiva-Quadro - COM(2006) 232 final, que pretende estabelecer um quadro comunitário para a proteção do solo através da preservação das funções do mesmo e da prevenção da sua degradação. Nestas comunicações foram identificadas as oito principais ameaças a que o solo está sujeito na UE (CCE, 2006a e CCE 2006b):

- Erosão;
- Compactação;
- Salinização;
- Diminuição da matéria orgânica;
- Contaminação;
- Perda de biodiversidade;
- Impermeabilização;

- Desabamentos de terras e inundações.

A proposta de Directiva-Quadro pretende preencher a lacuna legislativa existente na temática da proteção do solo. Esta directiva tinha como objetivos garantir a produtividade e a utilização sustentável do solo, minimizar e limitar os riscos para o ambiente e saúde humana, providenciar oportunidades para a mitigação climática e também estimular o mercado da remediação do solo. A directiva não foi aprovada por todos os Estados-Membros e desde então não foram efectuados quaisquer progressos pelo Conselho Europeu.

A Estratégia Temática para o Solo foi adoptada a 22 de Setembro de 2006 e consiste numa estratégia comum a todos os Estados-Membros baseada em quatro pilares: sensibilização, pesquisa, integração e legislação. Os objetivos estabelecidos seriam alcançados através da prevenção de uma maior degradação, da preservação das funções e da reabilitação dos solos degradados (CCE, 2006a).

Em 2012 foram publicados uma comunicação e o Relatório da Comissão Europeia: “Aplicação da estratégia temática relativa ao solo e atividades em curso”, complementado com o relatório do *Joint Research Centre* (JRC) “*The State of Soil in Europe*”, publicado com a colaboração da Agência Europeia do Ambiente (AEA). O relatório da Comissão Europeia aborda a implementação da Estratégia Temática e as suas atividades desde a sua adopção em 2006, as tendências a nível da degradação do solo na UE e no mundo e apresenta acções futuras para a proteção do solo. Desde a adopção da estratégia, e apesar de esta ter contribuído para o desenvolvimento de vários projectos e investigações e para uma maior sensibilização relativamente ao solo, não existe ainda nenhuma proteção efectiva nem um seguimento da qualidade do solo nos Estados-Membros da UE (CE, 2012b). Em Julho de 2012 o 6º PAA chegou ao termo, mas muitas das acções e medidas que foram lançadas no seu âmbito continuavam por levar a efeito, pelo que a Comissão Europeia propôs um novo programa para o suceder: a Proposta de Decisão do Parlamento Europeu e do Conselho relativa a um programa geral de ação da União para 2020 em matéria de ambiente «Viver bem, dentro das limitações do nosso planeta» -COM (2012) 710 final, o 7º PAA da UE. Em conjunto com a Estratégia Europa 2020 adotada pela UE pretendem conduzir a Europa para um crescimento sustentável (CE, 2012b e JRC, 2012).

O novo programa pretende proporcionar um quadro global para a política ambiental e identifica nove objetivos prioritários a atingir pela UE e pelos Estados-Membros até 2020. O programa baseia-se no princípio do poluidor-pagador, no princípio da precaução e da ação preventiva e no princípio da correção na fonte.

Um dos objetivos prioritário é proteger, conservar e reforçar o capital natural da UE, que inclui o solo. A prossecução deste objectivo pretende ser feita através da proteção e utilização sustentável da terra e do solo e da continuação da reparação dos sítios contaminados (CE, 2012b e JRC, 2012)

Apesar de se encontrarem em vigor disposições legais, sobre outros meios e sectores, que indirectamente protegem o solo, é necessário criar legislação específica para o mesmo. Nem todas as ameaças ao solo são contempladas nas disposições legais em vigor, e a proteção do solo deveria ser contemplada em políticas sectoriais que entrem em conflito com este objectivo.

A degradação do solo conduz à diminuição da aptidão do mesmo para desempenhar as suas funções, contribuindo assim para a diminuição da produção de produtos alimentares, desertificação e destruição de ecossistemas. (JRC, 2012)

Proteção do solo Portugal

Portugal não possui legislação específica para a proteção do solo apesar de esta ser abordada em diversas políticas de outros sectores e questões ambientais tais como as apresentadas na Tabela 2.1.

Tabela 2.1. Legislação que contempla a proteção do solo em Portugal (adaptado de: EP Solo e Sedimentos, 2012)

Gestão de Resíduos	Decreto-Lei nº 178/2006, de 5 de Setembro, alterado pelo Decreto-Lei nº 73/2011, de 17 de Junho
Responsabilidade por danos Ambientais	Decreto-Lei nº 147/2008, de 19 de Julho
Água	Lei da Água
Ordenamento do Território	<ul style="list-style-type: none">• Programa Nacional da Política de Ordenamento do Território (PNPOT);• Regime jurídico dos instrumentos de gestão territorial (Decreto-Lei nº 380/99, de 22 de Setembro);• Lei de Bases da Política de Ordenamento do Território e de Urbanismo (Lei nº 48/98, de 11 de Agosto, alterada pela Lei nº 54/2007, de 31 de Agosto);
Emissões Industriais	Decreto-Lei nº 127/2013, de 30 de Agosto
Indústria Extractiva	Decreto-Lei nº 90/90, de 16 de Março

A proteção do solo em Portugal é abordada de forma fragmentada e sectorial nos vários instrumentos legais em vigor no país.

O solo e sedimentos são um dos domínios prioritários do Plano Nacional de Acção Ambiente e Saúde (PNAAS), que foi aprovado pela Resolução do Conselho de Ministros nº 91/2008, e que pretende melhorar a eficácia das políticas de prevenção, controlo e redução de riscos para a saúde com origem em factores ambientais.

Para a prossecução dos objectivos foi criada a Equipa de Projecto (EP) Solo e Sedimentos para implementar duas ações do plano: o levantamento de informação e/ou monitorização de poluentes do solo e materiais sedimentares e o levantamento de efeitos na saúde humana associados a poluentes presentes em solos e materiais sedimentares e definição de estratégia de intervenção.

Em 2012 a Agência Portuguesa do Ambiente publicou o “Relatório de Atividades da EP Solo e Sedimentos”. Este relatório foi realizado entre 2009 e 2011 com o objectivo de melhorar a eficácia das políticas de controlo, prevenção e redução de riscos para a saúde derivados de factores ambientais. (EP Solos e Sedimentos, 2012).

O Programa Nacional da Política do Ordenamento do Território (PNPOT) tem como objectivo estratégico a conservação e valorização da biodiversidade, dos recursos e do património natural, paisagístico e cultural e a utilização sustentável dos recursos. Um dos objectivos específicos deste programa é a definição e execução de uma Estratégia Nacional de Proteção do Solo. (EP Solos e Sedimentos, 2012).

Portugal foi um dos países que não contribui com dados para os relatórios da UE sobre o estado dos solos no país.

2.2 Contaminação do solo

Nas últimas décadas a utilização intensiva de químicos e a produção de resíduos em grande escala resultaram na contaminação de vários locais por toda a Europa. Estes locais podem colocar em risco os ecossistemas terrestre e aquático provocando efeitos toxicológicos nos receptores (Panagos *et al.*, 2013).

A contaminação do solo pode ser definida como a presença de substâncias ou microrganismos acima de um nível definido e/ou que possam causar efeitos adversos no ambiente e/ou na saúde humana e provocam a deterioração ou perda de uma ou mais funções do solo (EP Solo e Sedimentos, 2012).

A contaminação pode dever-se à mistura de substâncias líquidas ou sólidas com o solo natural e resulta geralmente de várias atividades e sectores de um país. Os contaminantes estão geralmente física ou quimicamente adsorvidos nas partículas do solo ou contidos nos seus poros (Panagos *et al.*, 2013 e U.S. EPA, n.d-a).

Um dos factores de degradação do solo identificados na Estratégia Temática de proteção do solo e na Proposta de Directiva-quadro é a contaminação, e esta resulta, geralmente, de derrames ou aplicação de substâncias perigosas no solo.

Em 2014 estima-se existirem 2,5 milhões de locais potencialmente contaminado, dos quais 45% estão identificados. O número estimado de locais contaminados ronda os 340 mil, dos quais um terço estão identificados e 14% já foram remediados.

A extensão da contaminação do solo é difícil de quantificar visto que muitos países da UE não possuem inventários completos (AEA, 2014a; CE, 2012; U.S. EPA, n.d-b.; CCE, 2006a e CCE, 2006b).

Estima-se que, à medida que a investigação da contaminação do solo prossegue, o número de locais contaminados aumente. A AEA prevê um aumento de 50% no número de locais contaminados até 2025 (AEA, 2010).

O facto de o solo agir como um reservatório e um filtro para substâncias emitidas pelas atividades humanas leva a que haja uma acumulação das mesmas neste compartimento. Devido à sua actividade biótica e aos seus poderes tampão e de adsorção, o solo possui capacidade de auto-depuração pois é capaz de atenuar os efeitos adversos da contaminação.

Esta capacidade de auto-depuração faz com que o solo actue como um agente protector de outros compartimentos ambientais.

Apesar disto a acumulação excessiva de contaminantes no solo pode conduzir à ultrapassagem dos limites da sua capacidade de auto-depuração (Akça *et al.*, 2005; EP Solo e Sedimentos, 2012).

A contaminação pode causar impactes ambientais e socio-económicos de longa duração, afectando as funções ecológicas e produtivas do solo. Quando uma substância é libertada no ambiente nem sempre ocorre exposição à mesma. A exposição pode ocorrer por inalação, ingestão de solo ou contacto dérmico.

A exposição da população ou individuo à contaminação pode ser directa (ingestão ou contacto dérmico) ou indirecta (ingestão de água contaminada ou de alimentos contaminados).

Quando ocorre exposição a uma substância os efeitos adversos e a intensidade dos mesmos nos receptores são determinados por vários factores como a dose a que estão expostos, a

duração da exposição e os impactos causados podem ser muito heterogêneos (EP Solo e Sedimentos, 2012 e Turbé *et al.*, 2010)

A absorção de contaminantes por culturas destinadas à alimentação humana e animal pode ter um impacto na qualidade dos produtos.

A contaminação de águas subterrâneas pode ocorrer devido a acidentes ou lixiviação de contaminantes das atividades humanas. A contaminação do solo pode decorrer de várias atividades e pode ser de origem local ou difusa e ser de natureza química ou biológica. Geralmente a contaminação local resulta da atividade industrial, acidentes ou da deposição de resíduos e a contaminação difusa resulta da aplicação de pesticidas ou fertilizantes na atividade agrícola (Akça *et al.*, 2005)

A contaminação biológica está associada à presença de microrganismos patogênicos (vírus, bactérias, fungos e parasitas) enquanto a contaminação química está associada à presença de substâncias químicas (Akça *et al.*, 2005; CCEb, 2006 e EP Solo e Sedimentos, 2012).

A remediação dos locais contaminados pode ser extremamente morosa, difícil e dispendiosa. Têm vindo a ser reunidos dados sobre o número de locais contaminados e potencialmente contaminados na Europa. Estes dados são reunidos em relatórios e divulgados às partes interessadas.

Exemplos dessas colecções de dados são os relatórios e o indicador CSI 015 “*Progress in the Management of Contaminated Sites*”. A nível europeu ainda não existem metas definidas para a redução da contaminação do solo, mas vários países possuem já metas nacionais (AEA, 2007).

Um “Local Contaminado” é definido como uma área bem delimitada onde a presença de contaminação foi confirmada, representando um risco potencial para os humanos, ecossistemas, águas e outros meios receptores.

Dependendo da severidade do risco de efeitos adversos nos receptores, podem ser necessárias medidas de gestão de risco (JRC, 2014).

Um “Local Potencialmente Contaminado” define-se como um local onde se suspeita haver contaminação do solo mas que ainda não foi confirmada.

Nestes locais deve ser feita uma investigação detalhada de forma a averiguar se existe risco de efeitos negativos nos receptores (JRC, 2014). Na Figura 2.1 estão representados os dados, relativos a 2011, do número de locais contaminados e potencialmente contaminados (identificados e estimados).

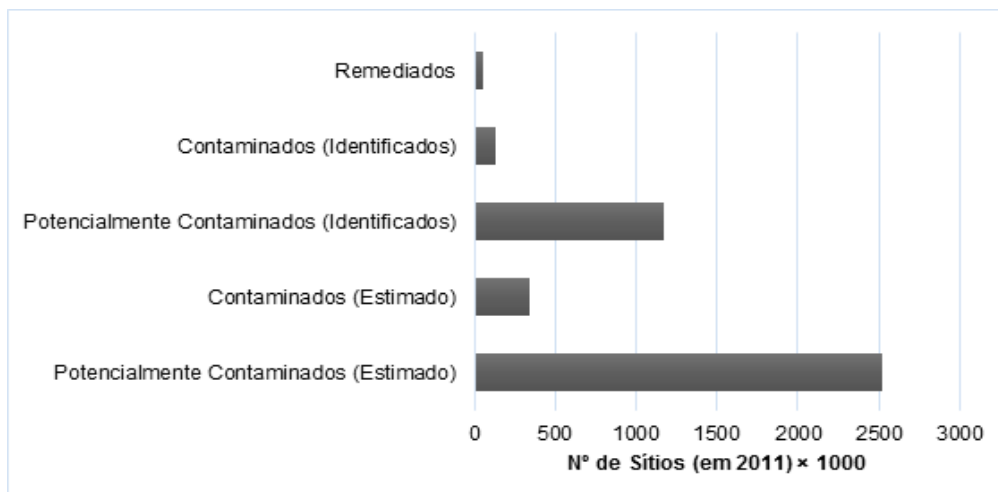


Figura 2.1. Locais Contaminados, Potencialmente Contaminados e Remediados (adaptado de JRC,2014)

Quando existe suspeita de contaminação de um local é necessário proceder a uma série de passos de avaliação e gestão da contaminação. Na avaliação da contaminação é necessário identificar os contaminantes, as suas concentrações e a sua distribuição no solo (Jorge, 2001).

A gestão dos locais contaminados tem como objectivos a avaliação e, quando necessário, a redução a níveis aceitáveis do risco de impactes adversos, devidos à contaminação, nos receptores.

Estão definidos quatro passos essenciais, representados na Figura 2.2, no processo de gestão dos locais contaminados (JRC, 2014).



Figura 2.2. Principais passos do processo de gestão de locais contaminados (adaptado de AEA, 2012)

Em 2001 foi criado o indicador CSI 015 “*Progress in the management of contaminated sites*” pela AEA. Este indicador significa “*Core Set Indicator*” e pretendia avaliar os efeitos adversos causados no ambiente e as medidas tomadas para cumprir as normas ambientais.

O CSI 015 acompanha o progresso na gestão dos locais contaminados, a restrição do uso do solo e das águas superficiais e subterrâneas como consequência da contaminação e os recursos financeiros facultados para a remediação.

Desde a criação do indicador CSI 015 foram efectuadas seis colecções de dados e foram introduzidas modificações e adaptações ao indicador antes de cada colecção ser realizada.

Os parâmetros incluídos nos dados recolhidos referiam-se aos passos seguidos na gestão dos locais contaminados. O JRC publicou, em Janeiro de 2014, o relatório “*Progress in the Management of Contaminated Sites in Europe*” que pretende reunir informação sobre o progresso efectuado pelos países europeus na identificação e gestão de locais contaminados.

O relatório contribuiu para o novo indicador publicado em Maio do mesmo ano pela AEA: a avaliação “*Progress in management of contaminated sites*”, o novo indicador LSI 003 que substituiu o antigo indicador CSI 015. O novo indicador significa “*Land and Soil Indicators*” e refere-se a um conjunto temático de indicadores de terra e solo que ainda se encontram em desenvolvimento.

Nesta avaliação são contemplados a extensão estimada da contaminação de solo, o progresso na gestão e controlo da contaminação de solos, atividades e sectores poluentes e contaminantes e a despesa com as acções de remediação. Portugal foi um dos países que não contribuíram com dados para o indicador (AEA, 2014b e JRC, 2014).

A organização JRC *European Soil Data Centre*, entre 2011 e 2012, recolheu e organizou os dados fornecidos por países pertencentes à *European Environment Information and Observation Network* (EIO-NET), relativos ao progresso da gestão dos locais contaminados. Foram requisitados dados a 39 países dos quais 33¹ são membros do Espaço Económico Europeu (EEE). Apenas 27 países contribuíram com dados, Portugal não contribuiu. Os resultados da coleção de dados foram extrapolados para toda a Europa. A deposição e tratamento de resíduos e a atividade industrial são as principais fontes de contaminação do solo. A deposição e tratamento de resíduos urbanos e industriais originam um terço da contaminação do solo na Europa (AEA, 2014a).

O sector industrial, na maioria dos casos, contribui mais do que o sector comercial para a contaminação. A indústria metalúrgica e petrolífera são as que mais contribuem para a contaminação produzida pelo sector industrial (AEA, 2014a). Os sectores e atividades que contribuem para a contaminação do solo variam consoante o estado de desenvolvimento, a estrutura industrial e principais atividades económicas de cada país. Devido a um maior rigor na aplicação da legislação em vigor, muitas indústrias têm vindo a modificar os seus processos de produção de modo a reduzir a quantidade produzida de resíduos. (AEA, 2010).

As atividades que mais contribuem para a contaminação do solo e a contribuição de cada uma encontram-se representadas na Figura 2.3.

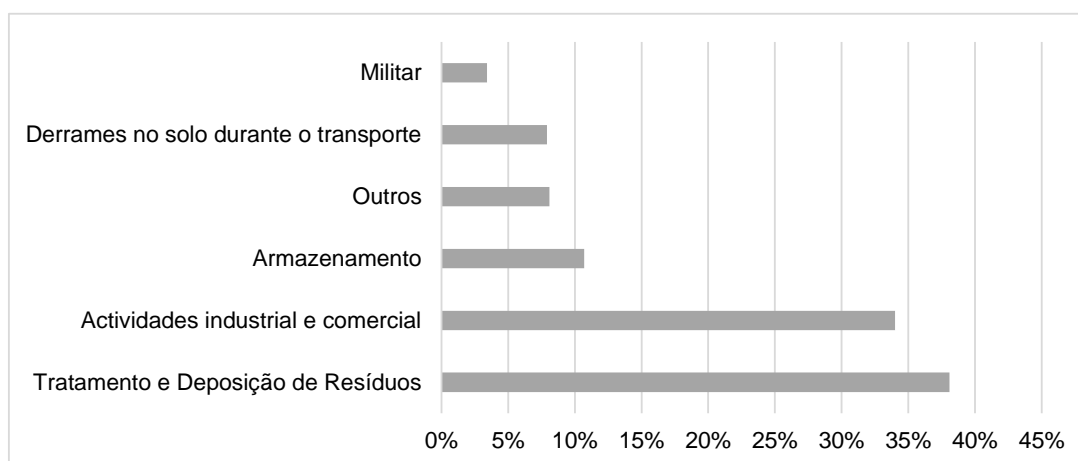


Figura 2.3. Principais atividades geradoras de contaminação do solo (AEA, 2012)

¹ 28 Estados-Membros da UE em conjunto com a Islândia, Liechtenstein, Noruega, Suíça e Turquia e 6 países que colaboram com o EEE (Albânia, Bósnia e Herzegovina, Montenegro, Sérvia, Kosovo e a anterior República Jugoslava da Macedónia)

A tendência será a diminuição da contaminação causada pelos vários sectores devido à aplicação da legislação em vigor, e a um maior rigor desta no que toca à prevenção da contaminação. Muitas indústrias têm vindo a modificar os seus processos de produção de modo a reduzir a quantidade produzida de resíduos. Porém a contaminação pode ocorrer devido a acidentes como derrames ou outros (JRC, 2012).

A disponibilidade e, conseqüentemente, a biodisponibilidade dos contaminantes e a exposição da população à contaminação, depende das características físico-químicas do mesmo (EP Solo e Sedimentos, 2012).

A AEA dividiu os contaminantes presentes em maior quantidade no solo em oito categorias (JRC, 2014):

- Hidrocarbonetos clorados (CHCLs);
- Óleos minerais;
- Hidrocarbonetos aromáticos policíclicos (PAHs);
- Metais pesados;
- Fenóis;
- Cianetos;
- Hidrocarbonetos aromáticos (BTEX: benzeno, tolueno, etilbenzeno e xilenos);
- Outros.

Segundo a *Joint Research Center* (2014) os contaminantes do solo distribuem-se como indicado na Figura 2.4.

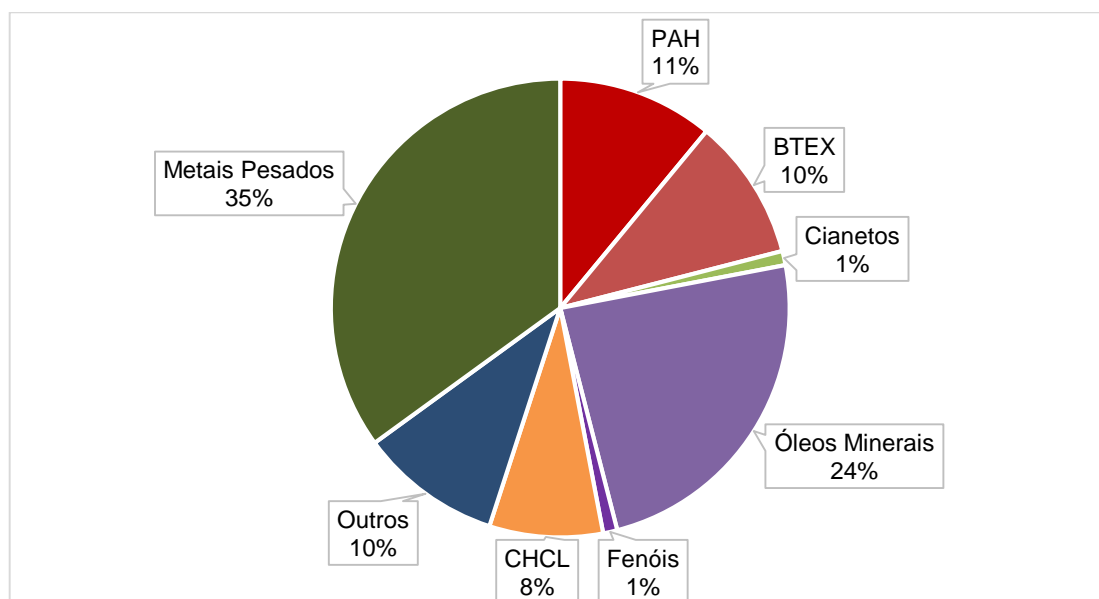


Figura 2.4. Principais contaminantes presentes no solo (Fonte: JRC, 2014)

Os principais contaminantes presentes nos solos europeus são os metais pesados e óleos minerais. Dependendo das suas propriedades, diferentes contaminantes provocam diferentes efeitos no ambiente e na saúde humana. Os efeitos de cada contaminante dependem do potencial de dispersão, solubilidade em água ou orgânicos, biodisponibilidade entre outros (Panagos *et al.*, 2013). Os efeitos adversos causados na saúde humana ou nos ecossistemas dependem do grau de toxicidade de um contaminante. A toxicidade de um contaminante é função da sua concentração no meio e do tempo de exposição do receptor ao contaminante.

Dependendo do período em que um receptor se encontra exposto a um contaminante, a toxicidade divide-se em crónica (longos períodos), subcrónica (períodos mais curtos do que na crónica) e aguda (curtos períodos) (Jorge, 2001).

A contaminação do solo é determinada com base em critérios de qualidade de solo definidos. A nível comunitário não existem limites estabelecidos para os contaminantes do solo. O estabelecimento de limites pode ser difícil dada a heterogeneidade das características do solo dos diferentes países europeus (Panagos *et al.*, 2013).

Portugal não possui nenhum inventário dos locais contaminados ou potencialmente contaminados nem legislação relativa à contaminação do solo. Quando se pretende proceder à avaliação de risco de locais contaminados ou potencialmente contaminados a Agência Portuguesa do Ambiente (APA) recomenda uma das seguintes orientações (EP Solo e Sedimentos, 2012):

- “*Canadian Environmental Quality Criteria for Contaminated Sites*” e “*Guidelines for Use at Contaminated Sites in Ontario*” (MME, 1997) de Ontário/Canadá, ou;
- “*Target values and Intervention Values for Soil Remediation*” da Holanda (2004).

No documento “*Guidelines for Use at Contaminated Sites in Ontario*” são apresentadas 3 abordagens (Tiers) possíveis para a avaliação da contaminação de um local (Silva, 2008):

- *Tier 1* - De referência: em que a recuperação do local contaminado é realizada de forma a atingir as condições naturais de referência, que se encontravam antes da contaminação.
- *Tier 2* - Genérica – em que a recuperação é realizada de forma a atingir valores estabelecidos, com base nos efeitos adversos na saúde humana e/ou ambiente, de concentração dos contaminantes.
- *Tier 3* - Avaliação de risco específica para o local – em que a recuperação é realizada após uma avaliação pormenorizada das características e condicionantes do local, de forma a se atingir concentrações de contaminantes estabelecidos.

Em Portugal a abordagem de referência (*Tier 1*) não deve ser utilizada visto os níveis de referência serem definidos para o solo canadiano. As abordagens genérica e de avaliação de risco específica para o local (*Tier 2* e *Tier 3* respectivamente) podem ser utilizadas para a avaliação da contaminação do solo nacional, sendo que a última abordagem é mais rigorosa (Silva, 2008).

As concentrações para os contaminantes do solo, bem como das condições padrão dos locais, estão compiladas nas tabelas do documento “*Soil, Ground Water and Sediment Standards for Use Under Part XV.1 of the Environmental Protection Act*” de 2011, atualizadas e revistas do documento de 2004 (ME, 2011).

Para a contaminação por hidrocarbonetos derivados do petróleo existem documentos específicos e a sua análise deve ser diferenciada da dos outros contaminantes. São diversos os fatores que condicionam a presença e o comportamento dos contaminantes no solo.

Fatores que influenciam os processos a que os contaminantes estão sujeitos no solo

No solo podem ocorrer variados processos biológicos (biodegradação, bioacumulação, etc) e físico-químicos (fotólise, hidrólise, diluição, dispersão, adsorção, etc) que influenciam a degradação dos contaminantes (Turbé *et al.*, 2010). Um contaminante no solo pode ser (Kostecki *et al.*, 2005):

- Adsorvido na matriz do solo (matéria orgânica, partículas de argilas);
- Volatilizado para a atmosfera ou para a fase gasosa do solo;
- Degradado por processos bióticos ou abióticos;
- Escoado sobre a superfície do solo;
- Retido nos poros ou espaços intersticiais;
- Dissolvido na solução do solo.

Existem vários fatores que influenciam o comportamento, transporte e destino dos contaminantes do solo. O conhecimento sobre a mobilidade de um contaminante em qualquer compartimento ambiental é essencial para a avaliação das vias de exposição de um receptor a um contaminante.

Características e propriedades do solo

➤ **Matéria Orgânica (M.O.)**

A MO resulta da decomposição de plantas e animais no solo e influencia as propriedades físico-químicas do solo e, por isto, o comportamento dos componentes e população microbiana deste.

A MO do solo afeta a adsorção dos compostos no meio, ao serem adsorvidos os compostos não serão facilmente volatilizados para a atmosfera ou transportados até às águas subterrâneas. As reacções e adsorção de metais e nutrientes no solo estão fortemente ligados ao teor e natureza da MO que o constitui.

A adsorção dos compostos à MO limita a biodisponibilidade destes, limitando também a sua biodegradação.

Os solos, geralmente, são constituídos por 5 a 12% de MO mas este teor depende do tipo de solos (Da Costa, 2011; Jorge, 2001 e Riser-Roberts, 1998).

➤ **Teor de oxigénio e Potencial Redox (E_h)**

A libertação de electrões de um composto e a aceitação destes por outro é designada como um processo de oxidação-redução. O composto que liberta electrões diz-se oxidado e o composto que recebe electrões diz-se reduzido. Durante este processo é libertada a energia necessária para os microrganismos.

O potencial redox (E_h) é uma medida da atividade dos electrões, análoga ao pH. Valores negativos de E_h representam condições anaeróbias enquanto valores positivos representam condições aeróbias ou moderadamente anaeróbias.

Em condições aeróbias o O_2 é o aceitador de electrões nas reacções de oxidação-redução, em anaerobiose são outros os compostos que actuam como aceitador de electrões (ICSCS, 2006 e Inglett *et al.*, 2005).

Ambientes em que o consumo de oxigénio ultrapassa o seu fornecimento são designados como ambientes anaeróbios. Compostos como os NO_3^- , Mn^{4+} , Fe^{3+} , SO_4^{2-} e CO_2 podem actuar como aceitadores de electrões em condições de défice de oxigénio.

O aceitador preferencial de electrões é o oxigénio seguido do nitrato, manganês, ferro e sulfatos, nesta ordem. Em ambientes desnitrificantes, os nitratos são os aceitadores de electrões.

A concentração de oxigénio no solo depende das condições de humidade, textura e porosidade do mesmo. O oxigénio move-se no solo essencialmente por difusão (Hartel, 2005; Inglett *et al.*, 2005 e Rolston, 2005).

As taxas de consumo de O₂ e produção de CO₂ estão directamente relacionadas com a atividade microbiana e com o crescimento de plantas. Geralmente o teor de oxigénio diminui em profundidade e o CO₂ aumenta. Em condições aeróbias as quantidades de oxigénio consumido e dióxido de carbono produzido são, geralmente, semelhantes. Em condições anaeróbias a produção de dióxido de carbono será mais elevada do que o consumo de oxigénio.

A degradação dos compostos é, geralmente, mais rápida em ambientes aeróbios pois a respiração aeróbia produz mais energia e os microrganismos aeróbios recuperam mais energia para a produção de biomassa (Hartel, 2005; ICSCS, 2006 e Rolston, 2005;).

As condições redox do solo permitem classificar os solos em diferentes tipos, como representado na Tabela 2.2.

Tabela 2.2. Caracterização dos solos através do seu Eh, a pH 7 (adaptado de Riser-Roberts, 1998)

Tipo de Solo	E_h (mV)
Oxidante (aeróbio)	>400
Moderadamente Reduzido	100 a 400
Reduzido	-100 a 100
Elevadamente Reduzido	-300 a -100

➤ **Textura**

A textura do solo é definida pelas proporções relativas de argila, silte (ou limo) e areia, partículas de diferentes diâmetros, que o constituem (Tabela 2.3). Os limites de variação destas proporções permitem a definição de classes de textura (Da Costa, 2011).

Tabela 2.3. Diâmetros das partículas que definem a textura do solo (adaptado de Costa, 2011)

Partícula	Diâmetro (mm)
Argila	<0,002
Silte	0,002-0,02
Areia	0,02-2

A textura do solo influencia o comportamento físico-químico do solo. A adsorção e troca catiónica num solo é grandemente influenciada pelo seu teor em argila. Solos com elevado teor de argila possuem uma maior capacidade de retenção de água, adsorção de compostos e troca catiónica, mas uma menor capacidade de reter aniões.

A argila é quimicamente ativa, ao contrário da areia que é praticamente inerte, e confere também poder tampão ao solo. Os solos arenosos possuem essencialmente macroporos (30-100 µm)

enquanto solos argilosos contêm microporos (<30 µm), daí os solos arenosos drenarem rapidamente, reterem muito pouca água e serem mais arejados ao contrário dos solos argilosos. Os microrganismos movem-se mais facilmente em solos arenosos devido aos seus macroporos (Da Costa, 2011 e Hartel, 2005).

Em solos muito permeáveis existe uma maior probabilidade de um contaminante atingir as águas subterrâneas, pois pode não haver tempo para ocorrer biodegradação significativa dos contaminantes antes de serem lixiviados (Vähöja *et al.*, 2005).

➤ **Condutividade eléctrica (CE)**

Este parâmetro está relacionado com a textura, capacidade de troca catiónica, teor MO e a salinidade do solo e é definido como a capacidade do solo transmitir corrente eléctrica. A CE da argila é elevada e da areia é baixa e a silte apresenta valores intermédios, ou seja, depende da dimensão das partículas do solo.

A CE de um solo é um indicador da sua salinidade. Um elevado teor de sais pode diminuir a velocidade dos processos de degradação de compostos (Grisso *et al.*, 2009 e ICSCS, 2006).

➤ **pH**

O pH varia entre 0 e 14, máxima acidez e máxima alcalinidade, correspondendo o valor 7 à condição neutra. Este parâmetro exprime a concentração de iões H⁺ numa solução e depende das condições de humidade do solo. A solubilidade e disponibilidade de muitos compostos do solo são afetadas pelo pH do mesmo.

O pH afeta a adsorção dos metais, catiónicos e aniónicos, a sua especiação e complexação com a MO. Ao afetar a biodisponibilidade de vários dos constituintes do solo, o pH influencia a atividade microbiana. O valor de pH ótimo para a atividade microbiana situa-se entre 6 e 8 (Akça *et al.*, 2005; Bolan *et al.*, 2005 e Jorge, 2001;).

A pH abaixo de 6, a nitrificação é reduzida e a amonificação aumenta, o que pode resultar na acumulação de amónia no solo. O decréscimo do pH depende do poder tampão do solo. A MO, os óxidos de ferro e alumínio e o CaCO₃ contribuem para o poder tampão do solo. As concentrações na solução do solo de ferro e alumínio são superiores em solos ácidos. Isto pode conduzir à adsorção/precipitação de fosfatos. Em meios ácidos a capacidade de troca catiónica diminui assim como a capacidade de retenção de nutrientes do solo. A mineralização da MO pode ser mais lenta em solos ácidos (Bolan *et al.*, 2005 e Hartel, 2005).

➤ **Humidade (%H)**

A água do solo permite transportar os nutrientes para as células dos microrganismos, sendo a sua presença essencial para a atividade microbiana. Para que haja arejamento suficiente não

pode existir excesso de humidade no solo, visto que esta ocupa os poros impedindo a circulação do ar (Da Costa, 2011; Inglett, 2005 e Jorge, 2001).

A %H do solo condiciona o E_h do mesmo, em solos saturados predominam condições anaeróbias porque a taxa de difusão do oxigénio é muito lenta. Em solos secos a velocidade das reações é muito baixa. O conteúdo em água ótimo para as reações de degradação é de aproximadamente 40 a 60% da capacidade máxima para a água do solo², que depende da textura e porosidade do solo (Hartel, 2005 e ISCSC, 2006).

➤ **Temperatura**

A temperatura do solo afeta a atividade microbiana, a evaporação e volatilização das substâncias e varia no tempo e espaço. A velocidade e os tipos de reações são afetadas pela temperatura. Baixas temperaturas diminuem a velocidade dos processos celulares e elevadas temperaturas podem desnaturar proteínas e alterar a permeabilidade das membranas celulares.

A temperatura mais favorável para a atividade microbiana ronda os 20°C, e dentro de uma gama específica a atividade microbiana duplica por cada 10°C de aumento de temperatura (Hartel, 2005; Hillel, 2005 e Jorge, 2001).

O aumento da temperatura diminui a solubilidade dos gases, particularmente em água, o que dificulta a difusão do oxigénio no solo. A volatilidade dos compostos aumenta com o aumento da temperatura, podendo contribuir para a diminuição da concentração de um contaminante no solo (Hartel, 2005 e ICSCS, 2006).

A temperatura altera os coeficientes de partição dos contaminantes, influenciando assim o seu comportamento no solo (Mackay *et al.*, 2006).

Atividade Microbiana

Os microrganismos do solo são fundamentais para a manutenção do equilíbrio e das funções do solo. Os microrganismos do solo são responsáveis por vários processos bioquímicos de degradação dos contaminantes do solo. A biodegradação pode ser definida como um conjunto de processos microbiológicos que conduzem à degradação ou alteração de compostos orgânicos presentes no meio.

A atividade microbiana é influenciada por todos os factores referidos anteriormente bem como pelo teor em nutrientes e pela natureza e concentração de compostos no solo.

Não basta um composto estar presente no solo para ser alvo de processos de biodegradação, o composto tem de estar biodisponível, ou seja, disponível para ser utilizado pelos microrganismos.

A biodisponibilidade de uma substância depende da sua mobilidade no meio e diminui com a diminuição da solubilidade do composto em água, aumento da capacidade de adsorção do

² Segundo Da Costa (2011), a capacidade máxima para a água é a percentagem máxima de água que um solo pode conter.

composto à matriz do solo, difusão através dos macroporos da matriz ou com o sequestro do composto em fases insolúveis e lipofílicas.

Os compostos que não se encontrem biodisponíveis não poderão ser biodegradados, tornando-se persistentes ou sendo apenas degradados por processos abióticos (Da Costa, 2011; ICSCS, 2006; Jorge, 2001 e Riser-Roberts, 1998).

Os microrganismos do solo incluem bactérias, vírus, fungos entre outros. As bactérias têm um papel fundamental na degradação de compostos presentes no solo e podem ser divididas quanto à fonte da qual obtêm a energia para sobreviver e quanto às condições de arejamento do meio em que habitam, entre outros.

Relativamente à fonte de energia que utilizam, as bactérias dividem-se em autótroficas e heterótroficas. As heterótroficas obtêm energia através da degradação de compostos ricos nesta, em reações de oxidação-redução.

Quanto às condições em que habitam, as bactérias dividem-se em aeróbias, facultativas e anaeróbias.

As bactérias aeróbias utilizam o oxigénio do ar e só sobrevivem em ambientes arejados, as anaeróbias sobrevivem em ambientes não arejados (por exemplo solos compactados ou saturados) e as facultativas sobrevivem em qualquer dos ambientes.

Consoante o teor de oxigénio no solo a decomposição dos compostos orgânicos pode ser aeróbia, elevado teor de oxigénio, facultativa ou anaeróbia.

Os produtos formados em cada condição são diferentes, em aerobiose forma-se essencialmente CO₂ e em anaerobiose CH₄. Resultam também da biodegradação dos compostos orgânicos água e minerais.

À total degradação dos compostos orgânicos, resultando compostos inorgânicos, sais minerais, água e CO₂ (aerobiose) ou CH₄ (anaerobiose), dá-se o nome de mineralização, esta só é obtida, na maioria dos casos, por processos bioquímicos (Da Costa, 2011; ICSCS, 2006 e Riser-Roberts, 1998).

A atividade microbiana é afetada pela temperatura, %H e arejamento do solo. A baixa temperatura a atividade diminui e o mesmo acontece para temperaturas superiores a 45°C. Em condições de humidade e arejamento a atividade microbiana é mais elevada. A biodegradação aeróbia é muito mais rápida do que a anaeróbia (Da Costa, 2011).

Durante a atividade microbiana, e independentemente do tipo de degradação que se processa, dá-se inicialmente uma fase designada por *lag phase* ou fase de adaptação. Nesta fase inicial os microrganismos apenas se adaptam ao meio, e esta pode durar entre horas a meses, independentemente do mecanismo de adaptação que ocorre (ICSCS, 2006).

Valores de pH extremos, elevadas concentrações de metais pesados e presença de compostos tóxicos podem inibir a biodegradação (Riser-Roberts, 1998).

A introdução no solo de compostos orgânicos, por exemplo como contaminantes, pode atuar como potenciador da atividade microbiana. Os contaminantes podem ser utilizados como substrato, ou seja como fonte de energia, ou como dadores de electrões que os microrganismos utilizam para obter energia (Rolston, 2005).

Os microrganismos mais aptos à degradação destes compostos adaptam-se e reproduzem-se no solo. Os microrganismos menos aptos podem ser reduzidos em número ou mesmo eliminados.

Os compostos podem ser degradados, modificando a sua estrutura ou diminuindo o seu tamanho, ou acumulados nos microrganismos do solo.

Os contaminantes podem também causar efeitos adversos na população microbiana do solo, originando toxicidade e bioacumulação nos microrganismos, que por sua vez podem afetar o seu metabolismo, desenvolvimento e crescimento. Os metabolitos ou produtos intermédios da degradação dos compostos pelos microrganismos do solo podem ser mais tóxicos do que os compostos iniciais (ICSCS, 2006; Jorge, 2001 e Turbé *et al.*, 2010).

A combinação de condições aeróbias, %H adequada e disponibilidade de nutrientes conduzem a uma atividade microbiana próxima do máximo. (Hartel, 2005).

1.2.1.2. Propriedades dos contaminantes

As propriedades físico – químicas dos contaminantes são determinantes para a previsão do seu comportamento e dos processos de atenuação natural a que estão sujeitos no solo.

Coefficiente de Partição Octanol/Água (K_{ow}) - É a razão entre a concentração de uma substância em octanol e a sua concentração numa fase aquosa num sistema bifásico de octanol-água em equilíbrio. Esta propriedade determina a distribuição de um composto entre as fases orgânica e aquosa, ou seja, dá-nos informação sobre a hidrofobicidade ou tendência de partição entre água e a matéria orgânica (ATDSR, 2005; Jorge, 2001 e TPHCWG, 1997).

Coefficiente de Adsorção ou coeficiente de partição carbono orgânico-água (K_{oc}) – É a razão entre a quantidade de uma substância adsorvida, por unidade de peso de carbono orgânico, no solo ou sedimentos (fase adsorvente) e a concentração dessa substância em solução. Compostos com baixa solubilidade em água possuem, geralmente, um valor de K_{oc} elevado, ou seja, uma maior tendência de adsorver ao solo sendo menos móveis (ATDSR, 2005; Gama *et al.*, 2012 e Riser-Roberts, 1998). Compostos com valores de Log K_{oc} superiores a 4,5 são fortemente adsorvidos no solo, enquanto compostos com valores de Log K_{oc} inferiores a 1,5 têm uma adsorção ao solo desprezável (Guerreiro, 2011).

Massa molar (M) - A massa molar de um composto condiciona os processos físico-químicos e biológicos a que este está sujeito. Quanto menor a massa molar maior a volatilidade, solubilidade em água e potencial de biodegradação e menor o coeficiente de partição octanol/água do composto (Jorge, 2001).

Solubilidade em água (S) – A solubilidade em água de um composto afeta o transporte e a distribuição deste no solo. Compostos com elevada solubilidade são mais móveis, mais facilmente transportados pela água (Jorge, 2001). A biodegradação de compostos de baixa solubilidade em água (por exemplo, alcanos de cadeias mais longas) é mais lenta, devido à sua menor biodisponibilidade (ICSCS, 2006). Compostos com valores de S superiores a 1000 ppm são compostos solúveis em água e com valores inferiores a 0,1 ppm são insolúveis (Guerreiro, 2011)

Pressão de vapor (P_v) – A pressão de vapor pode ser definida como a solubilidade de um composto no ar. A pressão de vapor de um composto influencia a taxa de volatilização de um composto e é fortemente influenciada pela temperatura (Jorge, 2001 e Mackay *et al.*, 2006). Compostos não voláteis possuem valores de P_v inferiores a 10^{-3} Pa e compostos voláteis possuem valores superiores a 10^{-1} Pa (Guerreiro, 2011).

Constante da Lei de Henry (H) – pode ser definida como um coeficiente de partição ar-água e pode ser medida como a razão da concentração de um composto no ar e a sua concentração na água, numa situação de equilíbrio. Pode ser utilizado para determinar a volatilidade de um composto (Gama *et al.*, 2012 e TPHCWG, 1997a). Um composto com elevados valores de H (superiores a 10^{-3} atm.m³/mol) e de pressão de vapor são facilmente transportados na fase gasosa. Compostos com baixos valores de H, inferiores a 10^{-7} atm.m³/mol, são compostos não voláteis (Guerreiro, 2011 e Mackay *et al.*, 2006).

O comportamento, transporte e destino de um contaminante depende das propriedades físico-químicas do mesmo e do solo, Figura 2.5. Compostos com elevado valor de K_{oc} são facilmente adsorvidos no solo limitando a sua mobilidade, pelo contrário baixos valores de K_{oc} aumentam a sua solubilidade em água. Compostos com P_v e H elevados são facilmente volatilizados para a atmosfera.

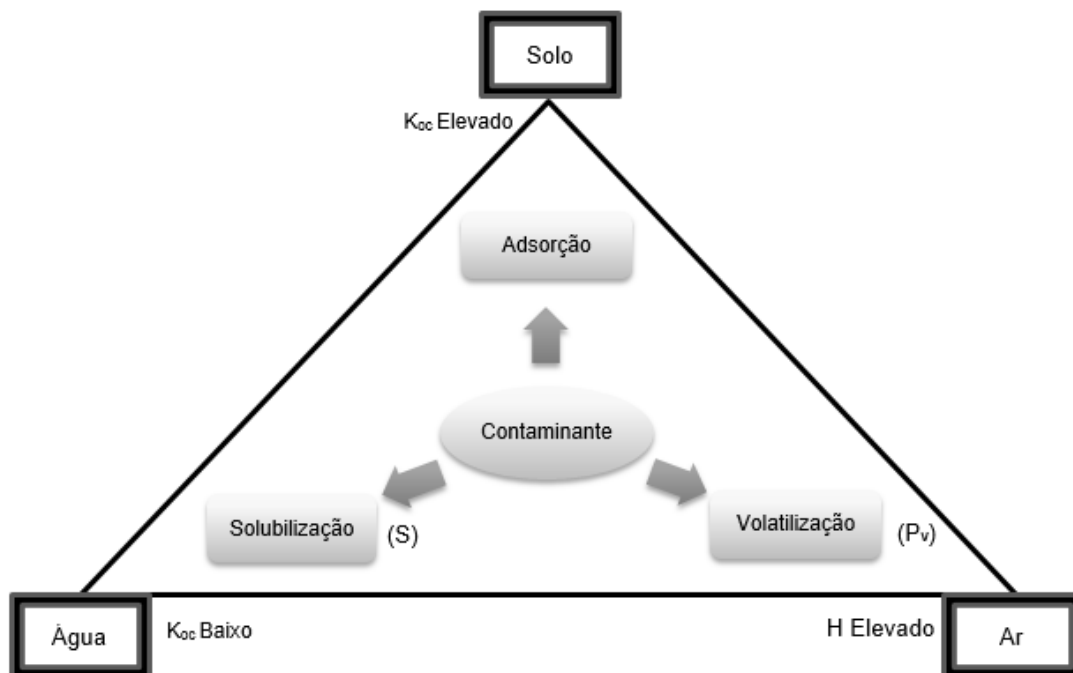


Figura 2.5. Influência de algumas propriedades de um contaminante no seu destino (adaptado de U.S. EPA, 2004b).

2.3 Contaminação por Hidrocarbonetos do Petróleo

A atividade industrial, militar e a produção e distribuição do petróleo e seus produtos originaram locais contaminados (solos e águas) por hidrocarbonetos de petróleo.

Os produtos do petróleo, nos quais se incluem a gasolina, o gasóleo, *jet fuel* ou lubrificantes, podem ser libertados para o ambiente acidentalmente durante as atividades de exploração e refinação da indústria petroquímica ou na armazenagem dos produtos (Silva, 2008 e TPHCWG, 1998).

O petróleo e os seus produtos são misturas complexas e variadas que contêm maioritariamente hidrocarbonetos e podem incluir quantidades menores de enxofre, azoto ou oxigénio e pequenas concentrações de metais.

A complexidade destas misturas aumenta com o número de carbonos que as constituem. A sua composição química varia ao longo do tempo e espaço desde a sua libertação no ambiente.

A identificação de todos os componentes que constituem o petróleo e os seus produtos é impossível, sendo geralmente caracterizados pelo seu ponto de ebulição e número de carbonos equivalente da sua estrutura.

Os hidrocarbonetos do petróleo, geralmente designados por *Total Petroleum Hydrocarbons* (TPH), são algumas vezes referidos como óleos minerais, hidrocarbonetos extraíveis e óleo e gordura, e são constituídos apenas por carbono e hidrogénio (Jorge, 2001 e TPHCWG, 1998).

Os TPH compreendem uma vasta gama de hidrocarbonetos, representada na Figura 2.6.



Figura 2.6. Constituintes dos produtos do petróleo (adaptado de TPHCWG, 1998)

Na determinação dos TPH, a utilização de um único método não permite a deteção de toda a gama de TPH. Estes hidrocarbonetos são definidos consoante o método analítico utilizado na sua determinação, dado que os TPH são uma medida da concentração de hidrocarbonetos extraídos ou detetados por um método (TPHCWG, 1998).

A designação de *Petroleum Hydrocarbons* (PHC) também é muito utilizada mas não deve ser confundida com TPH, visto que a última é associada especificamente a resultados analíticos e de amostragem (ATSDR n.d.).

Os solos contaminados por hidrocarbonetos derivados do petróleo representam um perigo tanto para a saúde pública como para os ecossistemas. Um dos principais perigos deve-se à presença de substâncias voláteis perigosas e que podem provocar efeitos adversos nos receptores, expostos a estas substâncias devido ao seu transporte e distribuição nos compartimentos ambientais.

Quando ocorre um derrame de gasolina, os contaminantes podem migrar para a atmosfera, por volatilização, ou para as águas subterrâneas. Devem ser avaliadas todas as vias de exposição

a estes contaminantes. Esta avaliação passa pela análise do transporte e destino destes compostos nos diferentes compartimentos ambientais (TPHCWG, 1997b).

Os compostos voláteis associados à gasolina, quando na fase gasosa, constituem um perigo para a saúde humana por serem altamente tóxicos podendo inclusive originar atmosferas explosivas quando em concentrações muito elevadas e locais fechados. A volatilização destes compostos contribui grandemente para a diminuição da sua concentração no solo, principalmente em climas ou estações com temperaturas mais elevadas (Jorge, 2001).

Na avaliação da contaminação por TPH devem ser utilizados sistemas que permitam a recolha e análise dos gases dos solos e deve-se ter em conta que muitos dos compostos voláteis são perdidos no processo de amostragem e antes da sua análise (Jorge, 2001).

As concentrações dos TPH, tanto no solo como em águas, para definir metas de remediação são uma abordagem comum na avaliação da contaminação e tecnologia a utilizar na remediação.

A avaliação de perigo para a saúde humana aconselhada pela *Total Petroleum Hydrocarbons Criteria Working Group* (TPHCWG) pode contemplar duas abordagens: utilização de informação de toxicidade para toda a mistura ou produto que lhe deu origem (gasolina, *diesel*, etc.) e utilização de um indicador substituto para avaliação do risco e toxicidade que a mistura pode originar (TPHCWG, 1997a).

Devido à complexidade da gasolina, a avaliação da contaminação por esta mistura pode centrar-se nos seus compostos mono-aromáticos e aromáticos policíclicos. Os hidrocarbonetos aromáticos monocíclicos são vulgarmente designados por compostos BTEX - benzeno, tolueno, etilbenzeno e xilenos - e os policíclicos por PAHs (*Polycyclic Aromatic Hydrocarbons*) (TPHCWG, 1997a).

A legislação aplicável à contaminação do solo é baseada nos limites máximos admissíveis no solo para cada um destes compostos. Na avaliação da contaminação do solo por TPHs estes são divididos em frações definidas pelas propriedades físico-químicas e pelo número equivalente de carbonos (EC)³ de cada composto. Na Tabela 2.4 estão representadas a divisão, em frações, dos TPHs (ATSDR, n.d; Jorge, 2001; Pinedo *et al.*, 2013 e TPHCWG, 1997a).

Tabela 2.4. Frações dos TPH (adaptado de ATSDR, n.d.)

Fração (em EC)	Compostos representativos
Aromáticos	
EC ₆ – EC ₉	BTEX
EC _{>9} – EC ₁₆	Naftaleno
EC _{>16} – EC ₃₅	Fluoreno, benzo(a)pireno
Alifáticos	
EC ₆ – EC ₉	n-Hexano
EC _{>9} – EC ₁₆	Querosene
EC _{>16} – EC ₃₅	Óleos minerais

³ O número equivalente de carbonos é baseado nos tempos de retenção equivalentes numa coluna de cromatografia gasosa de ponto de ebulição normalizada para n-alcanos (ATSDR, n.d.)

Hidrocarbonetos aromáticos

Os hidrocarbonetos aromáticos são contaminantes comuns em locais contaminados por petróleo ou seus produtos. A unidade estrutural destes compostos é o benzeno.

Quando um ou mais dos hidrogénios do anel é substituído por cadeias laterais formam-se alquil-benzenos (por exemplo o tolueno, etilbenzeno e xilenos).

A fusão de anéis benzeno origina compostos designados por hidrocarbonetos aromáticos policíclicos (PAHs) (Jorge, 2001).

PAH

Os hidrocarbonetos aromáticos policíclicos (PAH) estão presentes na gasolina, em menor concentração do que os BTEX. São hidrocarbonetos com dois ou mais anéis aromáticos que incluem o naftaleno e alquil-naftalenos.

Os PAH são reconhecidos por serem compostos tóxicos, móveis e persistentes no meio. São formados na decomposição térmica de moléculas orgânicas e subsequente recombinação das mesmas. Podem ter origem em processos naturais, como fogos florestais, erupções vulcânicas, ou antropogénicos, como queima de combustíveis fósseis, carvão, madeira, resíduos, derrames de petróleo entre outros.

A presença destes compostos no solo é devida a deposição atmosférica, após o seu transporte a partir da origem, nos casos em que o solo não se encontra localizado perto de alguma atividade industrial ou vias rodoviárias.

São compostos de baixa solubilidade em água, baixas pressões de vapor, elevados pontos de fusão e ebulição e, na sua maioria, tóxicos. Estas propriedades fazem com que os PAHs tenham tendência a acumular-se no solo (ATSDR, 1995)

No ambiente estes compostos podem sofrer volatilização, oxidação, fotólise, lixiviação, adsorção às partículas do solo ou biodegradação, sendo este processo o principal processo de degradação dos PAH.

Os PAH possuem características mutagénicas, tóxicas e cancerígenas, são resistentes à biodegradação e têm potencial para a bioacumulação (ATSDR, 1995; Gama *et al.*, 2012; Haritash e Kaushik, 2009 e Zhang *et al.*, 2006).

No solo, os PAHs, tendem a estar adsorvidos nas partículas. No ar os PAH podem ser degradados por fotólise ou outros compostos presentes, em dias ou meses, ou depositados no solo ou água. Nestes compartimentos podem demorar semanas a meses a serem degradados (ATSDR, 1995).

A *United States Environmental Protection Agency* (U.S. EPA) analisa 16 dos PAH totais, representados na Figura 2.7, na avaliação da contaminação de um local.

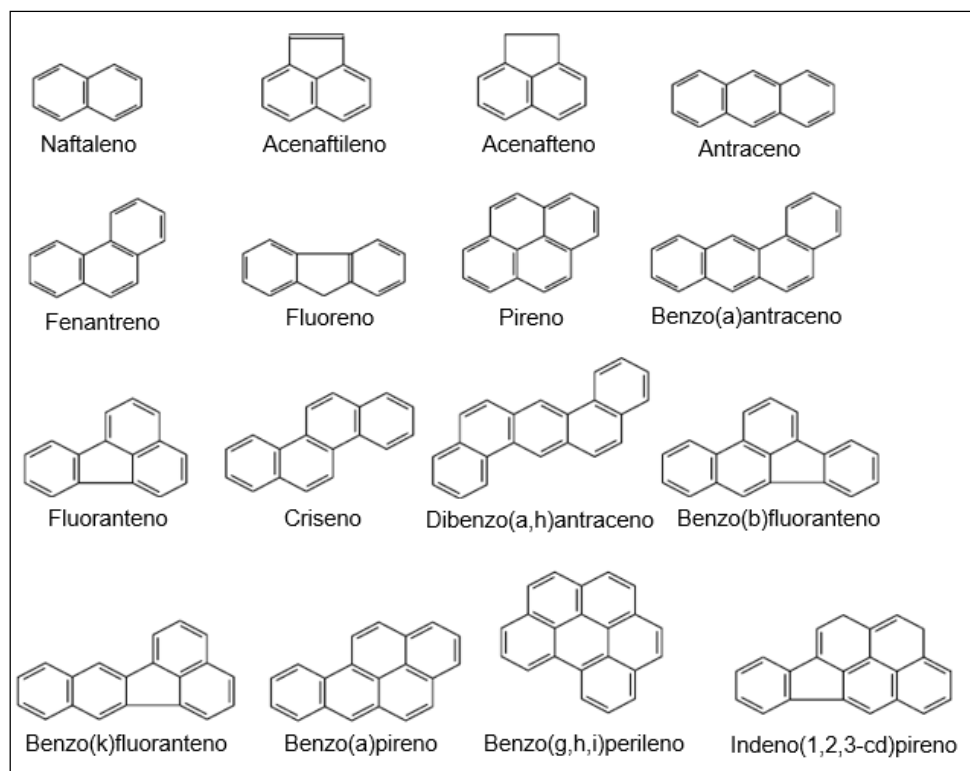


Figura 2.7. Estruturas dos 16 PAH da U.S. EPA (adaptado de ICSCS, 2006)

À medida que a massa molecular de um composto aumenta, a sua solubilidade em água e pressão de vapor diminuem e os pontos de ebulição e fusão aumentam bem como a tendência para serem adsorvidos nas partículas do solo (ICSCS, 2006).

A biodegradação de PAH pode ocorrer em aerobiose ou anaerobiose, sendo muito mais rápida na primeira. No solo, na maioria dos casos, estão ausentes microrganismos aptos para a biodegradação dos PAH, o que os torna compostos persistentes. Para PAH com 5 ou mais anéis aromáticos, a biodegradabilidade, tanto aeróbia e anaeróbia, é menor e mais lenta, visto que a sua biodisponibilidade é mais baixa (Zhang *et al.*, 2006).

Pode assumir-se que a biodegradação dos PAH no solo pode ser atingida se se verificarem os seguintes requisitos (ICSCS, 2006):

- Contaminação de PAH moderada;
- Baixo conteúdo de carbono orgânico;
- Composição da contaminação preferencialmente por PAH de baixa massa molecular;
- Baixa concentração de outros contaminantes.

Naftaleno

O naftaleno, também designado por naftalina, é um sólido branco que evapora facilmente. É um dos constituintes do petróleo e do carvão.

O naftaleno pode ser lixiviado para as águas subterrâneas visto que adsorve fracamente às partículas do solo, principalmente em solos arenosos.

Próximo da superfície do solo ou da água, o naftaleno volatiliza facilmente. O seu tempo de meia-vida⁴ no solo e águas é relativamente curto, dada a sua tendência para volatilizar ou ser biodegradado (ATSDR, 2005).

Os PAHs com menor massa molecular apresentam maior solubilidade em água e volatilidade, assim sendo, o naftaleno, o mais leve dos PAH, tende a ser mais móvel e estar mais biodisponível no meio. O naftaleno é utilizado como modelo para estudar e entender as propriedades e comportamentos dos vários PAH.

Estas características fazem com que o naftaleno seja o PAH mais facilmente biodegradado ou mesmo reduzido na sua concentração através de volatilização.

Quanto maior o número de anéis benzênicos na sua estrutura, maior será a sua tendência para adsorção às partículas do solo e menor será a sua biodisponibilidade, sendo a sua biodegradação mais lenta (CCME, 2010 e Johnsen *et al.*, 2005).

Na Tabela 2.5 estão representadas algumas das propriedades físico-químicas do naftaleno.

Tabela 2.5. Propriedades físico-químicas do naftaleno

Característica	Fonte	
CAS ⁵	91-20-3	
Fórmula Química	C ₁₀ H ₈	
Massa molecular (g/mol)	128,171	Mackay <i>et al.</i> , 2006
Solubilidade (mg/L) a 25°C	31,5	Mackay <i>et al.</i> , 2006
Pressão de Vapor (mm Hg) a 25°C	8,5×10 ⁻²	CCME, 2010
Constante da lei de Henry (atm.m ³ .mol ⁻¹) a 25°C	4,83×10 ⁻⁴	CCME, 2010
log K _{ow} a 25°C	3,37	Mackay <i>et al.</i> , 2006
log K _{oc} a 25°C	3,11	Mackay <i>et al.</i> , 2006
Ponto de ebulição (°C)	217,9	Mackay <i>et al.</i> , 2006
Ponto de fusão (°C)	80,26	Mackay <i>et al.</i> , 2006

⁴ O tempo de meia-vida é uma medida do tempo necessário para reduzir a quantidade de uma substância presente num meio para metade (ATSDR, 2005).

⁵ Chemical Abstracts Service Number

3. Remediação de Solos

Têm sido utilizados vários processos baseados em processos biológicos, físico-químicos e térmicos para a reabilitação de locais contaminados. Para seleccionar a tecnologia mais adequada para a remediação de um local é necessário proceder à avaliação da contaminação e classificação do solo em termos geotécnicos, hidrogeológicos e físico-químicos (Jorge, 2001).

A remediação dos solos tem como objectivo a imobilização, eliminação, redução da toxicidade, extração, ou redução da concentração, até valores abaixo dos limites máximos admissíveis, de contaminantes no meio. A técnica de remediação mais utilizada na União Europeia tem sido a escavação do solo contaminado e posterior deposição como enchimento (“*dig and dump*”) (AEA, 2014).

Os tratamentos de remediação podem ser classificados de acordo com o local onde o solo é tratado e/ou com o tipo de tratamento. De acordo com o local onde o solo é tratado, as tecnologias são classificadas como:

- *In-situ* – o solo é tratado no próprio local sem necessitar de escavação do mesmo;
- *Ex-situ* - o solo é escavado e tratado no local (*on-site*) e/ou transportado para posterior tratamento (*off-site*).

As tecnologias podem ainda ser biológicas ou físico-químicas. Na Figura 3.1 estão representadas algumas tecnologias de remediação de solos.

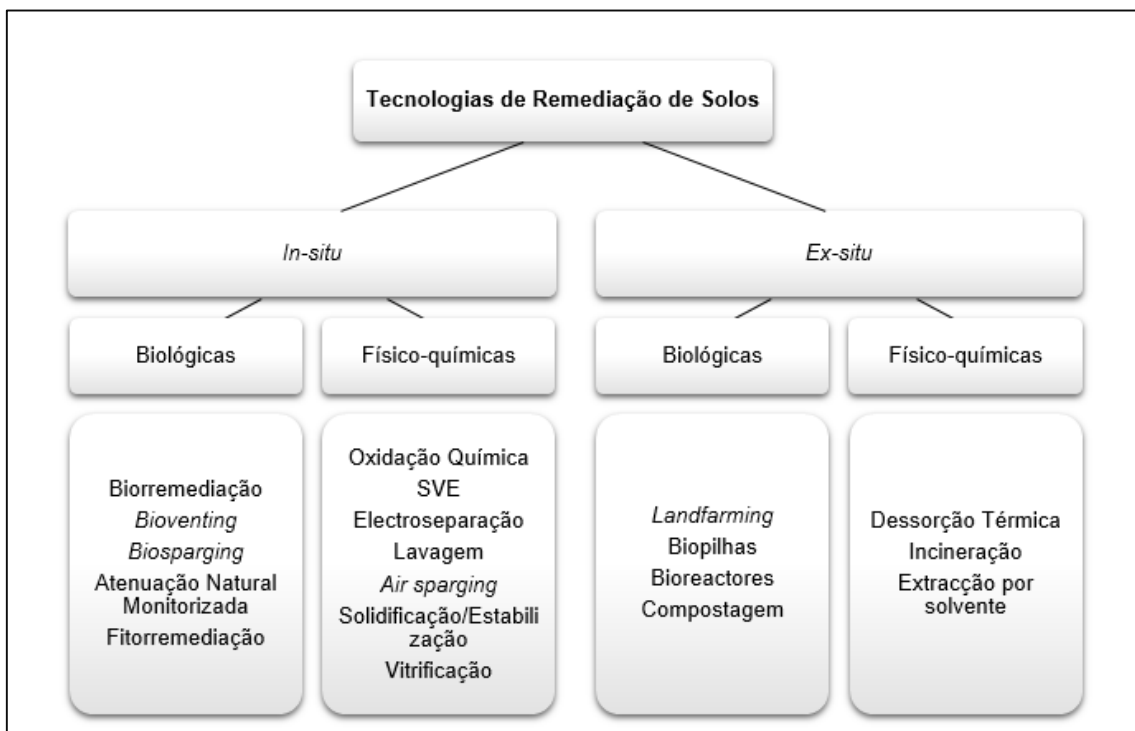


Figura 3.1. Tecnologias de remediação de solos (adaptado de Khan et., 2004 e Riser-Roberts, 1998)

Existem várias tecnologias para a remediação de solos contaminados por TPH, a escolha da tecnologia mais apropriada depende das características do local e da natureza dos TPH. Na avaliação das tecnologias aplicáveis deve-se ter em consideração os custos, a duração do tratamento e os requisitos das concentrações a atingir (Riser-Roberts, 1998).

Nos sub-capítulos seguintes serão apresentadas algumas das tecnologias mais utilizadas na remediação de solos contaminados por TPH.

3.1 *In-situ*

A remediação *in-situ* permite que o solo seja tratado no local sem que haja escavação e transporte do mesmo para posterior tratamento. As vantagens são tanto económicas, a nível dos custos da escavação e transporte do solo, como ambientais visto que, ao não necessitar de transporte, traduz-se na redução das emissões de gases de efeito estufa e na redução do risco de contaminação de outros componentes ambientais durante o transporte (Riser-Roberts, 1998).

3.1.1. Extração de vapor do solo (“*Soil Vapor Extraction- SVE*”)

Esta tecnologia consiste na aplicação de vácuo ao solo através de poços de extração, na zona não saturada, de forma a induzir um gradiente de pressão/concentração no local contaminado. Este gradiente permite a evaporação dos compostos voláteis e alguns semi-voláteis presentes e a sua extração através de poços.

Os gases extraídos são tratados à superfície de forma a destruir ou recuperar os compostos, antes de serem libertados para a atmosfera. O SVE estimula também a biodegradação dos compostos, particularmente compostos menos voláteis.

Em solos mais homogéneos e permeáveis o SVE obtém maiores eficiências de remoção (U.S. EPA, 1994e).

O SVE é utilizado para a remoção de produtos do petróleo mais leves e voláteis, como a gasolina. Os compostos mais pesados como o *diesel*, são removidos mais lentamente.

Não deve ser utilizado para a remoção de metais, PCB, óleos pesados nem dioxinas. As principais vantagens e desvantagens desta tecnologia estão representadas na Tabela 3.1.

Tabela 3.1. Principais vantagens e desvantagens do SVE (FRTR, n.d.-f e U.S. EPA, 1994e)

Vantagens	Desvantagens
Não causa perturbação significativa do local	Aplicabilidade limitada a compostos voláteis e a locais com lençol freático a grande profundidade
Trata grandes volumes de solo por baixo custo	Dificuldade em atingir reduções de concentração superiores a 90%
Curta duração de tratamento (poucos meses a 2 anos) em condições ótimas	Redução da eficiência em solos com elevado teor de humidade (permeabilidade reduzida)
Equipamento fácil de instalar	Pode necessitar de tratamentos dispendiosos dos gases extraídos
Facilmente combinada com outras tecnologias de remediação	Aplicável somente a solos não saturados

3.1.2. Biorremediação

A biorremediação in-situ pode ser estimulada ou aumentada. A biorremediação estimulada tem como objetivo acelerar os processos biológicos naturais do solo. Dentro das tecnologias de biorremediação estimulada podem incluir-se o *biosparging* e o *bioventing*. O *biosparging* é utilizado para o tratamento da zona saturada e o *bioventing* para a zona não saturada do solo. A maioria das tecnologias de biorremediação estimulada são aplicadas no tratamento de solos contaminados por hidrocarbonetos do petróleo, de baixo a elevado peso molecular (Riser-Roberts, 1998; U. S. EPA, 1994b e U.S. EPA, 2004).

A biorremediação aumentada consiste em aumentar o número de microrganismos presentes no solo ou adicionar microrganismos específicos, mais aptos à degradação dos contaminantes presentes no solo. Os microrganismos endógenos podem não ter a capacidade de degradar certos compostos ou classes de compostos ou não estarem presentes em quantidade suficiente no meio. Os microrganismos adicionados podem demorar longos períodos de tempo na sua adaptação ao habitat, visto não serem microrganismos endógenos (Riser-Roberts, 1998).

➤ **Bioventing**

Este tratamento consiste na introdução de oxigénio nas zonas não saturadas do solo, através do movimento forçado do ar, de forma a aumentar a concentração de oxigénio nestas zonas. O arejamento é realizado apenas na zona não saturada do solo. Este aumento da concentração de oxigénio permite criar as condições favoráveis para a biodegradação aeróbia dos contaminantes orgânicos pelos microrganismos endógenos do solo (FRTR, n.d.-c e U.S. EPA, 1994b).

O ar é introduzido no solo através de poços horizontais ou verticais de injeção ou de extração, sendo a utilização dos últimos um processo similar à SVE. Enquanto a tecnologia de SVE promove a volatilização dos contaminantes, o *bioventing* promove a biodegradação aeróbia dos mesmos. Todos os compostos biodegradáveis em condições aeróbias podem ser removidos ou degradados por *bioventing*. É uma tecnologia que provou ser eficaz na remediação de solos contaminados por produtos do petróleo, solventes não clorados e outros contaminantes orgânicos (FRTR, n.d.-c e U.S. EPA, 1994b).

As principais vantagens e desvantagens da aplicação do *Bioventing* estão representadas na Tabela 3.2.

Tabela 3.2. Principais vantagens e desvantagens do Bioventing (FRTR, n.d.-c e U.S. EPA, 1994b)

Vantagens	Desvantagens
Equipamento fácil de instalar	Permite a introdução de nutrientes nos poços de injeção
Curta duração de tratamento (6 meses a 2 anos) com condições ótimas	Possibilidade de aumentar a concentração dos contaminantes para níveis tóxicos
Facilmente combinada com outras tecnologias de remediação	Nem sempre atinge baixos níveis de concentração
Não causa perturbação significativa do local	Apenas pode ser aplicada em zonas não saturadas

➤ **Biosparging**

Esta tecnologia utiliza os microrganismos endógenos do solo para a biodegradação de compostos orgânicos na zona saturada. Nesta zona é injetado ar ou oxigénio, e se necessário são injetados nutrientes, através de poços com o objetivo de estimular a atividade microbiana (U.S. EPA 1994c). É uma tecnologia semelhante ao *bioventing* mas aplicável às zonas saturadas e não saturadas do solo. As vantagens e desvantagens são semelhantes às do *bioventing*.

3.1.3. Oxidação Química

Esta tecnologia físico-química consiste na aplicação de um oxidante químico para oxidar os contaminantes do solo. A oxidação química permite transformar contaminantes perigosos em compostos não perigosos ou de menor toxicidade. Os compostos finais são menos móveis, estáveis e podem ser inertes.

Os oxidantes mais utilizados são o ozono, peróxido de hidrogénio (na presença de férrico forma o reagente de *Fenton*) e permanganato. Alguns oxidantes conseguem degradar completamente alguns compostos orgânicos tóxicos em tempos muito curtos. Esta tecnologia pode ser utilizada para auxiliar um subseqüente processo de biorremediação.

A eficiência da aplicação desta técnica depende das propriedades físico-químicas dos contaminantes alvo e das características do solo (FRTR, n.d.-e e U.S. EPA, 2004a).

A oxidação química pode degradar a contaminação por produtos de petróleo, oxidando os compostos orgânicos transformando-os em CO₂ e água (U.S. EPA, 2004a).

As principais vantagens e desvantagens da aplicação da oxidação química estão representadas na Tabela 3.3.

Tabela 3.3. Principais vantagens e desvantagens da Oxidação Química (FRTR, n.d.-e e U.S. EPA, 2004a)

Vantagens	Desvantagens
Muito curta duração de tratamento (semanas a meses)	Manuseamento de grandes quantidades de oxidantes químicos perigosos
Não produz quantidades significativas de resíduos (excepto <i>Fenton</i>)	Alguns contaminantes são resistentes à oxidação
Baixos custos de operação e monitorização	Elevados custos iniciais
Não causa perturbação significativa do local	Pode haver perdas de oxidante ao reagir com outras substâncias presentes no solo em vez dos contaminantes

3.1.4. Atenuação Natural Monitorizada (ANM)

A atenuação natural é obtida através de processos naturais biológicos e abióticos que reduzem a concentração, a toxicidade, a mobilidade ou eliminam os contaminantes presentes no solo ou nas águas subterrâneas. Os processos abióticos compreendem a adsorção a partículas de argila ou à MO, a volatilização, fotólise, lixiviação, diluição dos compostos presentes no solo.

A monitorização a longo termo destes processos e das concentrações e distribuição dos contaminantes, é imprescindível à prossecução dos objetivos de remediação e prevenção de riscos para os ecossistemas e para a saúde humana.

A ANM pode durar longos períodos de tempo e depende fortemente das características geológicas, hidrológicas e microbiológicas do local. O local a tratar deve ser avaliado exaustivamente e devem ser identificados todos os potenciais receptores. A ANM é utilizada em muitos casos de contaminação por combustíveis.

Os processos abióticos não conseguem a mineralização da maioria dos compostos presentes no solo, são no entanto importantes processos que complementam ou auxiliam a biodegração.

Na Tabela 3.4 estão enumeradas as principais das vantagens e desvantagens da aplicação desta tecnologia (Guerreiro, 2011; Mulligan e Yong, 2003 e Riser-Roberts, 1998).

Tabela 3.4. Principais vantagens e desvantagens da ANM (U.S. EPA, 2004b)

Vantagens	Desvantagens
Pode reduzir os custos de remediação	Longa duração de tratamento comparada com outras tecnologias
A perturbação do local é mínima	Necessidade de monitorização
Aplicável a locais que não podem ser perturbados	Os subprodutos formados podem ser mais perigosos do que os produtos que lhes deram origem
Não gera resíduos	Pode ocorrer a dessorção ou ressolubilização dos contaminantes
A biodegradação pode resultar na eliminação completa dos contaminantes	Necessita de uma avaliação mais rigorosa, e mais dispendiosa, do local e contaminantes
Pode ser utilizada em conjunto com outras tecnologias de remediação como pré ou pós tratamento	Pode necessitar de medidas de contingência

3.2. Ex-situ

O solo tratado *ex-situ* pode ser posteriormente devolvido ao local de origem (Riser-Roberts, 1998).

3.2.1. Dessorção Térmica

Esta técnica consiste no aquecimento do solo a temperaturas entre os 100-600°C, previamente escavado do local de origem. O aquecimento é realizado de forma a aumentar a pressão de vapor dos contaminantes para os transferir da matriz do solo para a fase gasosa.

A dessorção térmica permite remover contaminantes orgânicos oxidáveis e com baixos pontos de ebulição. Ao contrário da incineração, que destrói os compostos orgânicos, a dessorção térmica permite modificar a forma dos contaminantes de modo a facilitar a sua remoção e tratamento.

A dessorção térmica é realizada numa câmara onde os contaminantes são vaporizados sendo posteriormente extraídos por um sistema de vácuo ou por um gás de arraste para um sistema de tratamento.

A temperatura utilizada no processo permite dividir a tecnologia em dessorção térmica de elevada temperatura (320 a 560 °C), utilizada na remoção de COVs, e de baixa temperatura (90 a 320 °C), utilizada para PAHs, PCBs e pesticidas.

Esta tecnologia é adequada para o tratamento de hidrocarbonetos, mas não é apropriada para a remoção da maioria dos metais. As principais vantagens e desvantagens desta tecnologia estão representadas na Tabela 3.5 (Khan et al., 2004 e Riser-Roberts, 1998).

Tabela 3.5. Vantagens e desvantagens da Dessorção Térmica (Khan et al., 2004; U.S. EPA, 1994g)

Vantagens	Desvantagens
A eficiência pode ser superior a 99%	Não é apropriada para todos os tipos de solo (elevado teor de silte e/ou argila diminuem a eficiência do processo)
O solo tratado pode ser recolocado no local de origem ou utilizado como enchimento	Baixa eficiência quando aplicada a solos com elevado teor de humidade
Tratamento muito rápido	Tecnologia desadequada para a remoção de metais
Económicamente competitiva para elevados volumes de solo	Requer a escavação do solo a tratar
Facilmente combinada com outras tecnologias de remediação	Custos associados ao transporte do solo para tratamento

3.2.2 Landfarming

O *Landfarming* consiste no espalhamento do solo escavado numa camada fina à superfície e na estimulação da biodegradação aeróbia através do arejamento e/ou adição de nutrientes, sais minerais e humidade.

O arejamento é realizado através do revolvimento periódico do solo. O local onde é efectuado deve ser impermeabilizado para impedir a lixiviação dos contaminantes.

Esta tecnologia é utilizada, com elevada eficiência, no tratamento de solos contaminados com produtos do petróleo. A estimulação da atividade microbiana promove a degradação dos constituintes dos produtos do petróleo adsorvidos no solo.

Os constituintes mais leves, mais voláteis, são removidos em grande extensão durante o processo de arejamento. Os constituintes mais pesados, que não volatilizam durante o arejamento, são biodegradados.

Dependendo do seu peso a biodegradação pode ser mais morosa para compostos muito pesados como os constituintes do *diesel* ou lubrificantes. Os COV removidos poderão ter de ser captados e tratados (FRTR, n.d.-a e U.S. EPA, 1994d). Na Tabela 3.6 estão representadas as principais vantagens e desvantagens da aplicação desta tecnologia.

Tabela 3.6. Principais vantagens e desvantagens da aplicação do Landfarming (U.S. EPA, 1994d)

Vantagens	Desvantagens
Simple de conceber e implementar	Dificuldade em atingir redução de concentração > 95% ou concentrações < 0,1 ppm
Curta duração de tratamento (6 meses a 2 anos em condições ótimas)	Pode necessitar de grandes áreas para a instalação e operação
Custos de instalação, operação e manutenção relativamente baixos comparativamente a outras tecnologias de remediação	Pode não ser eficiente para concentrações elevadas de contaminantes
Eficaz para compostos orgânicos com taxas de degradação baixas	Sensibilidade à presença de elevadas concentrações de metais (podem inibir a atividade microbiana)
	Os compostos mais voláteis tendem a volatilizar em vez de serem biodegradados

3.2.3. Biopilhas

As biopilhas consistem no empilhamento do solo contaminado com produtos de petróleo em pilhas em que é estimulada a biodegradação através de arejamento e/ou adição de nutrientes, sais minerais e humidade.

As biopilhas são cobertas com uma tela impermeável, de forma a evitar a saída de lixiviados, volatilização de compostos voláteis e promover o aquecimento resultante da luz solar, e possuem um sistema de arejamento e de recolha de lixiviados.

Esta tecnologia é similar ao *Landfarming*, mas enquanto a última utiliza o revolvimento do solo como processo de arejamento, as biopilhas possuem um sistema de arejamento que força o movimento do ar através da injeção ou extração deste.

O arejamento forçado é realizado por um sistema de canalizações perfuradas distribuído pelas biopilhas ou por baixo delas.

Os COV emitidos podem necessitar de tratamento antes de serem libertados para a atmosfera. A biodegradação, como no caso do *Landfarming*, é mais rápida para os compostos mais leves dos produtos do petróleo e mais lenta para os mais pesados.

É uma tecnologia utilizada no tratamento de solos contaminados por produtos do petróleo, COSV, pesticidas, COV halogenados e não halogenados (FRTR, n.d.-d; U.S. EPA, 1994f). Na Tabela 3.7 estão representadas as principais vantagens e desvantagens da aplicação desta tecnologia.

Tabela 3.7. Principais vantagens e desvantagens das biopilhas (U.S. EPA, 1994f)

Vantagens	Desvantagens
Simple de conceber e implementar	Dificuldade em atingir redução de concentração > 95% ou concentrações < 0,1 ppm
Curta duração de tratamento (6 meses a 2 anos em condições ótimas)	Pode necessitar de grandes áreas para a instalação e operação (menores do que no <i>Landfarming</i>)
Custos de instalação, operação e manutenção relativamente baixos comparativamente a outras tecnologias de remediação	Pode não ser eficiente para concentrações elevadas de contaminantes
Eficaz para compostos orgânicos com taxas de degradação baixas	Sensibilidade à presença de elevadas concentrações de metais (podem inibir a atividade microbiana)
Os COV emitidos podem ser controlados se o sistema for coberto	Os compostos mais voláteis tendem a volatilizar em vez de serem biodegradados

4. Caso de Estudo

Um dos domínios de intervenção definidos no “Eixo Prioritário III – Prevenção, Gestão e Monitorização de Riscos Naturais e Tecnológicos” do Programa de Ordenamento e Valorização do Território (POVT), do Quadro de Referência Estratégico Nacional 2007-2013 (QREN) é a “Recuperação do Passivo Ambiental”.

Neste domínio pretende-se atuar na valorização ambiental e socioeconómica do território e na prevenção de riscos. Um dos sítios contaminados que constitui passivo ambiental de intervenção nacional prioritária são as bacias de lamas oleosas do aterro de Santo André (EP Solo e Sedimentos, 2012).

3.1 RESIM

Em Dezembro de 2001 foi celebrado o Contrato de Concessão, em regime de exclusividade, entre a empresa Águas de Santo André, S.A. (AdSA), do Grupo Águas de Portugal, e o Estado Português para a concessão da gestão e exploração do Sistema de Santo André.

A AdSA ficou assim responsável pelo abastecimento de água às populações da área abrangida, recolha, tratamento e rejeição de efluentes e pelo Subsistema de Resíduos Industriais (RI) da área de concessão.

Este Subsistema é constituído pelo RESIM – Gestão de Resíduos Industriais de Santo André, S.A., que recebe os resíduos industriais das indústrias situadas na Zona Industrial e Logística de Sines (ZILS), da área geográfica de Sines e de Santiago do Cacém e da Estação de Tratamento de Águas Residuais (ETAR) de Ribeira dos Moinhos.

O RESIM localiza-se a sul da cidade de Vila Nova de Santo André no concelho de Santiago do Cacém, distrito de Setúbal. No seu espaço físico, com uma área aproximada de 59 hectares, contempla várias infra-estruturas para a gestão e destino final dos resíduos recebidos, entre elas o Aterro de Santo André. O aterro é constituído por:

- 12 Bacias de deposição de lamas oleosas;
- 1 Célula de confinamento técnico de resíduos sólidos industriais (RSI) – encerrada e requalificada;
- 1 Célula de confinamento de resíduos sólidos urbanos (RSU) – encerrada e requalificada;
- 2 Células de deposição de resíduos não perigosos (RNP) – encerradas e requalificadas.

O RESIM dispõe ainda de um campo de piezómetros, para monitorização das águas subterrâneas, e de um sistema de recolha de lixiviados. Na Figura 4.1 encontra-se a localização do RESIM, e neste, das bacias de lamas oleosas.

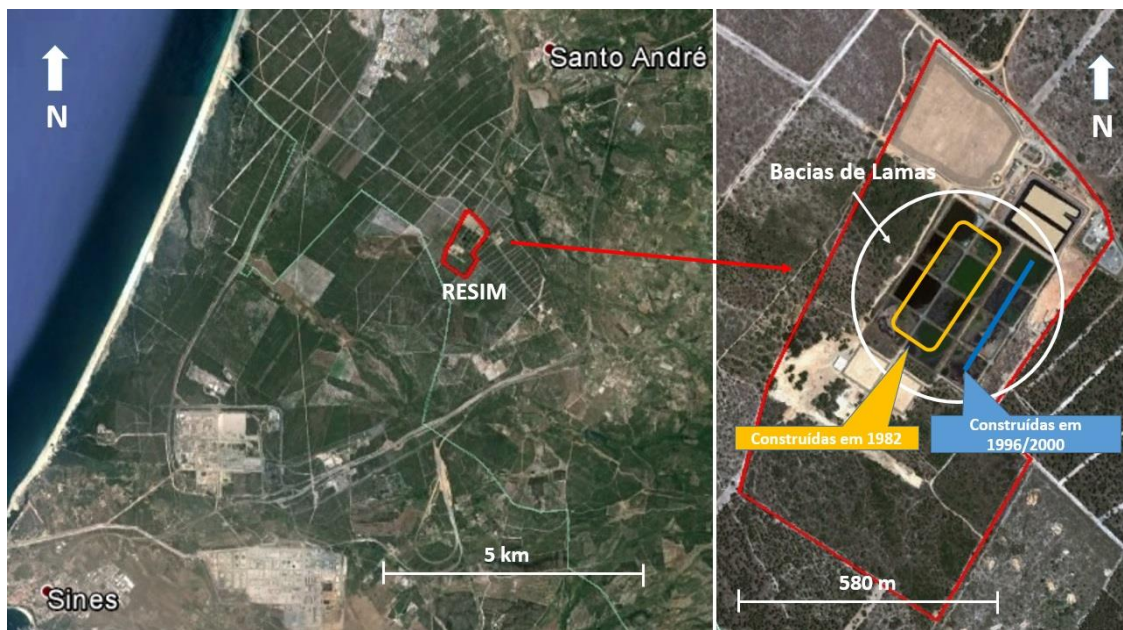


Figura 4.1. Localização do RESIM (Fonte: EGF, 2013)

3.2 Bacias de deposição de lamas oleosas

Em 1982 foram construídas, pelo Gabinete da Área de Sines (GAS), oito bacias para a recepção e armazenamento de lamas provenientes da ETAR da Ribeira dos Moinhos e das empresas situadas na plataforma industrial de Sines.

As bacias, de dimensões aproximadas de 84,0 x 84,0 x 1,6 metros (Figura 4.2), foram revestidas, na zona basal e taludes, com argila compactada. Esta argila constitui a única barreira impermeabilizante das bacias cujo objetivo é evitar a contaminação das águas subterrâneas. A proteção dos taludes na zona de descarga é realizada através de estruturas de betão.



Figura 4.2. Bacia de lamas oleosas da RESIM

Entre 1996 e 2000 foram construídas, pelo Instituto da Água (INAG), mais quatro bacias (duas em 1996 e duas em 2000) com dimensões aproximadas de 84,0 x 84,0 x 2,5 metros. As novas bacias foram também revestidas, fundo e taludes, com argila compactada, desconhecendo-se a sua espessura.

Entre 1982 e 2008 as bacias de deposição de lamas receberam as lamas provenientes das indústrias localizadas nas áreas geográficas de Sines e Santiago do Cacém e da ETAR de Ribeira dos Moinhos.

A Águas de Santo André depositou, durante este intervalo de tempo, lamas a uma média de 950 ton/mês, em que 45% das lamas eram provenientes da ETAR e os restantes 55% das várias indústrias.

A exploração das bacias de deposição encerrou para clientes em Janeiro de 2005, passando a ser o destino temporário das lamas e gradados/areias da ETAR de Ribeira dos Moinhos.

Em Janeiro de 2008 as bacias encerraram para qualquer deposição de lamas.

As lamas depositadas nas bacias caracterizavam-se por terem um elevado teor de humidade, na ordem dos 75-97% com um valor médio de 80%. A matéria seca das lamas era constituída por 65% de matéria orgânica, da qual 35% eram TPH.

Os resultados das análises efectuadas às lamas apresentavam elevados níveis de carbono orgânico total e pequenas quantidades de crómio hexavalente, níquel e zinco, que lhes conferem características de resíduo perigoso.

A quantidade total estimada de lamas depositadas nas bacias, desde o início do seu funcionamento até ao seu encerramento, é de cerca de 300.000 toneladas.

Foi aberto um concurso para a recolha e análise de amostras de solo com o objectivo de caracterizar o solo subjacente à camada impermeabilizante, de maneira a verificar se é

necessário proceder ao saneamento adicional do solo da zona basal e taludes das bacias (EGF, 2013).

Com base em trabalhos de campo foram realizadas sondagens e retiradas amostras de solo para análise em laboratório. O presente trabalho pretendeu avaliar o potencial de atenuação natural das bacias através do estudo das várias amostras de solo recolhidas e da sua contaminação.

5. Materiais e Métodos

As amostras de solo foram caracterizadas para alguns parâmetros físico-químicos de interesse para o trabalho. O plano dos parâmetros analisados encontra-se representado esquematicamente na Figura 5.1.

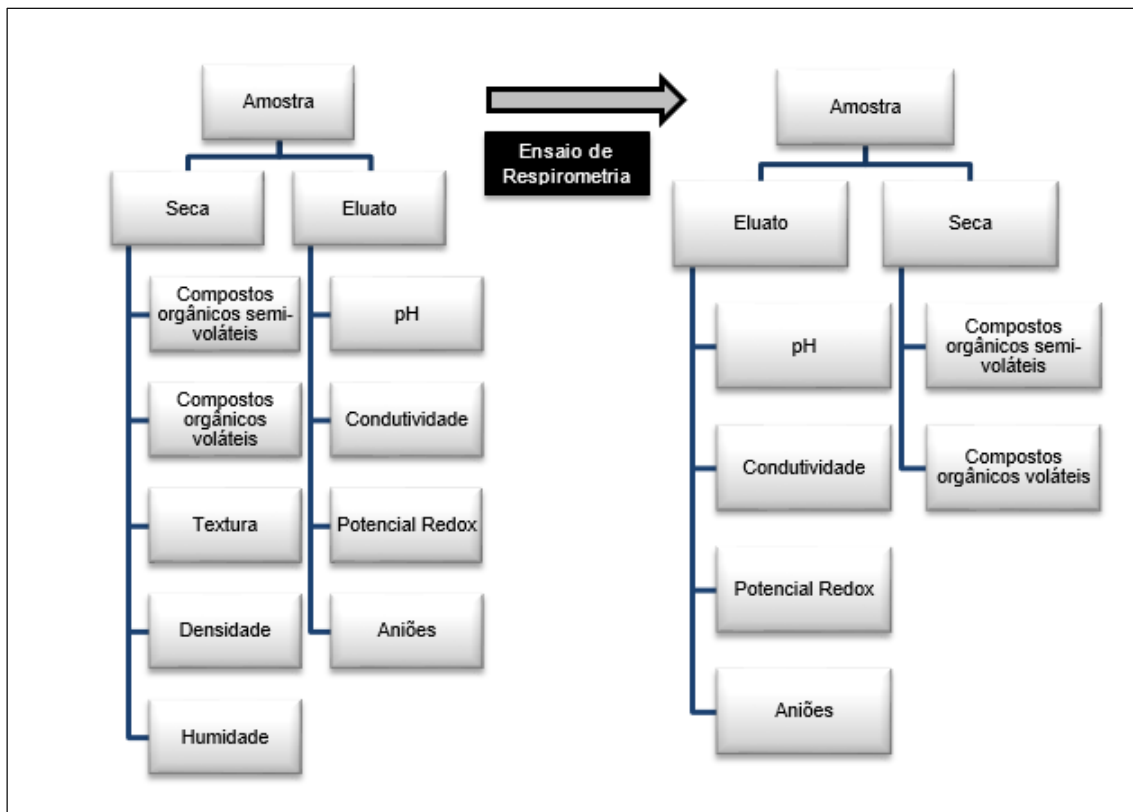


Figura 5.1. Esquema representativo da caracterização físico-química das amostras

Os ensaios foram realizados entre 29 de Maio e 29 de Julho no laboratório ENVERG do Instituto Superior Técnico.

5.1. Materiais

Para a amostragem dos solos, a base de cada bacia foi dividida em 25 células (5x5) com dimensões aproximadas de 16 m x 16 m, como representado na Figura 5.2. A amostragem foi realizada por uma empresa especializada.

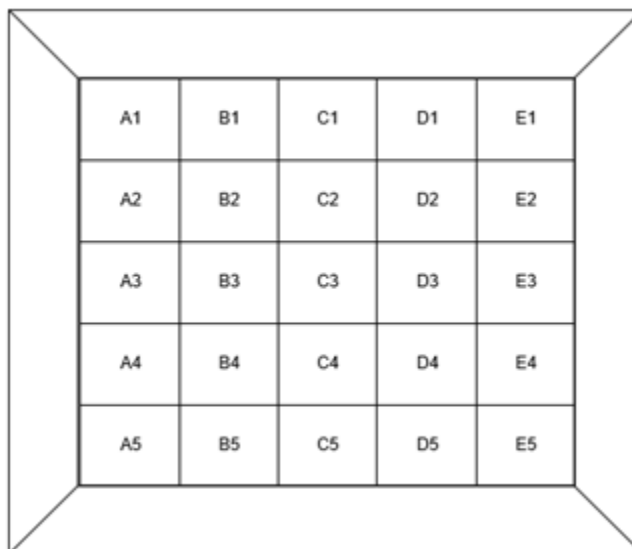


Figura 5.2. Representação esquemática da divisão da base das bacias em células

As amostras para a caracterização de uma das bacias foram recolhidas recorrendo a um trado manual, Figura 5.3, e colocadas em frascos de vidro devidamente identificados (célula, zona da bacia de onde foi recolhida, bacia e profundidade).



Figura 5.3. Recolha de amostra da zona basal com trado manual

Os frascos foram transportados em caixas térmicas para o laboratório. As amostras compósitas foram obtidas através da mistura de 3 amostras discretas.

Foram ainda recolhidas amostras aleatórias dos solos subjacentes às bacias para caracterização preliminar. O trabalho desenvolvido iniciou-se com a recepção das amostras de solo, selecionadas pela entidade acolhedora, provenientes das bacias de lamas oleosas do RESIM. Cinco destas amostras foram recolhidas em sacos de plástico e recebidas no dia 21 de Maio de 2014.

Destas cinco amostras 3 são de solo subjacente às bacias (S1, S2 e S3), uma é da barreira impermeabilizante da zona basal das bacias (A) e uma do talude (T).

As amostras da bacia 3 foram recebidas no dia 29 de Maio e as restantes no dia 12 de Junho de 2014. Os dados relativos às amostras recebidas encontram-se na Tabela 5.1. Admitiu-se a representatividade das amostras recebidas.

Tabela 5.1. Informação sobre as amostras de solo

Amostra	Data de Recepção	Bacia	Localização na Bacia	Célula	Prof. (cm)	Compósita/ Discreta
A	21 de Maio	-	Base	-	-	Discreta
T	21 de Maio	-	Talude	-	-	Discreta
S1	21 de Maio	-	Base	-	-	Discreta
S2	21 de Maio	-	Base	-	-	Discreta
S3	21 de Maio	-	Base	-	-	Discreta
B	29 de Maio	3	Talude	-	0-50	Compósita
C	29 de Maio	3	Talude	-	0-50	Discreta
D	29 de Maio	3	Base	B1	10-60	Compósita
E	12 de Junho	3	Base	B5	100-150	Compósita
F	12 de Junho	3	Base	B5	150-200	Compósita
G	12 de Junho	3	Base	E1	100-150	Compósita

As amostras foram conservadas numa câmara frigorífica a 4 °C de forma a garantir a preservação dos seus compostos.

5.2 Métodos

Para a realização dos trabalhos propostos começou-se pela caracterização preliminar das seis amostras recebidas em sacos. O objetivo desta caracterização foi a familiarização com as técnicas de caracterização de solos em laboratório.

Procedeu-se em seguida à otimização dos métodos de respirometria, mais concretamente da massa e da forma do agente absorvente a utilizar nos ensaios. Por fim procedeu-se à caracterização da bacia 3 através das amostras recebidas em frascos.

Foram colocadas nos frascos OxiTop as amostras: A, T, B, C, G, E, D e F. Estas amostras, após a realização do ensaio, foram novamente analisadas para pH, CE, E_h , compostos orgânicos voláteis e semi-voláteis e aniões.

5.2.1 Condutividade Eléctrica (CE), Potencial Redox (E_h) e pH

Para a determinação do pH, CE e E_h , pesaram-se 5 g de amostra para um tubo Falcon de 50 mL e adicionaram-se 25 mL de água miliQ. A amostra foi agitada por 30 minutos e deixada repousar mais 30 minutos antes da medição do pH e potencial redox.

A CE e o E_h foram medidos recorrendo a um aparelho de medida Multi 340i/SET, WTW, sendo que a primeira foi medida 24 horas após a preparação da suspensão.

A CE foi medida com um sensor de condutividade WTW Tetracon 325 e o E_h com um eléctrodo SenTIX ORP.

O pH foi medido através de um aparelho de medida Metrohm 691 pH Meter (adaptado de Llorens, 2009).

Para todas as amostras foram realizados quatro replicados.

5.2.2 Iões Fluoreto, Cloreto, Nitrito, Nitrato, Sulfato e Fosfato

A determinação dos iões fluoreto, cloreto, nitrito, nitrato, sulfato e fosfato foi realizada recorrendo ao método de cromatografia iónica (CI). Esta técnica é utilizada na determinação de iões inorgânicos e alguns aniões orgânicos e baseia-se na separação de espécies parcialmente ionizáveis em colunas de troca iónica. A técnica permite a determinação sequencial dos iões cloreto (Cl^-), fluoreto (F^-), brometo (Br^-), nitrato (NO_3^-), nitrito (NO_2^-), fosfato (PO_4^{2-}) e sulfato (SO_4^{2-}) em soluções aquosas.

A amostra é conduzida através de duas colunas de troca iónica, uma coluna guarda ou pré-coluna e uma coluna de separação de iões, ambas revestidas com uma resina de troca aniónica, de um supressor de condutividade e finalmente por um detector de condutividade.

As colunas contêm no seu interior um eluente líquido que funciona como fluxo de transporte dos compostos injetados. Os aniões são separados de acordo com a sua afinidade com a resina de troca iónica e identificados pelo tempo de retenção.

A quantificação dos aniões é efetuada através das áreas de cada pico do cromatograma. Tanto o tempo de retenção como a área dos picos são comparados com valores padrão conhecidos (Haddad *et al.*, 2008; Novic e Haddad, 2006 e U.S. EPA, 2007).

O cromatógrafo iónico utilizado foi um 761 Compact IC da Metrohm com módulo supressor e coluna aniónica 6.1006.520 METROSEP A SUPP 5. O eluente utilizado foi uma solução de 3,2 mM Na₂CO₃ (Merck, 99,999%) e 1,0 mM NaHCO₃ (Riedel-de Haën, 99,7%) e a solução de regeneração do módulo supressor foi uma solução de 20 mM de H₂SO₄ (Panreac, 96%). O limite inferior de detecção da recta de calibração do equipamento é de 0,625 ppm e o superior é de 10 ppm.

Valores de concentração abaixo do limite inferior e acima do limite superior não são fiáveis, todas as amostras com concentrações fora destes limites devem ser repetidas com novas diluições. A condutividade máxima, para que a coluna de troca iónica não seja danificada, é de 60 µS/cm. Os tempos de retenção (TR) obtidos para cada elemento encontram-se representados na Tabela 5.2.

Tabela 5.2. Tempos de Retenção dos Aniões

Anião	TR (min)
Fluoreto	3,8
Cloreto	5,9
Nitrito	7,0
Nitrato	10,7
Fosfato	13,4
Sulfato	17,4

Preparação das amostras

Do eluato utilizado na determinação da condutividade filtraram-se 12 mL do sobrenadante recorrendo a uma seringa e filtros de seringa de 0,45 µm para um Falcon de 50 mL.

Para cada amostra foi efetuada uma diluição com água destilada para que a condutividade final não excedesse os 40 µS/cm, de forma a não danificar a coluna e prefazer 12 mL de volume.

A cada três amostras colocadas no suporte para análise colocaram-se dois tubos de água destilada para que não houvesse contaminação entre amostras (adaptado de Llorens, 2009).

5.2.3 Teor de humidade (%H)

O %H foi determinado recorrendo a uma balança de pesos secos HB43-S Halogen da METTLER TOLEDO. Pesou-se 1 grama de amostra na balança e, quando se atingiu massa constante, anotou-se a massa final. O teor de humidade, em massa por massa (m/m), é dado pela equação:

$$\text{Teor de Humidade(\%)} = \frac{\text{massa perdida(g)}}{\text{massa total(g)}} \times 100$$

Para cada amostra foram efectuados quatro replicados. A humidade obtida para cada amostra foi posteriormente utilizada na determinação da MOe dos iões por peso seco de amostra.

5.2.4 Densidade (d)

Num almofariz de porcelana moeu-se uma massa de amostra. Desta massa pesaram-se, numa balança analítica, 10 g de amostra para um balão volumétrico de 25 mL. Com etanol (96%) encheu-se uma bureta de 50 mL e prefer-se o volume do balão contendo a amostra (adaptado de Pereira *et al.*, 2008):

A densidade é dada por:

$$d(\text{g/mL}) = \frac{\text{Massa de amostra(g)}}{\text{Volume de etanol gasto na bureta(mL)}}$$

Foram realizados 3 replicados de cada amostra.

5.2.5 Textura

Numa proveta graduada de 25 mL colocaram-se 10 mL de amostra e prefer-se o restante volume com água destilada. Deixou-se repousar a amostra durante vinte e quatro horas e registou-se o volume ocupado, na proveta, das frações argila, silte e areia. Determinadas as frações granulométricas e, através de um diagrama de classes de textura, representado na Figura 5.4, determinaram-se as classes de textura das amostras de solo (Morais, 2010).

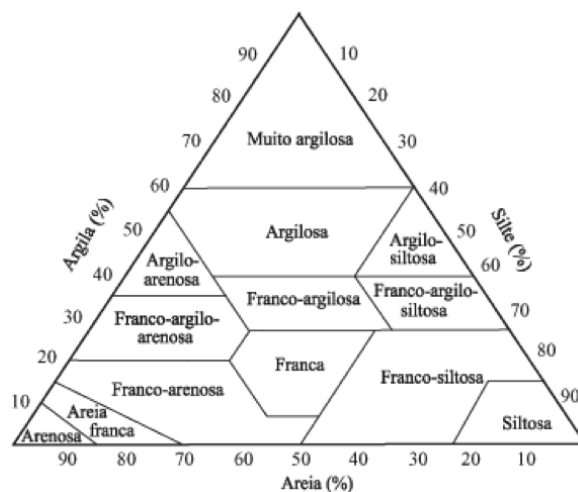


Figura 5.4. Diagrama de classes de textura (Morais, 2010)

Foram realizados três replicados de cada amostra e não se determinou a textura da amostra G.

5.2.6 Matéria Orgânica (MO)

Numa balança analítica pesaram-se cadinhos de porcelana e registaram-se os seus pesos. Para cada cadinho pesou-se 1g de amostra e registaram-se os pesos totais (cadinho + amostra). Os cadinhos foram transportados para uma muffla durante 8 horas a 450°C.

Findo este período retiraram-se os cadinhos da muffla e levaram-se a um exsiccador até arrefecerem, para que as amostras não absorvam humidade.

Após arrefecerem, os cadinhos foram novamente pesados na balança e registaram-se os seus pesos finais (adaptado de Llorens, 2009).

Sabendo o %H, previamente obtido (sub-capítulo 5.2.3), em massa, de cada amostra a MO, em percentagem, é dada por:

$$\text{M. O. (\%)} = \frac{\text{Massa [cadinho + (amostra - humidade)] inicial} - \text{Massa (cadinho + amostra) final}}{\text{Massa [cadinho + (amostra - humidade)] inicial}} \times 100$$

Para cada amostra foram realizados três replicados.

5.2.7 Compostos Orgânicos Semi-Voláteis (COSV)

A determinação dos compostos orgânicos semi-voláteis das amostras foi realizada recorrendo ao método GC-MS. Este método é o mais recomendado para a determinação de TPH e BTEX em amostras de solo (Jorge, 2001).

Para a utilização deste método é necessário fazer uma extração dos compostos a analisar da amostra de solo. A amostra tem de estar na forma gasosa ou aquosa para ser utilizada neste método.

Nas amostras de solo, para que se possa utilizar o método GC-MS, deve realizar-se uma extração dos analitos presentes através de um dos diferentes métodos de extração indicados pela U.S. EPA.

A preparação do eluato para a determinação dos COSV foi realizada pelos métodos U.S. EPA 3540C e 3541 (U.S. EPA, 1994a e U.S. EPA, 1996b).

Para a extração dos compostos orgânicos, pouco solúveis ou insolúveis em água, das amostras de solo recorreu-se a uma extração *Soxhlet*. Este método permite extrair e concentrar COSV e não voláteis de amostras de solo, sedimentos, resíduos sólidos e lamas através do contato entre um solvente de extração e a matriz da amostra. Na Figura 5.5 está representado o procedimento realizado para a determinação dos COSV.

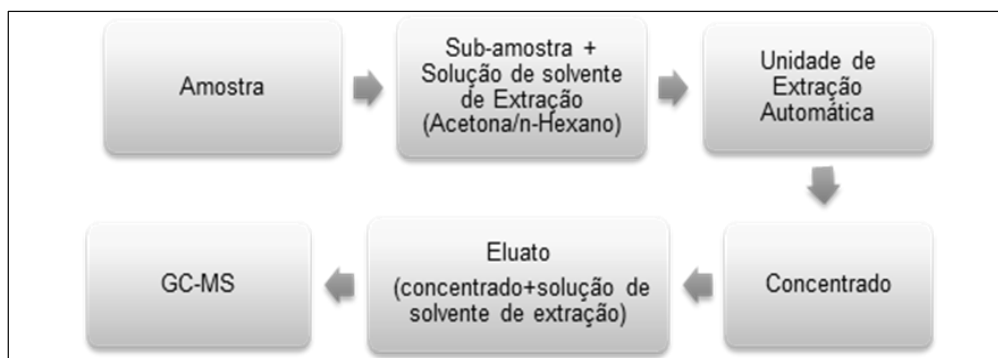


Figura 5.5. Procedimento realizado para a determinação dos COSV

A extração utilizada nos trabalhos realizados foi uma extração Automática *Soxhlet*. Recorreu-se a uma unidade de extração automática BÜCHI B-811 LSV com o programa de extração *Soxhlet Warm* (extração a quente) e a um *Minichiller* da Huber.

Com este equipamento, utilizando uma pequena massa de amostra, conseguimos isolar e concentrar substâncias, presentes em quantidades vestigiais, em quantidades que excedem o limite de deteção.

A extração a quente difere da extração *Soxhlet* convencional através do aquecimento do solvente localizado na câmara de extração, permitindo aumentar a solubilidade dos compostos da amostra (U.S. EPA,1994a e EPA, 1996a). A unidade de extração automática utilizada está representada na Figura 5.6.



Figura 5.6. Unidade de Extração Automática Soxhlet

O método *Soxhlet Warm* é realizado em três passos (Büchi n.d.-b):

- 1- **Extração:** O solvente é aquecido (7) no copo (6) e evapora até ao condensador (1), onde condensa para a câmara de extração e para o copo porta-amostras (2). O nível de solvente aumenta no copo porta-amostras até atingir o nível definido no sensor ótico (3), abrindo-se a válvula de vidro (5) em seguida, permitindo que o solvente retorne ao copo de solvente (6). Este processo repete-se durante o tempo ou um número de ciclos definido pelo utilizador.
- 2- **Lixiviação:** O solvente é aquecido (7) e evapora para o condensador (1), tal como no primeiro passo. A válvula de vidro (5) encontra-se aberta e o condensado passa pelo copo porta-amostras (2) mas retorna imediatamente ao copo de solvente (6). No final deste passo o copo porta-amostras é elevado.
- 3- **Secagem:** A válvula encontra-se fechada e o solvente que evapora e condensa é recolhido na câmara de extração, até não restar solvente no copo de solvente. Neste copo os restam somente os analitos extraídos.

A duração e níveis de temperatura utilizados em cada passo na realização das extrações encontram-se na Tabela 5.3.

Os níveis de temperatura foram determinados a partir da temperatura de ebulição dos solventes e da entalpia de vaporização de acordo com as notas de aplicação da Büchi (Büchi, n.d.-a).

Tabela 5.3. Condições utilizadas nas extrações de compostos orgânicos

Programa: Soxhlet Warm		
Passo	Nível de Temperatura	Duração
1º Extração	Superior:3	4 horas
	Inferior:9	
2º Lixiviação	Inferior:9	30 minutos
3º Secagem*	Inferior:3	5 minutos

*A secagem é realizada com a opção *inert gas* ligada

A amostra, preparada de acordo com o sub-capítulo seguinte, é colocada num cartuxo de extração e este no copo de extração, bem como o copo de solvente, na unidade de extração. O sistema é montado de acordo com as instruções do manual de utilização e é ligado o sistema de refrigeração, com *setpoint* nos 15^o C. Por fim inicia-se o programa.

Preparação das amostras

Para dois replicados, pesaram-se 20 g de amostra (para um replicado pesaram-se 10 g de amostra) para um almofariz de porcelana e adicionou-se sulfato de sódio anidro (Panreac, 99%), para absorver a humidade da amostra, e moeu-se a mistura. Foi-se adicionando sulfato de sódio anidro até obter uma mistura homogénea, solta e seca. Dividiu-se o preparado por dois cartuxos de extração e colocaram-se no copo de extração na unidade automática.

Na Hotte preparou-se uma solução de solvente de extração Acetona/n-Hexano (1:1, v/v) medindo 250 mL, de cada um dos solventes, para uma proveta graduada de 250 mL e colocando num frasco de *Schott* de 1 L. Agitou-se o frasco 16 vezes para que os solventes fossem bem

misturados. Mediram-se 250 mL da solução de solvente para cada copo de solvente, colocando-se de seguida na unidade de extração.

Depois da extração, o resíduo resultante, presente nos copos de solvente, é ressuspenso em 2 mL de solução de extração e, recorrendo a uma seringa e colocado num vial de GC-MS.

Para cada amostra foram efectuados dois replicados excepto para as amostras C, D e F, em que foram realizados apenas 1 replicado por amostra, depois dos ensaios nos *OxiTop*. A amostra G apenas foi analisada para compostos orgânicos após a realização do ensaio nos *OxiTop* e apenas uma amostra de um dos dois frascos foi analisada.

Análise dos eluatos por GC-MS

Para a análise dos compostos orgânicos das amostras recorreu-se ao método GC-MS. Este método emprega duas técnicas analíticas poderosas, cromatografia gasosa (GC) acoplada à espectrometria de massa (MS), na identificação e quantificação de COV e COSV em soluções. O método permite determinar compostos orgânicos em misturas complexas comparando os seus espectros com espectros de referência.

O GC permite separar os compostos por tempo de retenção mas não os consegue identificar. O espectrómetro de massa identifica os compostos através da informação estrutural dos mesmos. No cromatógrafo gasoso a amostra é injetada e, devido à elevada temperatura do injetor, vaporizada.

No injetor é também introduzido o gás de arraste (fase móvel) que arrasta os analitos através de uma coluna capilar contendo a fase estacionária e na qual os compostos são eluídos a tempos diferentes (tempos de retenção). A coluna é de temperatura programável para separar os compostos que serão detetados no MS acoplado ao GC. Geralmente, o gás de arraste é uma molécula pequena com elevado coeficiente de difusão, ao contrário das moléculas orgânicas que têm baixos coeficientes de difusão, e quimicamente inerte (por exemplo hélio ou hidrogénio).

O grau de separação dos compostos é determinado pela distribuição dos mesmos entre o gás de arraste (fase móvel) e a fase estacionária.

Em seguida cada composto, já separado, é detetado e quantificado por um detetor sendo conduzidos para o espectrómetro de massas. Este equipamento mede a razão massa por carga nos iões que se encontram na fase gasosa após passarem por um ionizador. O MS separa os iões na fase gasosa, a baixas pressões, através da interação de campos eléctricos ou magnéticos com partículas carregadas.

Recorrendo a um *software* apropriado, a identificação dos compostos é feita através do tempo de retenção de cada composto e da comparação do espectro do composto com espectros de referência (Duarte, 2014; Kitson, *et al*, 1996 e U.S. EPA, 1996a).

O equipamento utilizado para a determinação dos compostos orgânicos foi um GC-MS – Agilent Technologies 6890N-5975B equipado com uma coluna DB5 de dimensões 60 m x 250 µm x 1 µm. O gás de arraste utilizado foi o hélio e a injeção foi automática, as condições de injeção encontram-se na Tabela 5.4.

Tabela 5.4. Condições de injeção dos eluatos

Injeção Automática	
Caudal de injeção (mL/min)	1
Volume injetado (µL)	1
Pressão de injeção (kPa)	135,52
Razão de split	10:1
Temperatura de injeção (°C)	250

A análise dos cromatogramas gerados para cada eluato foi realizada através do *software* Agilent Technologies MSD Productivity ChemStation Revision D.03.00 SP1.

Os eluatos das amostras foram analisados por GC-MS através de dois métodos (M1 e M2) nos quais se fez variar a rampa de temperaturas do forno do cromatógrafo, na Tabela 5.5 encontram-se as variações na rampa de temperatura para cada método.

Tabela 5.5. Variações na rampa de temperaturas aplicadas nos dois métodos (Fonte: Guerreiro, 2011)

Método	Rampa (°C/min)	Temperatura (°C)	Temperatura final (°C)	Tempo (min)	Tempo de estabilização (min)	Tempo total (min)
M1	-	60			2,0	2,0
	2	60	75	7,5	2,0	11,5
	5	75	230	31,0	10,0	52,5
M2		80	80		2,0	2,0
	6	80	230	25,0	10,0	37,0

A solução de solvente de extração foi analisada para comparar os compostos identificados na solução com os compostos presentes nos eluatos das amostras. Este procedimento permite-nos retirar dos resultados obtidos para as amostras de solo, os compostos que estão presentes no eluato mas que pertencem ao solvente utilizado.

Os espectros obtidos foram interpretados com o *software* NIST *Mass Spectral Search Program* 2.0., comparando-os com os espectros de compostos de referência de uma biblioteca - NIST/EPA/NIH *Mass Spectral Library* (NIST 05).

Para um determinado tempo de retenção, aos compostos com percentagens de correspondência inferior a 70%, foi subtraída a linha de base do cromatograma de modo a obter ou uma melhor correspondência ou um composto com maior correspondência.

5.2.8 Compostos Orgânicos Voláteis (COV)

Para a determinação dos COV recorreu-se ao método *Headspace*-GC-MS (HS-GC-MS), os métodos EPA 5021 (U.S. EPA, 1996c) e 8260B (U.S. EPA, 1996d).

Utilizou-se a técnica de *Headspace* de equilíbrio estático que permite analisar diretamente os compostos voláteis presentes na fase gasosa de um vial contendo uma amostra sólida ou líquida.

O método HS-GC permite concentrar e analisar os COV.

Para a análise é colocada uma massa de amostra num *vial* de *headspace* conjuntamente com um agente modificador da matriz da amostra, sendo depois imediatamente selado. No *vial* existem duas fases: gasosa (*headspace*) e a fase da amostra (líquida ou sólida, que contém os compostos a serem analisados).

No HS o *vial* é pressurizado e termostatizado até se atingir o equilíbrio entre as fases. Em seguida é extraída uma alíquota da fase gasosa injetada, em conjunto com o gás de arraste, na coluna do GC (Duarte, 2014 e Restek, 2000).

Na coluna os compostos serão eluídos e serão então conduzidos para o MS acoplado como descrito no subcapítulo anterior.

Preparação das amostras

Numa balança analítica, foram pesadas 5g de amostra para um *vial* de HS e este foi imediatamente selado com uma tampa hermética. O procedimento foi repetido com a adição de 3,5 g de sulfato de sódio anidro, para outro *vial*.

O *vial* foi agitado para misturar a amostra com o sulfato de sódio. O sulfato de sódio foi utilizado como complexante da amostra, com o objetivo de facilitar a difusão dos COV para a fase gasosa do *vial*.

O equipamento utilizado para a determinação dos COV foi um GC-MS descrito no subcapítulo anterior, acoplado a um HS 7697A da Agilent Technologies com uma coluna DB-5ms – 60m x 250 µm x 1µm.

Para a análise por HS-GC-MS recorreu-se ao protocolo utilizado pelo laboratório em que as temperaturas e pressão definidas para o HS se encontram na Tabela 5.6.

Tabela 5.6. Condições utilizadas no HS

Condições utilizadas no HS	
Temperatura no Forno (°C)	80
Temperatura no Loop (°C)	90
Tempo de equilíbrio no forno (min)	50
Temperatura na Transferência (°C)	120
Pressão (psi)	20

No GC foram utilizadas as condições e rampas de temperatura que se encontram nas Tabelas 5.7 e 5.8 respectivamente.

Tabela 5.7. Condições utilizadas no GC

Condições utilizadas no GC	
Tempo de Injeção (min)	0,2
Temperatura da injeção (°C)	150
Caudal injetado (mL/min)	45
Caudal na coluna (mL/min)	2
Razão de <i>split</i>	20:1

Tabela 5.8. Rampas de temperatura utilizadas na análise das amostras

Rampa (°C/min)	Temperatura (°C)	Temperatura final (°C)	Tempo (min)	Tempo total (min)
-	40	40	2,00	2,00
10	40	100	6,00	8,00
30	100	270	5,67	13,67
	270	270	15,00	28,67

A obtenção e análise dos resultados obtidos foi realizada recorrendo aos *softwares* descritos no subcapítulo anterior. Aos compostos obtidos na análise retiraram-se os componentes do ar.

5.2.9 Respirometria

Para a determinação da respiração microbiana das amostras de solo recorreu-se a um método de respirometria manométrico. A atividade microbiana do solo pode ser determinada através da medição e quantificação de compostos formados (por exemplo, CO₂) ou consumidos (por exemplo, O₂) pelos microrganismos (Turbé *et al.*, 2010)

Num sistema fechado, o consumo de oxigénio, pela população microbiana na biodegradação de compostos, provoca uma diminuição da pressão no sistema. Durante a biodegradação, em condições aeróbias, é formado CO₂.

O sistema *OxiTop*® permite registar automaticamente as variações de pressão que ocorrem num determinado intervalo de tempo dentro de cada frasco (Kaakinen *et al.*, 2007). Este sistema consiste num frasco de vidro selado com uma tampa, com suporte para um copo, e com uma cabeça que realiza e regista as medições de pressão.

A utilização de um absorvente de CO₂ evita o aumento de pressão resultante da libertação do mesmo, registando-se apenas as variações de pressão resultantes do consumo de oxigénio. O absorvente geralmente utilizado é o NaOH, em *pellets* ou solução.

Pode haver consumo, marginal, de oxigénio resultante de processos de nitrificação. A utilização de um inibidor destes processos pode ser utilizado para eliminar este consumo (WTW, 2012).

Os ensaios de respirometria foram realizados em frascos *OxiTop*® com comando *OxiTop*®Control OC 110 (WTW, Weilheim).

Este sistema, representado na Figura 5.7, é geralmente utilizado na determinação da CBO_x de amostras de águas. Pode ser utilizado também para avaliar a respiração microbiana em solos, lamas e resíduos.



Figura 5.7. Frascos OxiTop® (WTW, 2012)

A quantidade de amostra a utilizar em cada ensaio e a forma do agente absorvente utilizado foram otimizadas. Os restantes ensaios foram realizados, após correção de humidade de todas as amostras.

Os ensaios foram realizados recorrendo a frascos *OxiTop* de 1L e foi sempre realizado um branco. No comando de controlo utilizou-se o modo *Pressure p* que apenas regista as variações de pressão no interior de cada frasco. Este modo permite registar a pressão absoluta entre 500 e 1350 hPa (WTW, 2012).

↗ **Preparação da solução de NaOH a 0,25 M**

Numa balança analítica pesaram-se 5 g de uma solução de NaOH (50%) (m/m) para um balão volumétrico de 250 mL. Prefez-se o volume com água destilada e levou-se a solução a agitar num agitador magnético para garantir a mistura.

↗ **Preparação dos brancos**

Os brancos consistiram num frasco *OxiTop* apenas com o recipiente contendo 35 mL de uma solução de NaOH a 0,25M.

↗ **Otimização da quantidade de amostra a utilizar**

De forma a otimizar a quantidade de amostra a utilizar, realizou-se um ensaio para comparar as variações de pressão nos frascos com diferentes massas.

Numa balança analítica pesaram-se, para dois frascos *OxiTop*, 50 e 100 g da amostra A. Colocaram-se no suporte de cada frasco os recipientes contendo 35 mL de solução de NaOH a 0,25M. Os frascos foram devidamente fechados e iniciaram-se os registos com o comando *OxiTop®Control OC 110* de acordo com o manual.

Todos os frascos foram colocados numa estufa. A temperatura média dentro da estufa em que foram colocados os frascos foi de 23,5 °C.

Na Tabela 5.9 apresentam-se os dados relativos à otimização da quantidade de amostra a utilizar nos ensaios de respirometria.

Tabela 5.9. Otimização da quantidade de amostra a utilizar nos ensaios de respirometria

Duração do ensaio (dias)	Amostra	NaOH	Massa (g)
4,7	A	solução	50
	A	solução	100
	A	solução	200

↳ Determinação da eficácia do agente absorvente

A eficácia do agente absorvente foi testada na forma de solução e *pellets*. Para dois frascos *OxiTop* pesaram-se, numa balança analítica, 100 g da amostra T e para outros dois 50 g da amostra A.

Num dos dois frascos contendo a mesma amostra foi colocado, no suporte, um recipiente com 20 g de *pellets* de NaOH e no outro um recipiente com 35 mL de solução de NaOH a 0,25M. Fecharam-se os frascos devidamente e iniciaram-se os registos. Todos os frascos, um deles um branco, foram colocados numa estufa.

Na Tabela 5.10 apresentam-se os dados relativos à determinação da eficácia do agente absorvente nos ensaios de respirometria.

Tabela 5.10. Determinação da eficácia do agente absorvente

Duração do ensaio (dias)	Amostra	NaOH	Massa (g)
4,7	A	solução	50
	A	<i>pellets</i>	50
	T	<i>pellets</i>	100
	T	solução	100

↳ Respirometria

Para os ensaios de respirometria procedeu-se, previamente, à correção da humidade nas amostras de solo, de forma a acelerar o processo. O agente absorvente utilizado nos ensaios foi uma solução de NaOH.

A correção da humidade da amostra T foi realizada em separado para os dois replicados. Para as restantes amostras a correção foi realizada para a totalidade da amostra e só depois foi dividida para dois frascos.

Depois de pesada, numa balança analítica, e registado o seu peso, cada amostra foi borrifada com água destilada e homogeneizada com uma colher, até se observar que a amostra não tinha capacidade de reter mais água.

Seguidamente a amostra humidificada foi pesada e foi registada a sua massa. A humidade final de cada amostra foi obtida por:

$$\text{Humidade final (\%)} = \frac{\text{Humidade inicial (g)} + [\text{Massa total (amostra + água)} - \text{Massa de amostra}](\text{g})}{\text{Massa total(amostra + água)}(\text{g})} \times 100$$

As amostras foram colocadas nos frascos depois de corrigida a humidade e distribuídas no fundo de cada um. Em cada frasco foi colocado o recipiente com 35 mL da solução de NaOH. Os frascos foram fechados, iniciaram-se os registos e colocaram-se na estufa.

Na Tabela 5.11 encontra-se um resumo dos ensaios realizados.

Tabela 5.11. Resumo dos ensaios realizados

Amostra	NaOH	Massa de amostra em cada OxiTop (g)	Humidade Inicial (%)	Humidade Final (%)
A	<i>pellets</i>	50	15,28	15,28
A	solução	50	15,28	15,28
A	solução	100	15,28	15,28
T	solução	100	0,12	0,12
T	<i>pellets</i>	100	0,12	0,12
A	solução	200	15,28	15,28
T	solução	200	0,12	20,00
E	solução	100	6,19	22,30
G	solução	97	7,94	25,60
B	solução	100	9,98	22,87
C	solução	100	2,49	17,35
D	solução	100	15,04	23,92
F	solução	100	6,67	21,23

No final de cada ensaio, os dados foram recolhidos com o comando *OxiTop® Control OC 110* e analisados através do *software Achat OC*.

6. Resultados e Discussão

Na determinação dos COSV das amostras foram utilizados dois métodos (M1 e M2) que diferem nas rampas de temperaturas utilizadas, como explicado no sub-capítulo 5.2.7.2. O método M1 utiliza um aumento de temperatura mais gradual, sendo um método mais moroso na análise de cada eluato do que o método M2.

Foram detetados mais compostos com o método M1, por isso selecionou-se esse método para avaliar os COSV das amostras.

Na determinação dos COVs das amostras foram utilizadas amostras tal qual e amostras com adição de sulfato de sódio anidro. Os resultados obtidos para as amostras sem adição de sal foram mais consistentes quando comparamos as variações das amostras antes e depois do ensaio de respirometria.

As amostras com adição de sal podem também sofrer maiores perdas de COV visto que a sua preparação requer mais tempo do que na amostra tal qual. Por isto, optou-se por avaliar apenas os cromatogramas dos COV nas amostras tal qual. Para os ensaios de respirometria realizou-se a determinação dos COV e COSV na amostra inicial e final.

Nos resultados apresenta-se a variação, diminuição ou aumento da abundância, em relação à amostra inicial. Os cromatogramas apresentados representam variações positivas superiores a 50.000 e negativas inferiores a -50.000 de abundância de cada composto, de maneira a desprezar variações marginais.

Para cada amostra colocada nos OxiTop os resultados estão identificados com a designação da amostra seguida do número do replicado, e estão representados o resultado da amostra antes do ensaio de respirometria (inicial) e depois do ensaio (final).

Nos Anexos I e II estão representadas as tabelas com os COSV e COV, respectivamente, determinados por GC-MS.

6.1 Caracterização preliminar

A caracterização preliminar de amostras de solo, recolhidas aleatoriamente, subjacente às bacias de lamas oleosas teve como objetivo a familiarização com as técnicas de caracterização de solos e com os solos endógenos da área das bacias.

Os resultados dos ensaios realizados na determinação dos parâmetros estão representados na Tabela 6.1.

Tabela 6.1. Resultados da caracterização físico-química das amostras S1, S2 e S3 (média ± desvio padrão; n=4)

Amostra		S1	S2	S3
	pH	8,86 ± 0,05	5,27 ± 0,05	5,75 ± 0,09
	CE (μS/cm)	346 ± 18	209 ± 23	205 ± 23
	Eh (mV)	140 ± 2	342 ± 2	312 ± 3
	%H (m/m)	15 ± 1,07	7,4 ± 0,42	9,48 ± 0,29
	M.O. (%)*	0,74 ± 0,49	0,5 ± 0,45	1,32 ± 0,38
	d (kg/m ³)	2,15 ± 0,03	2,38 ± 0,03	2,22 ± 0,03
Textura*	Argila (%)	100 ± 0,0	36 ± 3,6	28,7 ± 11,9
	Silte (%)	0,0 ± 0,0	0,0 ± 0,0	14,5 ± 0,9
	Areia (%)	0,0 ± 0,0	64 ± 3,6	56,8 ± 12,7
Aniões (mg/kg peso seco)	Cl ⁻	307 ± 45,19	n.d.	n.d.
	F ⁻	n.d.	n.d.	n.d.
	NO ₃ ⁻	n.d.	n.d.	n.d.
	NO ₂ ⁻	451 ± 34,33	221 ± 26,20	220 ± 23,6
	SO ₄ ²⁻	n.d.	n.d.	n.d.
	PO ₄ ²⁻	n.d.	n.d.	n.d.
	COVs	n.d.	n.d.	n.d.
COSVs	n.d.	n.d.	n.d.	

Legenda: n.d. – Não detetado;

* Ensaio realizado com 3 replicados

O pH das amostras de solo variou entre os 5,27 e os 8,86, valores próximos do intervalo ótimo de pH para a atividade microbiana (6-8) (Da Costa, 2011). As amostras apresentaram CE entre os 205 e 346 μS/cm.

O valor da CE reflete a salinidade do solo e o seu teor em iões. O solo 1 apresentou uma concentração de nitritos duas vezes superior à determinada nos solos 2 e 3, e foi o único em que foram detetados iões cloreto. As maiores concentrações de iões do solo 1 podem explicar a elevada CE medida no mesmo.

As concentrações de nitritos dos solos 2 e 3 são semelhantes assim como o desvio padrão. O Eh variou entre os 140 e os 342 mV. A amostra S1 apresentou o menor Eh, o que pode indicar que a amostra pode ter sido recolhida a uma profundidade superior à das amostras S2 e S3. A %H das amostras variou entre os 7,4 e os 15% (m/m). A %H no solo 1 é muito superior ao determinado nos solos 2 e 3, o que pode ser explicado pela classe textural dos mesmos.

O solo 1 é um solo argiloso, ou seja, possui uma maior capacidade de retenção de água do que os solos franco-argilo-arenosos. Os resultados mostram que o Solo 1 e 2 são semelhantes entre si na maioria dos parâmetros determinados.

Não foram detetados compostos semi-voláteis por GC-MS nem voláteis por HS-GC-MS em nenhuma das amostras de solo.

6.2 Otimização do método de Respirometria

O método de respirometria foi otimizado face à quantidade de amostra e forma de agente absorvente a utilizar. Uma amostra de argila (A) e uma amostra de talude (T) foram utilizadas nos ensaios. As variações de pressão nos frascos foram representadas subtraindo as variações registadas no branco que correspondem às variações de temperatura no laboratório.

Os resultados da determinação da eficácia da forma utilizada do NaOH encontram-se representados na Figura 6.1.

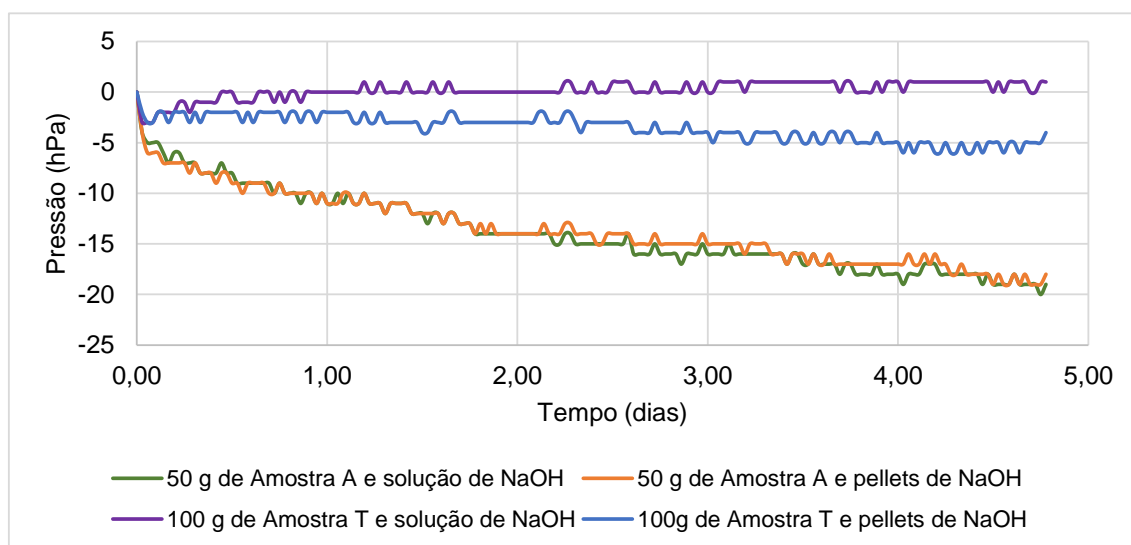


Figura 6.1. Determinação da eficácia da forma utilizada do agente absorvente

A amostra A com solução de NaOH e com *pellets* de NaOH apresentaram a mesma variação de pressão. Embora a amostra T com *pellets* e com solução de NaOH tenha apresentado uma ligeira diferença, a resposta foi praticamente nula, podendo admitir-se que a amostra não reagiu em nenhum dos frascos, visto ser uma amostra seca.

Optou-se pela utilização da solução de NaOH por ter apresentado a mesma resposta para a mesma amostra com *pellets* e por não absorver humidade da amostra (Vähöja *et al*, 2005).

Para a determinação da quantidade de amostra a utilizar nos ensaios de respirometria foi utilizada a amostra A. Em frascos OxiTop foram colocadas 50, 100 e 200g de amostra. Para a última massa foram realizados dois replicados (R1 e R2).

As variações de pressão registadas durante o ensaio estão representadas na Figura 6.2.



Figura 6.2. Otimização da quantidade de massa a utilizar nos ensaios de respirometria

A diminuição de pressão no interior dos frascos é superior quando utilizamos maior massa de amostra. Se desprezarmos o replicado 2 (R2) podemos concluir que, a partir das 50 g, por cada acréscimo de 50 g de amostra a pressão diminui aproximadamente 10 hPa.

A massa de amostra a utilizar deverá ser de 200g, porém, devido a limitações na quantidade de amostra disponível, optou-se por utilizar 100g para a realização dos ensaios.

6.3 Caracterização de amostras da barreira impermeabilizante e de um talude

As amostras da barreira impermeabilizante (A) e de um talude (T) foram caracterizadas físico-quimicamente e testadas num ensaio de respirometria. Os resultados da caracterização físico-química das amostras estão representados na Tabela 6.2.

Tabela 6.2. Resultados da caracterização físico-química das amostras A e T (média ± desvio padrão; n=4)

Amostra		A	T
	pH	8,91 ± 0,08	7,7 ± 0,44
	CE (µS/cm)	206 ± 0	50 ± 1
	Eh (mV)	121 ± 3	247 ± 17
	%H	15,3 ± 0,85	0,12 ± 0,05
	M.O. (%)*	1,7 ± 1,34	2,2 ± 0,16
	d (kg/m ³)*	2,21 ± 0,04	2,64 ± 0,06
Textura*	Argila (%)	14,7 ± 1,2	0,0 ± 0,0
	Silte (%)	14,7 ± 1,2	0,0 ± 0,0
	Areia (%)	70,6 ± 2,4	100 ± 0,0
Aniões (mg/kg peso seco)	Cl ⁻	150 ± 23,87	25 ± 2,34
	F ⁻	n.d.	n.d.
	NO ₃ ⁻	n.d.	n.d.
	NO ₂ ⁻	150 ± 47,60	n.d.
	SO ₄ ²⁻	n.d.	19,16 ± 0,04
	PO ₄ ²⁻	n.d.	5,6 ± 0,70

Legenda: n.d. – Não detetado;

* Ensaio realizados com 3 replicados

O pH das amostras variou entre os 7,7 e os 8,91. A amostra T apresentou um valor médio de pH dentro da gama ótima para a atividade microbiana, a amostra A apresentou pH alcalino. A amostra T apresentou uma CE baixa, que é fundamentada pelo baixo teor de aniões detetados.

As baixas concentrações de aniões determinadas na amostra T podem ser justificadas com a classe textural do solo, que por ser um solo arenoso, possui baixa capacidade de retenção de iões. Ambas as amostras apresentaram E_h característicos de solos moderadamente reduzidos (Riser-Roberts, 1998).

A amostra T apresentou um E_h superior ao determinado para a amostra A, isto pode dever-se à textura dos solos. Os solos arenosos, como a amostra T, são geralmente mais arejados e retêm menos água, o que se pode traduzir num maior E_h. A amostra T é um solo seco, o teor de humidade é aproximadamente 0% (m/m), o que limita a atividade microbiana da amostra.

A amostra A apresentou uma %H de 15,3% (m/m), o que pode representar um estímulo para os microrganismos que possam estar presentes. A MO da amostra T e da amostra A, contrariam a classe textural das amostras. A amostra T é um solo arenoso, praticamente inerte, com menor tendência para conter MO. A amostra A é um solo franco-arenoso, possui argila, ou seja, deveria apresentar um teor de MO superior ao da amostra T.

Para a maioria dos parâmetros determinados, a amostra A apresentou um maior potencial para a atividade microbiana do que a amostra T.

As variações de pressão registadas no ensaio de respirometria realizado para as amostras, com dois replicados cada, encontram-se representadas na Figura 6.3. Os replicados da amostra A foram colocados tal qual nos frascos OxiTop. Para os replicados da amostra T foi previamente realizada uma correção de humidade, a 20% (m/m), antes de serem colocados nos frascos. As quantidades de amostra colocadas foram 200 g de amostra A e 250 g de amostra T, em cada frasco.

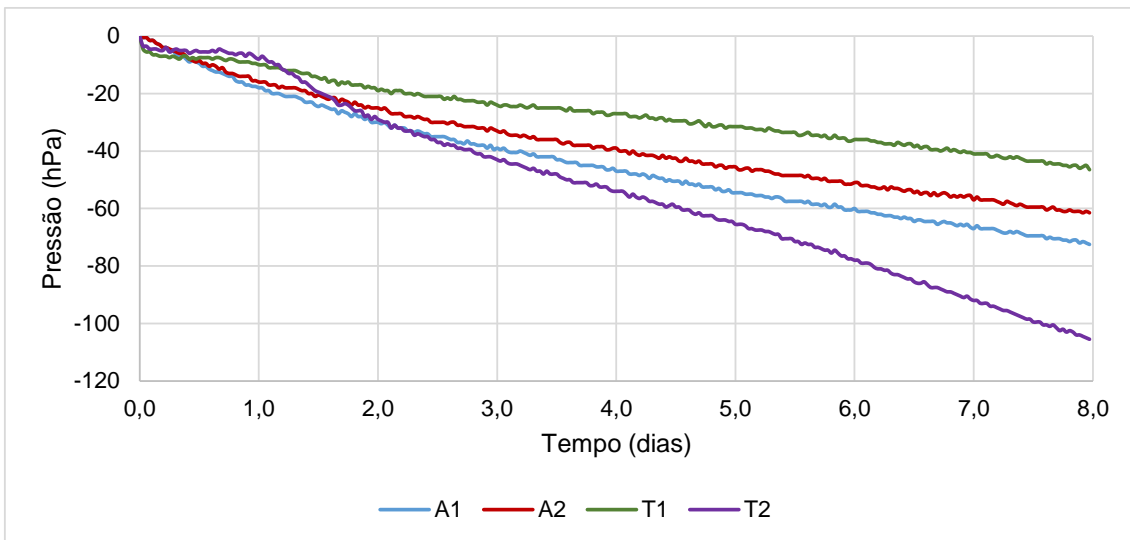


Figura 6.3. Ensaio de respirometria das amostras A e T com dois replicados

A amostra A apresentou um comportamento semelhante em ambos os resultados. Os replicados da amostra T não apresentaram variações de pressão semelhantes, sendo que o replicado T1 provocou uma diminuição de pressão muito inferior. Este comportamento pode dever-se a uma diferente homogeneização dos replicados durante a sua preparação na correção de humidade.

A amostra T não apresentou qualquer atividade no ensaio para a determinação da eficácia do agente absorvente, quando foi utilizada a amostra tal qual. Após a correção de humidade da amostra, e mesmo utilizando 250 g de amostra, o replicado T1 originou uma depressão substancial. A amostra A apesar de ter sido utilizada tal qual e em menor quantidade do que a amostra T, gerou uma diminuição de pressão significativa.

A variação dos COV determinados em relação à amostra inicial após o tempo de ensaio da amostra A encontram-se representados na Figura 6.4.

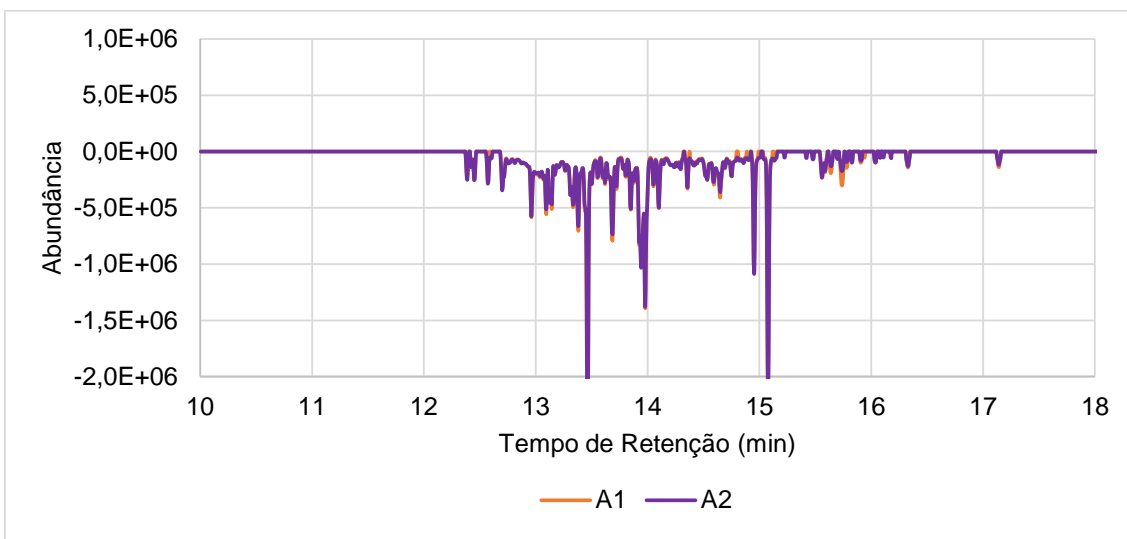


Figura 6.4 Variação da abundância dos COV da amostra A após ensaio de respirometria com dois replicados

As variações da abundância dos COV, em ambos os replicados, foi idêntica. Todos os COV determinados na amostra inicial, para a variação de abundância definida, diminuíram ou não foram detetados.

A diminuição da abundância de um composto pode ser devida à degradação do mesmo, à diluição ou à sua transformação em outro composto. Alguns dos COV cuja abundância diminuiu na amostra A após o ensaio de respirometria estão representados na Tabela 6.3.

Tabela 6.3. COV detetados nos replicados da amostra A e tempos de retenção

TR(min)	Nome
13,46	3a,4,5,6,7,7a-Hexahidro-4,7-metanoindeno
13,68	4,7-Metano-1H-indeno, octahidro-
13,95	1H-Indeno, 1-metil-
14,95	2-metil naftaleno
15,08	1-metil naftaleno

Na Figura 6.5 estão representadas as variações de abundância dos COV, para a variação de abundância previamente definida, da amostra T.

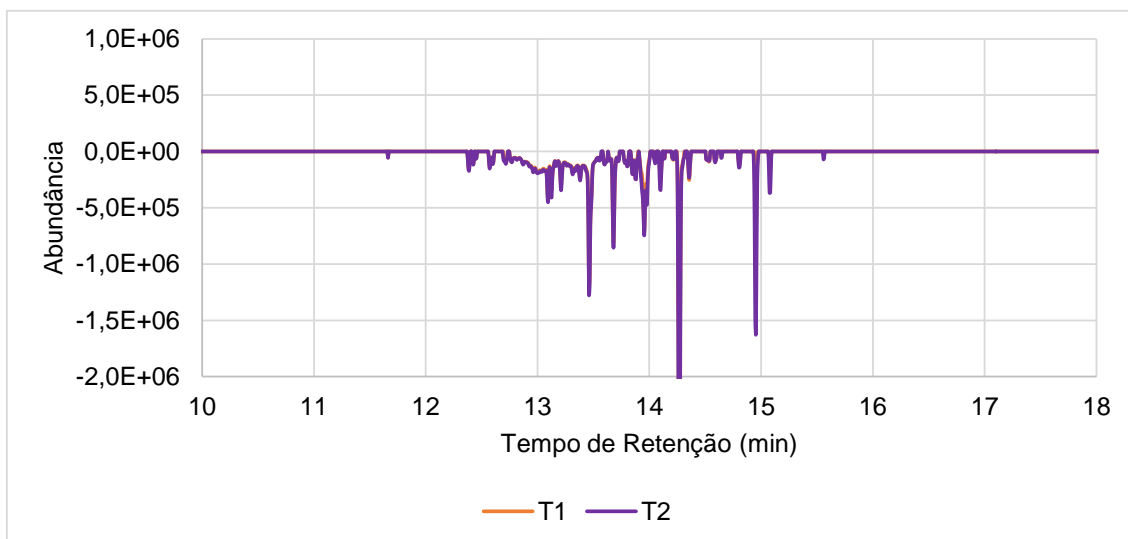


Figura 6.5. Variação da abundância dos COV da amostra T após ensaio de respirometria com dois replicados

As variações dos COV da amostra T nos dois replicados são idênticas, como as observadas na amostra A. Nesta amostra os COV, em relação à amostra inicial, diminuíram a sua abundância ou não foram detetados.

Na Tabela 6.4 estão representados alguns compostos cuja abundância diminuiu após o ensaio de respirometria.

Tabela 6.4. COV detetados em ambos os replicados da amostra T e tempos de retenção

TR (min)	Nome
13,46	3a,4,5,6,7,7a-Hexahidro-4,7-metanoindeno
13,68	4,7-Metano-1H-indeno, octahidro-
14,26	Naftaleno
14,95	2-metil naftaleno

Nas amostras A e T foram detetadas diminuições de abundância para compostos em comum. Os COV 4,7-Metano-1H-indeno, octahidro; 3a,4,5,6,7,7a-Hexahidro-4,7-metanoindeno e 2-metil naftaleno 2-metil diminuíram de abundância em replicados das duas amostras. Relativamente às amostras iniciais A e T, foi detetada uma maior variedade de COV após o ensaio de respirometria.

A volatilização dos compostos pode ocorrer à temperatura do ensaio devido somente às características físico- químicas dos compostos. Compostos mais voláteis, com elevada pressão de vapor e constante da lei de Henry, podem-se ter volatilizado da amostra para a fase gasosa do OxiTop. Compostos como o naftaleno, o mais volátil dos PAHs, são facilmente volatilizados à temperatura média a que se realizaram os ensaios.

Os compostos que diminuíram de abundância durante o ensaio de respirometria podem não ter sido biodegradados mas apenas volatilizados para a fase gasosa dos *OxiTop*. Deste modo, a

observação das variações de abundância dos COSV é mais fiável na avaliação da biodegradação de compostos.

As variações de abundâncias dos COSV para a amostras A estão representadas na Figura 6.6.

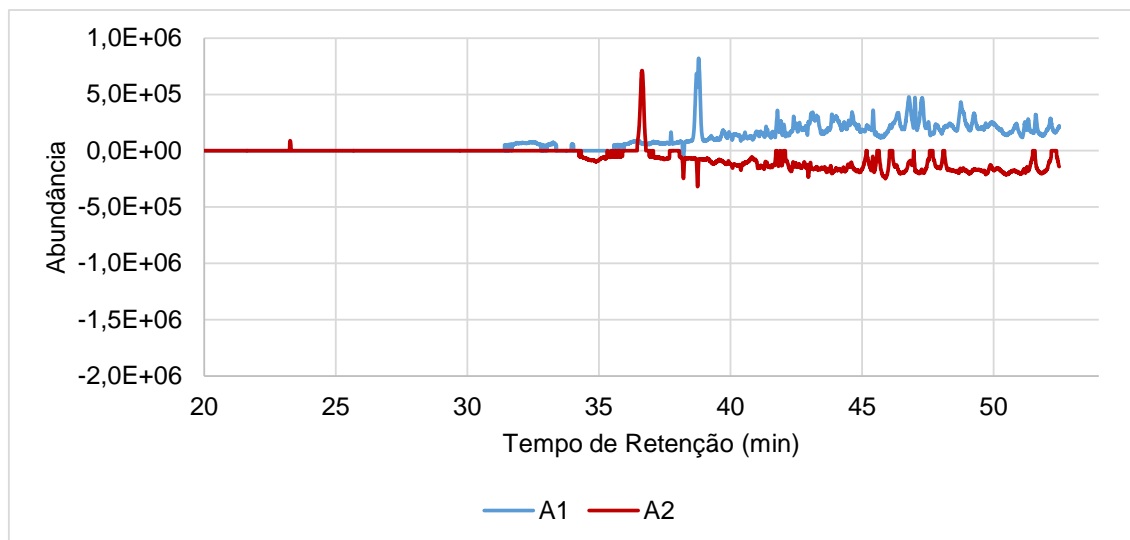


Figura 6.6. Variação da abundância dos COSV da amostra A após ensaio de respirometria com dois replicados

As variações detetadas nos COSV para os replicados A1 e A2 não apresentaram semelhanças. O replicado A1 apresentou variações positivas, aumento da abundância, na grande maioria dos COSV detetados na amostra inicial, enquanto o replicado A2 apresentou variações negativas.

Pode ter ocorrido um erro na injeção no GC ou na extração dos analitos no método *Soxhlet Warm* de um dos replicados, visto ser improvável a mesma amostra inicial, nas mesmas condições, apresentar comportamentos tão diferentes. O método de extração *Soxhlet* envolve mais passos no seu procedimento, logo, os resultados podem ser menos precisos do que na determinação dos COV.

Nada se pode concluir acerca dos COSV através da análise das variações em relação à amostra inicial.

As variações de abundâncias dos COSV para a amostras T estão representados nas Figuras 6.7.

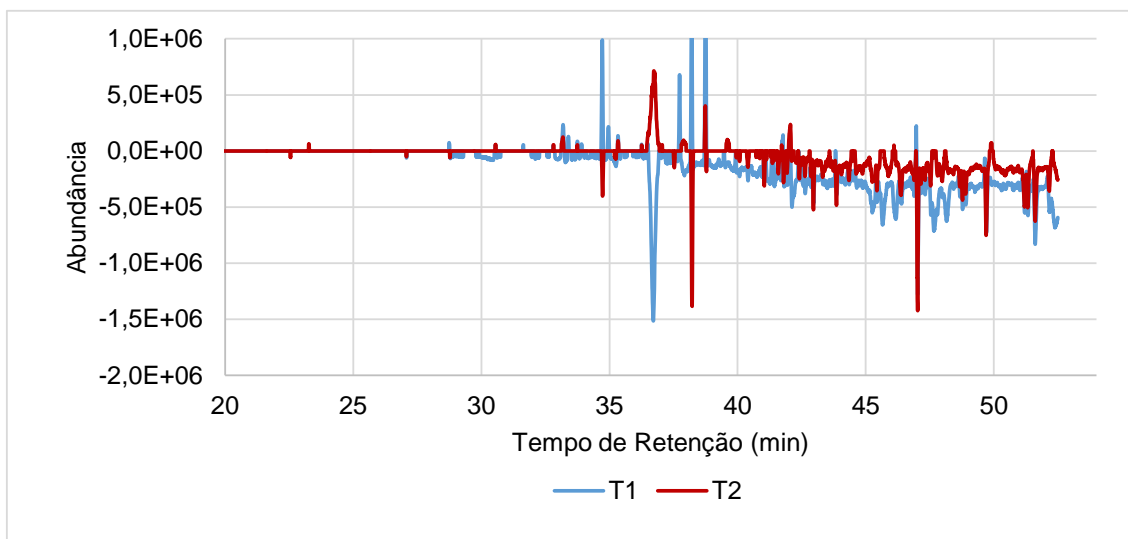


Figura 6.7. Variação da abundância dos COSV da amostra T após ensaio de respirometria com dois replicados

A variação dos COSV nos replicados da amostra T, após o ensaio de respirometria, não apresentou um comportamento semelhante.

As diferenças de comportamento podem estar associadas à diferente homogeneização dos replicados durante a correção de humidade. Os replicados da amostra T tinham apresentado diferentes resultados no ensaio de respirometria o que pode justificar a discrepância nas variações dos COSV.

Na Tabela 6.5 estão representados alguns COSV detetados em um ou ambos os replicados da amostra T.

Tabela 6.5. COSV detetados nos replicados T1 e/ou T2 e tempos de retenção

TR (min)	T1	T2
34,72	Naftaleno	Naftaleno
36,63	Fenantreno	n.d.
38,21	2-metil naftaleno	2-metil naftaleno
47,00	Fluoreno	n.d.

O naftaleno e 2-metil naftaleno aumentaram de abundância no replicado T1 e diminuíram no T2. O fenantreno e fluoreno foram detetados na amostra inicial e diminuíram de abundância no replicado T1. Os compostos anteriormente referidos não foram detetados no replicado T2, podendo ter sido degradados, transformados em outros compostos ou diluídos.

De uma forma geral, para tempos de retenção após os 40 minutos, os COSVs detetados na amostra inicial T, diminuíram de abundância após o ensaio de respirometria. Relativamente às amostras iniciais A e T, foi detectada uma maior variedade de COSV após o ensaio de respirometria.

As variações de pH, CE e E_h nos replicados das amostras A e T após o ensaio de respirometria encontram-se representadas na Tabela 6.6.

Tabela 6.6. Variações de pH, CE e Eh nos replicados das amostras A e T (média ± desvio padrão; n=4)

Amostra	A	A1	A2	T	T1	T2
pH	8,91 ± 0,08	9,05 ± 0,03	9,06 ± 0,06	7,7 ± 0,4	6,92 ± 0,05	6,80 ± 0,07
CE (µS/cm)	206 ± 0,0*	197 ± 4,5	185 ± 1,5	50 ± 1,3	44 ± 1,8	44 ± 2,2
E _h (mV)	121 ± 3,3	135 ± 5,7	125 ± 9,8	247 ± 17,3	215 ± 8,7	225 ± 2,8

*(n=2)

Na amostra T o pH diminuiu após o ensaio de respirometria, e na amostra A observou-se um aumento pouco significativo. Esta diminuição, elevada quando comparada com outras amostras, pode ser devida à correção significativa de humidade, de 0 para 20% (m/m).

Em ambas as amostras a CE diminuiu. Para a amostra T, a diminuição não foi significativa e pode ser devida à correção de humidade ou à diminuição da concentração de alguns iões. A diminuição da CE nos replicados da amostra A pode ser devida à diminuição da concentração de alguns iões. O E_h aumentou nos replicados da amostra A, ainda que ligeiramente, e diminuiu nos da amostra T.

6.4 Caracterização da Bacia 3

As seis amostras provenientes da bacia 3 de lamas oleosas do RESIM foram caracterizadas físico-quimicamente e testadas num ensaio de respirometria. As variações de aniões nas amostras após os ensaios de respirometria não apresentaram resultados coerentes. Pode ter ocorrido um erro relacionado com as diluições das amostras ou com o cromatógrafo iónico.

6.4.1. Caracterização das amostras dos taludes – B e C

A análise dos resultados obtidos para os parâmetros das amostras B e C permitiu-nos avaliar a variação dos parâmetros em duas zonas dos taludes para a mesma profundidade (0-50 cm).

Os resultados da caracterização físico-química das amostras B e C encontram-se representados na Tabela 6.7.

Tabela 6.7. Resultados da caracterização físico-química das amostras B e C (média ± desvio padrão; n=4)

		Solo	B	C
	pH		8,41 ± 0,05	6,99 ± 0,06
	CE (μS/cm)		318 ± 52	40 ± 8
	Eh (mV)		128 ± 2	206 ± 16
	%H		10,0 ± 0,16	2,5 ± 0,34
	M.O. (%)*		1,52 ± 0,50	2,3 ± 1,29
	d (kg/m ³)*		2,40 ± 0,08	2,55 ± 0,01
Textura*	Argila (%)	19,1 ± 5,7	Franco-argilo-arenosa	2,8 ± 0,4
	Silte (%)	13,9 ± 3,4		3,0 ± 0,1
	Areia (%)	66,9 ± 9,1		94,2 ± 0,5
Aniões (mg/kg peso seco)	Cl ⁻		234 ± 52,41	50 ± 14,07
	F ⁻		n.d.	n.d.
	NO ₃ ⁻		26,11 ± 26,11	n.d.
	NO ₂ ⁻		n.d.	n.d.
	SO ₄ ²⁻		203 ± 13,24	28 ± 14,00
	PO ₄ ²⁻		n.d.	n.d.

Legenda: n.d. – Não detetado;

* Ensaio realizados com 3 replicados

A amostra C apresentou pH neutro (6,99) e a amostra B um pH alcalino (8,41). O pH da amostra C é mais favorável à biodegradação dado que é o valor de pH mais propício à atividade microbiana. As CE das duas amostras são muito diferentes, sendo a CE da amostra B (318 μS/cm) aproximadamente oito vezes superior à da amostra C (40 μS/cm). O teor de aniões é concordante com os valores de CE obtidos.

A amostra B possui concentrações mais elevadas de aniões. Esta amostra apresentou uma concentração de nitratos com um desvio padrão da ordem de grandeza da mesma, o que pode dever-se à heterogeneidade da amostra.

O E_h da amostra C é superior ao da amostra B, apesar de a última apresentar concentrações de sulfatos e nitratos, ainda que com desvio padrão na ordem da mesma, superiores à da amostra C, o elevado E_h medido nesta amostra dever-se-á à presença de O₂ ou de outros aniões não determinados na cromatografia iónica.

A %H da amostra B é superior à da amostra C. Esta diferença pode dever-se à classe textural das amostras, enquanto a amostra B é um solo franco-argilo-arenoso, e por isso com maior capacidade de retenção de água, a amostra C é um solo arenoso, mais permeável.

A MO determinada na amostra B é inferior à determinada na amostra C, o que não é coerente com a classe textural das amostras, como referido no sub-capítulo anterior para as amostras A e T. As densidades são semelhantes em ambas as amostras.

As variações de pressão medidas no ensaio de respirometria estão representadas na Figura 6.8.

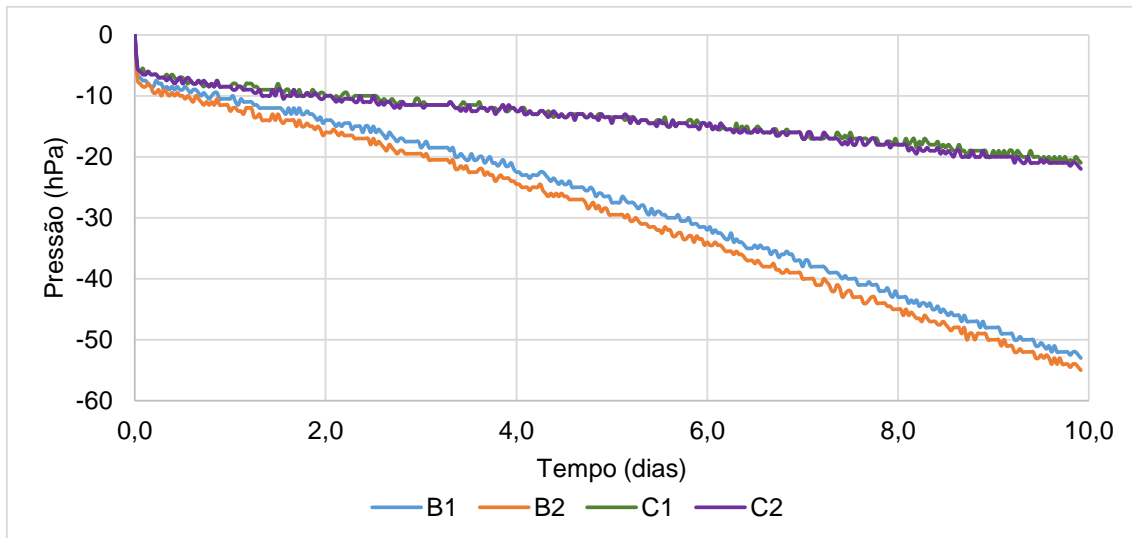


Figura 6.8 Ensaio de respirometria das amostras de taludes B e C com dois replicados

As amostras com humidade corrigida previamente ao ensaio apresentam cinéticas diferentes, mas para a mesma amostra inicial a variação das amostras nos diferentes frascos é idêntica. Os replicados da amostra B, para o mesmo tempo e para a mesma temperatura média, originaram uma depressão muito superior à dos replicados C1 e C2.

Os replicados B1 e B2 geraram uma depressão duas vezes superior (aproximadamente -53 hPa) à gerada pelos replicados C1 e C2 (-20 hPa).

A diminuição de pressão registada no início dos registos deve-se à diferente temperatura das amostras quando se iniciou a medição, visto que os replicados não foram preparados exactamente ao mesmo tempo.

As variações dos COV da amostra B em relação às amostras iniciais estão representadas na Figura 6.9.

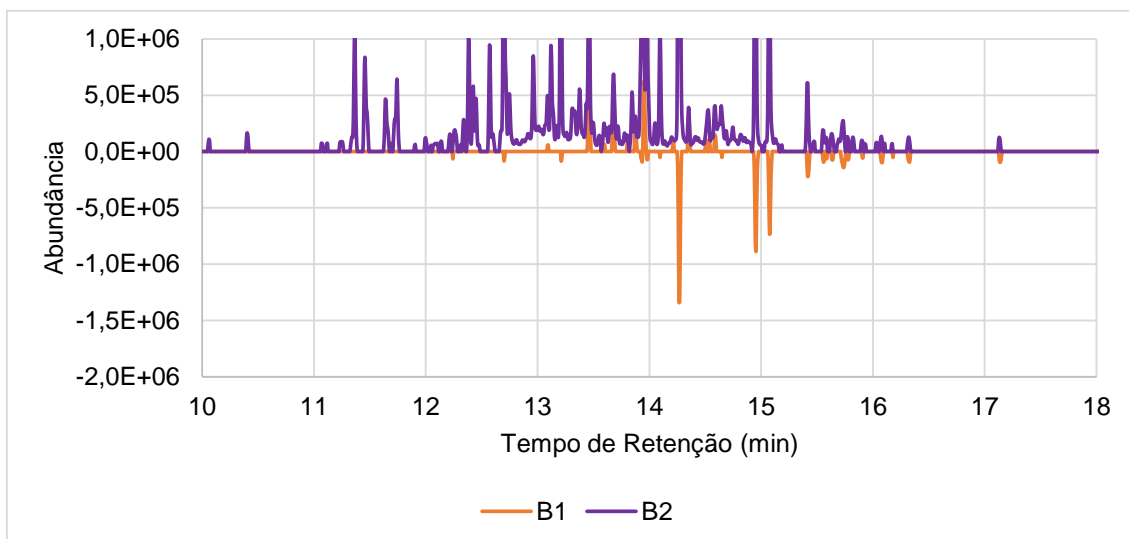


Figura 6.9. Variação da abundância dos COV da amostra B após ensaio de respirometria com dois replicados

Os replicados B1 e B2, apesar de terem apresentado um comportamento muito semelhante no ensaio de respirometria, apresentam variações de COV muito diferentes entre si. O replicado B2 apresenta variações positivas de abundância de todos os COV. Alguns compostos do replicado B1 aumentaram a sua abundância enquanto outros diminuíram.

Pela observação da figura pode concluir-se que os mesmos COV, nos mesmos tempos de retenção, aumentaram a sua abundância num replicado e diminuíram no outro.

Na Tabela 6.8 estão representados alguns dos COV detetados em ambos os replicados da amostra B. No replicado B1 os compostos apresentados na tabela diminuíram a sua abundância relativamente à amostra inicial, no replicado B2 ocorreu o oposto. Devido ao diferente comportamento dos replicados não se podem retirar conclusões acerca dos COV após o ensaio de respirometria da amostra B. Nas amostras A e T, em todos os replicados, os mesmos COVs diminuíram na sua abundância após o ensaio.

Tabela 6.8. COV detetados em ambos os replicados da amostra B e tempos de retenção

TR (min)	Nome
13,21	Indeno
13,46	3a,4,5,6,7,7a-Hexahidro-4,7-metanoindeno
14,26	Naftaleno
14,95	Naftaleno, 2-metil
15,08	Naftaleno, 1-metil

As variações dos COV da amostra C em relação às amostras iniciais estão representadas na Figura 6.10.

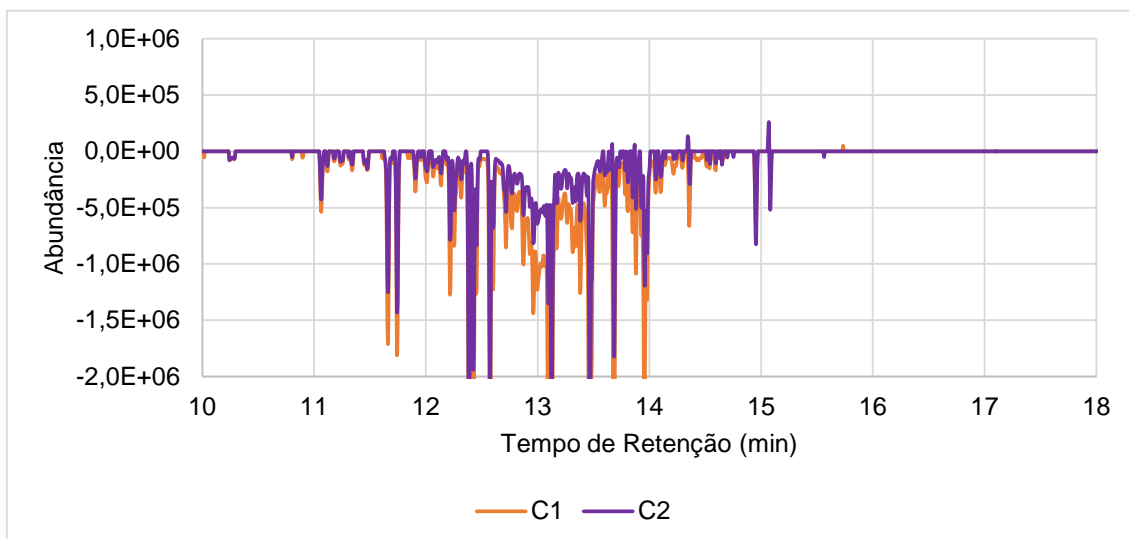


Figura 6.10. Variação da abundância dos COV da amostra C após ensaio de respirometria com dois replicados

Os replicados da amostra C apresentaram variações semelhantes. A grande parte das variações registadas foram negativas. A amostra C gerou uma menor depressão no ensaio de respirometria e as variações de COV foram negativas, significando que ou não foram detetados nas amostras finais ou detetados em menor abundância.

Relacionando as variações registadas no ensaio de respirometria com as variações dos COV das amostras B e C, a menor depressão originada pela última amostra pode ser devida à volatilização dos COV para a fase gasosa dos OxiTop. Ao serem volatilizados, os COV podem atenuar a diminuição de pressão gerada, justificando a menor depressão registada na amostra C, com as diminuições de abundância detetadas.

Na Tabela 6.9 estão representados alguns dos COV cuja abundância diminuiu mais significativamente em ambos os replicados da amostra C.

Tabela 6.9. COV detetados em ambos os replicados da amostra B e tempos de retenção

TR (min)	Nome
11,66	Biciclo[2.2.1]hept-2-eno, 5-etenil-
11,74	Benzeno, 1,3-dimetil-
12,57	Benzeno, 1-etil-2-metil-
13,12	Indano
13,46	3a,4,5,6,7,7a-Hexahidro-4,7-metanoindeno
13,68	4,7-Metano-1H-indeno, octahidro-
13,95	Triciclo[5.2.1.0(2,6)]dec-4-eno, 4-metil-

O composto 3a,4,5,6,7,7a-Hexahidro-4,7-metanoindeno é um dos compostos que diminuíram de abundância nas amostras A e T, o que pode significar que é mais volátil ou que é fácil e rapidamente biodegradado pelos microrganismos presentes nas amostras.

Os COV apresentados na tabela diminuíram na sua abundância em ambos os replicados. As variações dos COV para as amostras C e B após os ensaios de respirometria apresentaram variações diferentes. Para os replicados C1 e C2 as figuras apresentam perdas significativas dos

COV relativamente à amostra inicial. Para os replicados B1 e B2, as variações não são concordantes. No replicado B2 a abundância de todos os COV, detetados no início e no final do ensaio de respirometria, aumentou.

As variações dos COSV das amostras B e C, relativamente à amostras iniciais, estão representados na Figura 6.11 e 6.12, respectivamente.

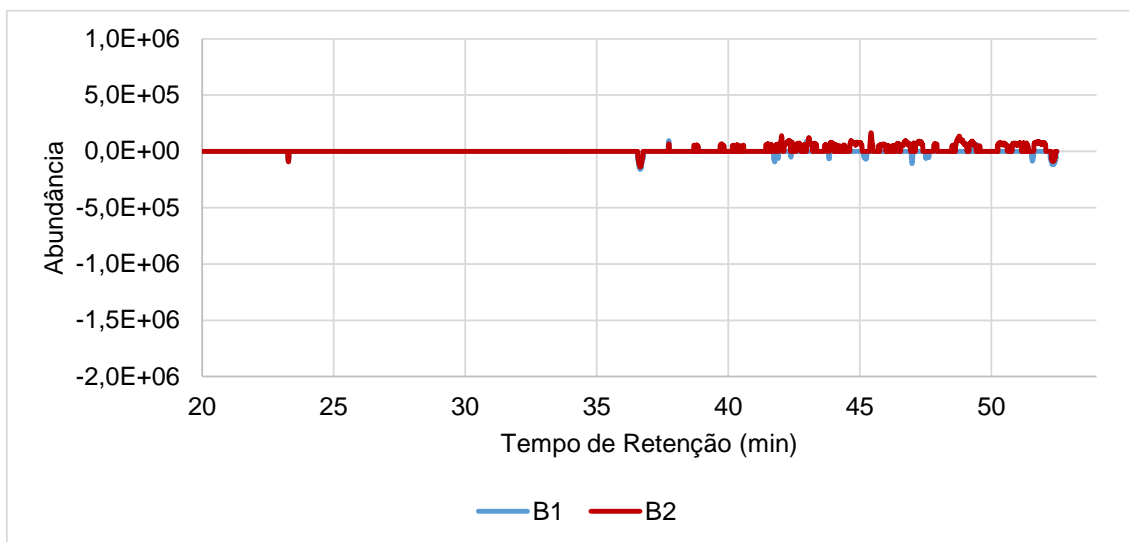


Figura 6.11. Variação da abundância dos COSV da amostra B após ensaio de respirometria com dois replicados

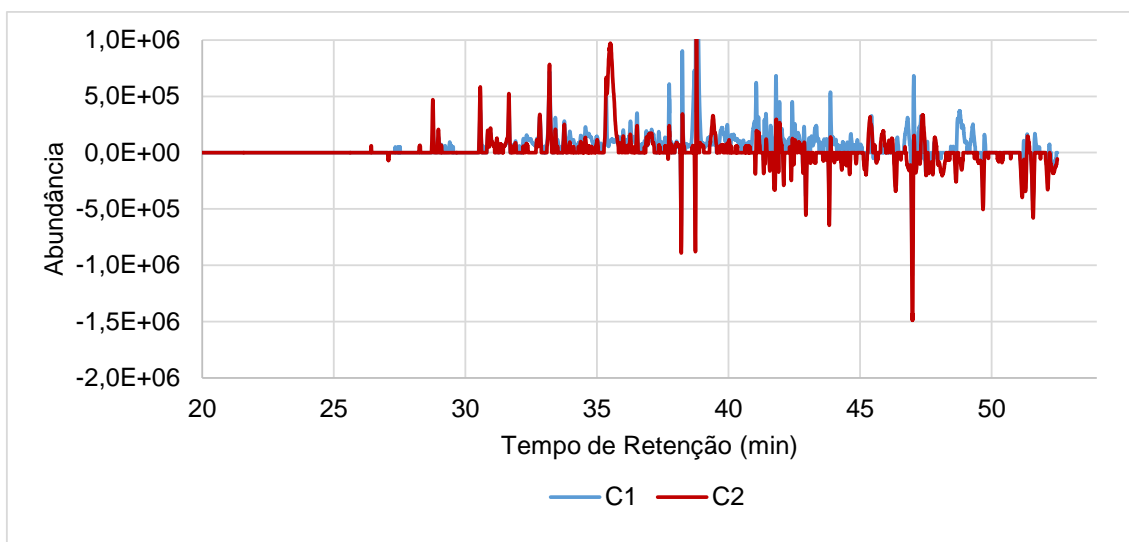


Figura 6.12. Variação da abundância dos COSV da amostra C após ensaio de respirometria com dois replicados

A amostra B não apresentou variações significativas nas abundâncias dos COSV em ambos os replicados. Os COSV não diminuíram ou aumentaram significativamente durante o ensaio, o que pode justificar a conclusão obtida anteriormente, que a menor depressão registada para a

amostra B pode estar relacionada não com a biodegradação dos COVs mas sim com a sua volatilização para a fase gasosa.

A amostra C, apesar de ter provocado um menor decréscimo de pressão, apresentou maiores variações nas abundâncias dos COSV do que a amostra B. Os replicados da amostra C não apresentaram variações semelhantes. Na Tabela 6.10 estão representados alguns dos COSV detetados nos replicados da amostra C, cuja abundância variou. Os compostos identificados na tabela diminuíram na sua abundância no replicado C2 e aumentaram no replicado C1.

Tabela 6.10. COSV detetados em ambos os replicados da amostra C e tempos de retenção

TR (min)	Nome
38,23	Naftaleno, 1-metil-
43,86	Acenafteno
47,02	Fluoreno

As variações de pH, CE e E_h nas amostras após o ensaio de respirometria encontram-se representados na Tabela 6.11.

Tabela 6.11. Variações de pH, CE e E_h nos replicados das amostras B e C (média \pm desvio padrão; n=4)

Amostra	B	B1	B2	C	C1	C2
pH	8,41 \pm 0,05	7,93 \pm 0,06	7,88 \pm 0,08	6,99 \pm 0,06	6,64 \pm 0,15	6,62 \pm 0,16
CE (μ S/cm)	318 \pm 51,9	310 \pm 7,9	292 \pm 19,0	40 \pm 7,8	31 \pm 2,6	39 \pm 1,2
E_h (mV)	127 \pm 2,1	219 \pm 6,1	194 \pm 5,1	206 \pm 16,2	238 \pm 7,3	235 \pm 1,4

Para ambas as amostras, o pH, após o ensaio de respirometria, diminuiu ligeiramente, o que pode ser devido à correção de humidade.

A CE da amostra B diminuiu ligeiramente, nos dois replicados, após o ensaio. Para a amostra C verificou-se o mesmo comportamento. Este decréscimo dos valores médios da CE nas amostras pode dever-se, como no caso do pH, à correção de humidade, diluição dos iões em solução.

A variação de E_h para ambas as amostras não seguiu o mesmo padrão. Na amostra B o E_h diminuiu nos dois replicados. Este decréscimo pode dever-se à diminuição da concentração de SO_4^{2-} , potenciais aceptores de electrões em reacções redox, ou à adição de humidade, que pode reduzir a difusão de oxigénio.

6.4.2. Caracterização das amostras da zona basal a diferentes profundidades – E e F

A da caracterização das amostras E e F permitiu-nos avaliar a variação dos parâmetros em profundidade para a mesma célula da base da bacia.

Os resultados da caracterização físico-química das amostras estão representados na Tabela 6.12

Tabela 6.12. Resultados da caracterização físico-química das amostras E e F (média ± desvio padrão; n=4)

Solo		E	F
	pH	6,22 ± 0,09	5,5 ± 0,25
	CE (μS/cm)	134 ± 5	164 ± 8
	Eh (mV)	196 ± 10	250 ± 11
	%H	6,2 ± 0,17	6,7 ± 0,45
	M.O. (%)*	2,0 ± 0,74	0,7 ± 0,49
	d (kg/m ³)*	2,51 ± 0,06	2,50 ± 0,07
Textura*	Argila (%)	52,4 ± 8,1	40,6 ± 5,9
	Silte (%)	0,0 ± 0,0 Argilo-arenosa	0,0 ± 0,0 Argilo-arenosa
	Areia (%)	47,6 ± 8,1	59,4 ± 5,9
Aniões (mg/kg peso seco)	Cl ⁻	131 ± 14,26	168 ± 15,39
	F ⁻	n.d.	n.d.
	NO ₃ ⁻	n.d.	n.d.
	NO ₂ ⁻	n.d.	n.d.
	SO ₄ ²⁻	123 ± 13,55	158 ± 7,61
	PO ₄ ²⁻	n.d.	n.d.

Legenda: n.d. – Não detetado;

* Ensaio realizados com 3 replicados

A amostra F (5,5) apresenta um pH inferior ao da amostra E (6,22), na gama ótima de pH. As amostras não apresentaram grande diferença na CE, o que também é sustentado pelas concentrações de aniões das amostras, que também não apresentam grande diferença e são mais elevados na amostra F.

O E_h é superior na amostra F, apesar de esta ser a amostra de maior profundidade. Isto pode dever-se à maior concentração de sulfatos, potenciais aceitadores de electrões em reações redox (ICSCS, 2006). A humidade é ligeiramente superior na amostra mais profunda, amostra F. Ambas as amostras são solos argilo-arenosos de densidade semelhante. A amostra E apresenta um maior teor de MO, o que pode dever-se à menor profundidade da amostra.

Os resultados do ensaio de respirometria das amostras E e F encontra-se representado na Figura 6.13.

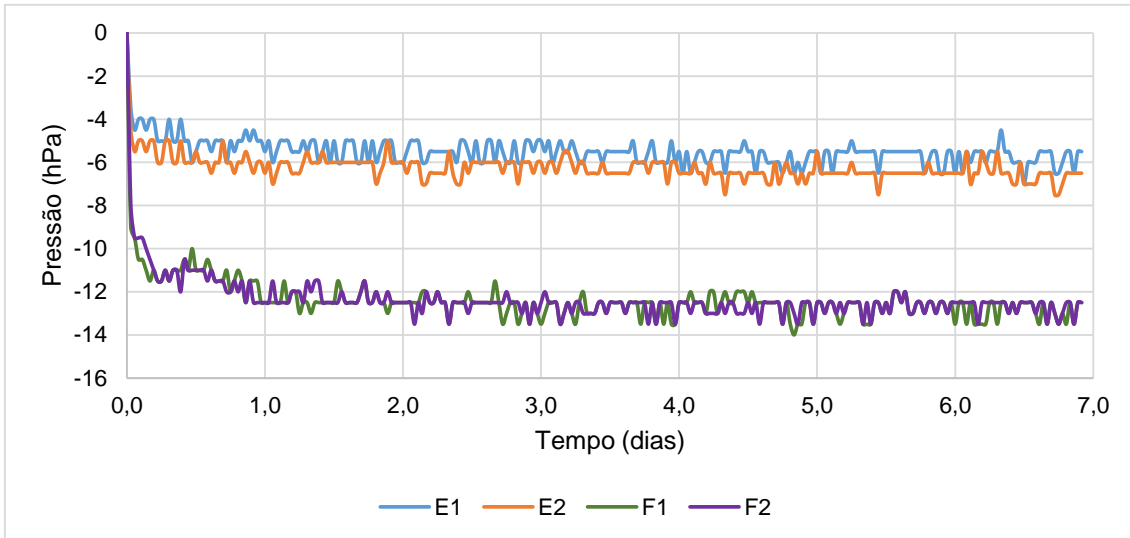


Figura 6.13. Ensaio de Respirometria das amostras E e F com dois replicados

As amostras E e F apresentaram um comportamento semelhante, não registrando diminuição de pressão mensurável durante o ensaio. A diminuição de pressão inicial está relacionada com a diferença de temperatura dos replicados no início dos registros. Isto aconteceu para a maioria das amostras.

As variações das abundâncias dos COV da amostra E encontram-se representadas na Figura 6.14.

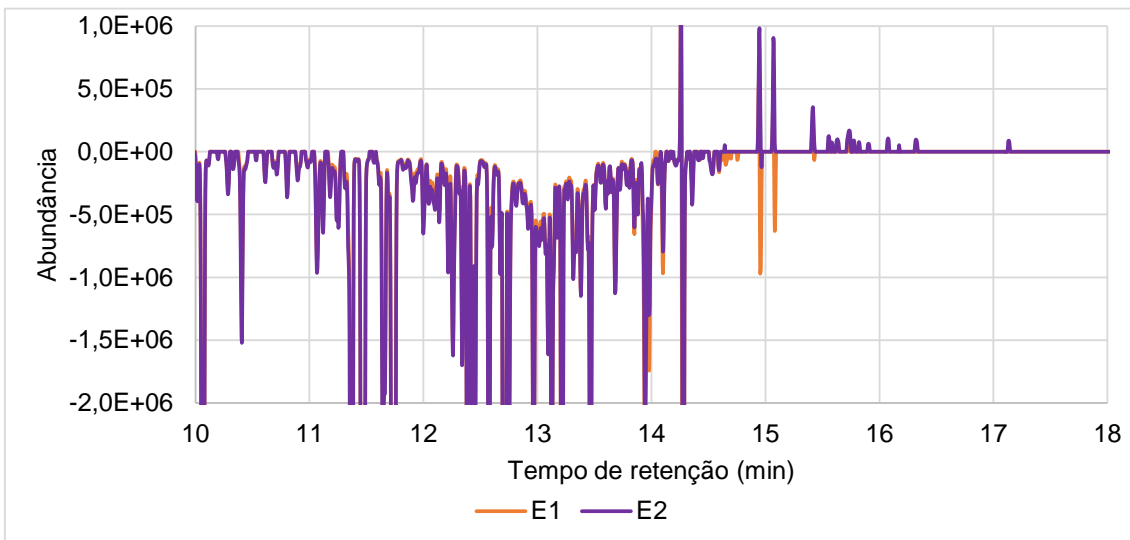


Figura 6.14. Variação da abundância dos COV da amostra E após ensaio de respirometria com dois replicados

A amostra E apresentou diminuições significativas das abundâncias dos COV, relativamente à amostra inicial, após o ensaio de respirometria. Apesar dos resultados do ensaio de

respirometria, que não apresentaram atividade microbiana mensurável, ocorreram variações na abundância dos COV detetados na amostra inicial.

A observação dos resultados do ensaio de respirometria e das variações de COV permitiu concluir que é provável que as amostras não produziram uma diminuição de pressão devido à volatilização dos COV, e não por não ter ocorrido atividade microbiana.

Na Tabela 6.13 encontram-se representados alguns COV cuja abundância variou significativamente da amostra E após o ensaio de respirometria. Os compostos identificados na tabela indicam que a amostra E poderá estar contaminada por compostos BTEX. Todos os compostos apresentados na tabela, à exceção do 2-metil naftaleno, diminuíram a sua abundância após o ensaio de respirometria.

Tabela 6.13. COV detetados em ambos os replicados da amostra E e tempos de retenção

TR (min)	Nome
10,06	Tolueno
11,37	Etilbenzeno
11,46	p-Xileno
13,21	Indeno
14,27	Naftaleno
14,95	2-metil naftaleno

As variações das abundâncias dos COV da amostra E encontram-se representadas nas Figuras 6.15.

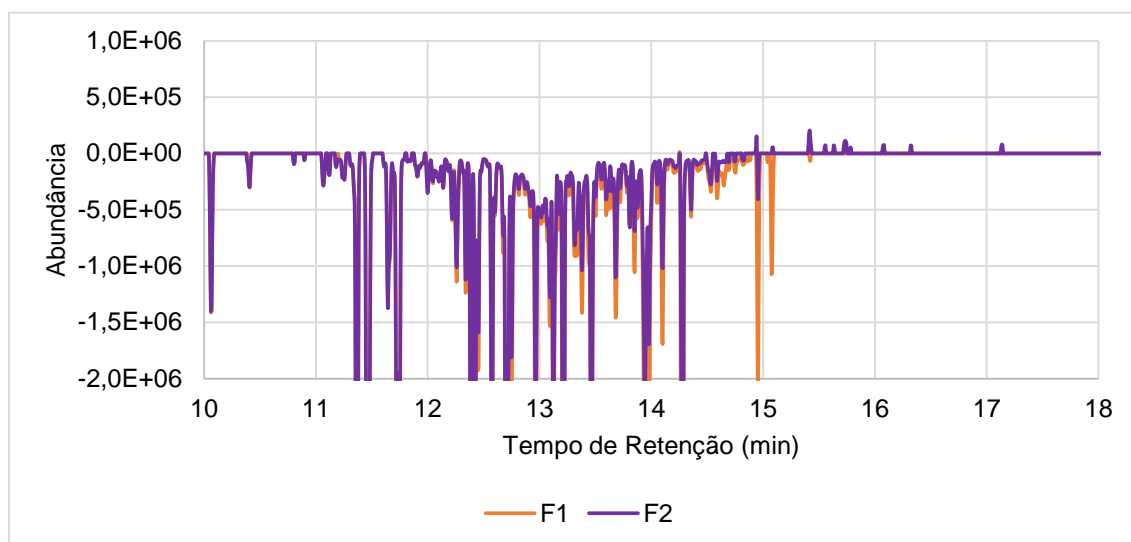


Figura 6.15. Variação da abundância dos COV da amostra F após ensaio de respirometria com dois replicados

Os replicados F1 e F2 apresentaram variações semelhantes. A grande maioria dos compostos diminuiu a sua abundância relativamente à amostra inicial. As variações são semelhantes às da amostra E, que coincide com a localização das amostras na bacia e com os resultados da respirometria.

A amostra F é uma amostra recolhida em maior profundidade e subjacente à amostra E. Pela observação das variações dos COV dos replicados de ambas as amostras, é perceptível e coerente que as variações sejam semelhantes.

As variações das abundâncias dos COV, nos replicados de cada amostra, são semelhantes. A maior parte dos COV, identificados nas amostras inicial e após os ensaios de respirometria, apresentam uma diminuição da sua abundância.

Na Tabela 6.14 encontram-se representados alguns COV cuja abundância diminuiu significativamente da amostra F após o ensaio de respirometria. O tolueno foi identificado na amostra inicial mas não nos replicados após o ensaio de respirometria, podendo ter sido degradado, transformado noutro composto ou volatilizado para a fase gasosa do frasco.

Tabela 6.14. COV detetados em ambos os replicados da amostra F e tempos de retenção

TR (min)	Nome
11,36	Etilbenzeno
12,70	Benzeno, 2-propenil-
13,21	Indeno
14,27	Naftaleno
14,95	Naftaleno, 2-metil

As variações das abundâncias dos COSV da amostra E encontram-se representados na Figuras 6.16.

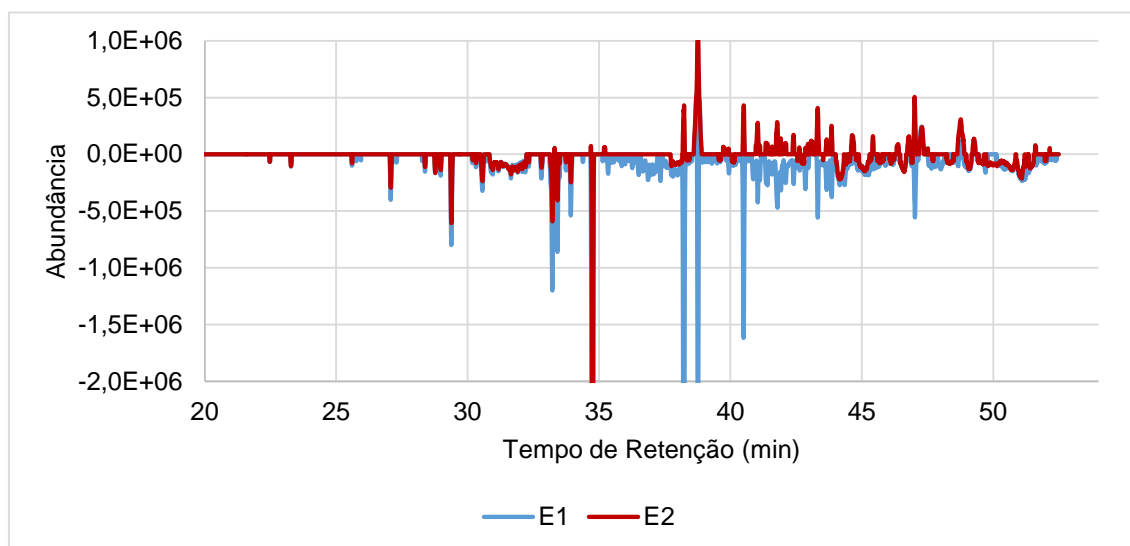


Figura 6.16. Variação da abundância dos COSV da amostra E após ensaio de respirometria com dois replicados

As variações dos COSV da amostra E apresentam comportamento semelhante até aos 35 minutos de tempo de retenção. Isto pode significar que uma gama de compostos apresentou o mesmo comportamento em ambos os replicados.

Os replicados apresentaram variações opostas após os 35 minutos. No replicado E1 as abundâncias dos COV detetados diminuíram e no replicado E2 aumentaram para a maioria dos compostos.

Na Tabela 6.15 estão representados alguns dos COSV detetados em ambos os replicados da amostra E.

Tabela 6.15. COSV detetados em ambos os replicados da amostra E e tempos de retenção

TR (min)	Nome
34,72	Naftaleno
38,21	Naftaleno, 2-metil-
40,48	Bifenilo

Dos compostos identificados na tabela apenas o naftaleno diminuiu a sua abundância em ambos os replicados. O naftaleno e o bifenilo aumentaram a sua abundância no replicado E2 e diminuíram no replicado E1. Na determinação dos COSV por GC-MS da amostra E foi detetado um elevado número de compostos. Foram detetados muitos compostos BTEX e PAH.

As variações das abundâncias dos COSV da amostra F encontram-se representados na Figura 6.17.

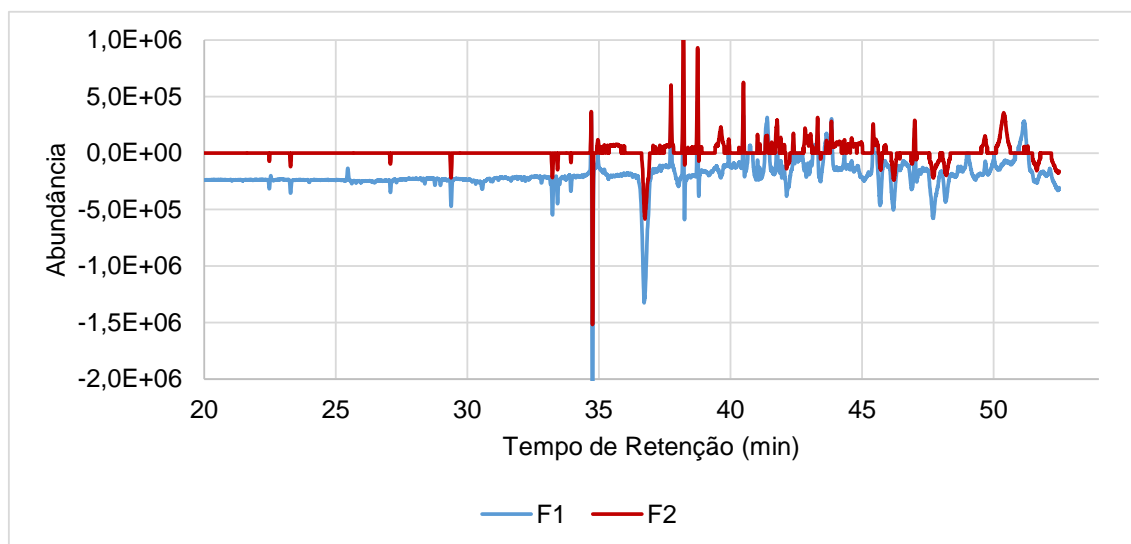


Figura 6.17. Variação da abundância dos COSV da amostra F após ensaio de respirometria com dois replicados

Os replicados da amostra F apresentaram um comportamento semelhante aos da amostra E. No replicado F1 a maioria dos COSV diminuíram a sua abundância. A grande parte dos COSV

detetados no replicado F2 aumentaram a sua abundância, relativamente à amostra inicial. Os resultados do ensaio de respirometria não são coerentes com as variações detetadas nos COSV e COV das amostras em estudo.

O ensaio de respirometria não apresentou atividade microbiana mensurável, apesar disto, foram detetadas variações significativas nos compostos detetados nas amostras após o ensaio. Na Tabela 6.16 estão representados alguns dos COSV detetados em ambos os replicados da amostra F.

Tabela 6.16. COSV detetados em ambos os replicados da amostra F e tempos de retenção

TR (min)	Nome
34,73	Naftaleno
36,70	Fenantreno
38,23	Naftaleno, 2-metil-

O fenantreno foi detetado na amostra inicial mas diminuiu a sua abundância no replicado F2 e não foi detetado no replicado F1. Na amostra F inicial foi detetado um menor número de COSV relativamente à amostra E.

As variações de pH, CE e E_h nos replicados das amostras E e F, após o ensaio de respirometria, encontram-se representados na Tabela 6.17.

Tabela 6.17. Variações de pH, CE e E_h nos replicados das amostras E e F (média \pm desvio padrão; n=4)

Amostra	E	E1	E2	F	F1	F2
pH	6,22 \pm 0,09	6,15 \pm 0,01	5,91 \pm 0,4	5,46 \pm 0,3	5,35 \pm 0,1	5,49 \pm 0,08
CE (μ S/cm)	134 \pm 5,1	103 \pm 3,9	110 \pm 19,3	164 \pm 7,8	130 \pm 5,0	133 \pm 4,7
E_h (mV)	196 \pm 10,4	261 \pm 9,3	251 \pm 7,5	250 \pm 10,8	287 \pm 17,1	290 \pm 11,4

O pH de ambas as amostras diminuiu ligeiramente após o ensaio de respirometria. A CE também diminuiu, esta diminuição pode dever-se à adição de humidade às amostras.

O E_h dos replicados de ambas as amostras aumentou após o ensaio de respirometria. Não possuindo os valores de concentração finais de possíveis aceitadores de electrões é difícil concluir algo relacionado com o E_h e CE.

6.4.3. Caracterização das amostras da zona basal de diferentes células – D e G

As amostras D e G pertencem a diferentes células e diferentes profundidades da zona basal da bacia 3. Os resultados da caracterização físico-química das amostras D e G estão representados na Tabela 6.18.

Tabela 6.18. Resultados da caracterização físico-química das amostras D e G (média ± desvio padrão; n=4)

Amostra		D	G
	pH	8,89 ± 0,05	4,9 ± 0,27
	CE (µS/cm)	299 ± 16	180 ± 39
	Eh (mV)	152 ± 5	313 ± 9
	%H	15,0 ± 0,72	7,9 ± 0,20
	M.O. (%)*	1,9 ± 0,85	0,3 ± 0,42
	d (kg/m ³)*	2,28 ± 0,05	2,39 ± 0,03
Textura*	Argila (%)	28,1 ± 6,4	Franco-argilo-arenosa
	Silte (%)	12,2 ± 2,4	
	Areia (%)	59,7 ± 7,6	
Aniões (mg/kg peso seco)	Cl ⁻	215 ± 38,26	199 ± 34,89
	F ⁻	n.d.	n.d.
	NO ₃ ⁻	n.d.	n.d.
	NO ₂ ⁻	n.d.	n.d.
	SO ₄ ²⁻	45 ± 7,19	139 ± 20,36
	PO ₄ ²⁻	n.d.	n.d.

Legenda: n.d. – Não detetado;

* Ensaio realizados com 3 replicados

A amostra G apresentou pH ácido (4,9) e a amostra D um pH alcalino. Em ambientes ácidos a disponibilidade de alguns catiões tóxicos para os microrganismos, como o alumínio, aumenta, podendo condicionar a biodegradação dos contaminantes (Bolan *et al.*, 2005). A %H da amostra D é muito superior à determinada na amostra G. Não se tendo determinado a classe textural da última, por falta de amostra, é difícil tirar conclusões acerca da capacidade de retenção de água bem como de alguns resultados obtidos para outros parâmetros como o teor de aniões, MO e CE.

A CE determinada para a amostra D é muito superior à da amostra G, apesar de esta apresentar uma concentração média de SO₄²⁻ superior. Os valores determinados para este parâmetro podem ser influenciados pela textura do solo. O solo G poderá ser um solo mais arenoso do que o D, o que pode justificar as menores CE, %H, MO e o E_h determinados. O E_h da amostra G é superior ao da amostra D, mesmo sendo a última uma amostra de menor profundidade. A amostra G foi recolhida entre os 100-150 cm e a amostra D entre os 10-60 cm. O elevado E_h determinado na amostra G, relativamente à amostra D, pode dever-se ao teor de SO₄²⁻, mais elevado na primeira.

O teor em MO da amostra D é superior ao da G, o que pode ser explicado pela profundidade a que foram recolhidas as amostras. A MO encontra-se, maioritariamente, nas camadas mais superficiais do solo, diminuindo o seu teor em profundidade (Da Costa, 2011).

A amostra D apresentou resultados mais favoráveis à atividade microbiana, à biodegradação dos compostos presentes, do que a amostra G. As variações de pressão registadas nos ensaios de respirometria das amostras D e G encontram-se representados na Figura 6.18.

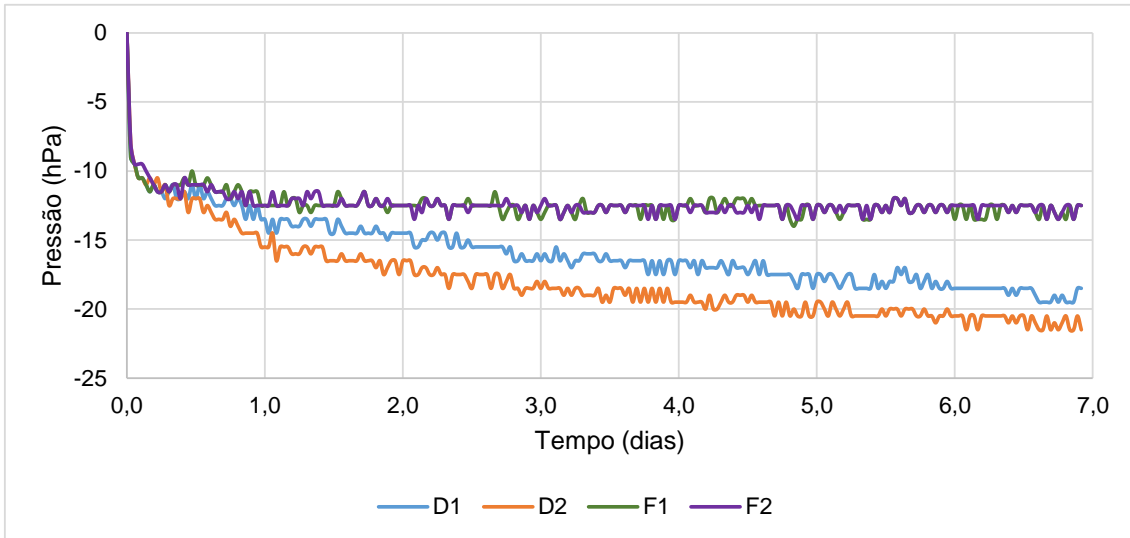


Figura 6.18. Ensaio de Respirometria das amostras G e D com dois replicados

Os replicados da amostra D geraram uma maior depressão do que os da amostra G. Esta amostra não provocou diminuição, e no final do ensaio a pressão aumentou ligeiramente. Os resultados da caracterização físico-química da amostra G evidenciaram um fraco potencial para a biodegradação, que pode explicar os resultados obtidos no ensaio.

As variações das abundâncias dos COV da amostra D, estão representadas na Figura 6.19.

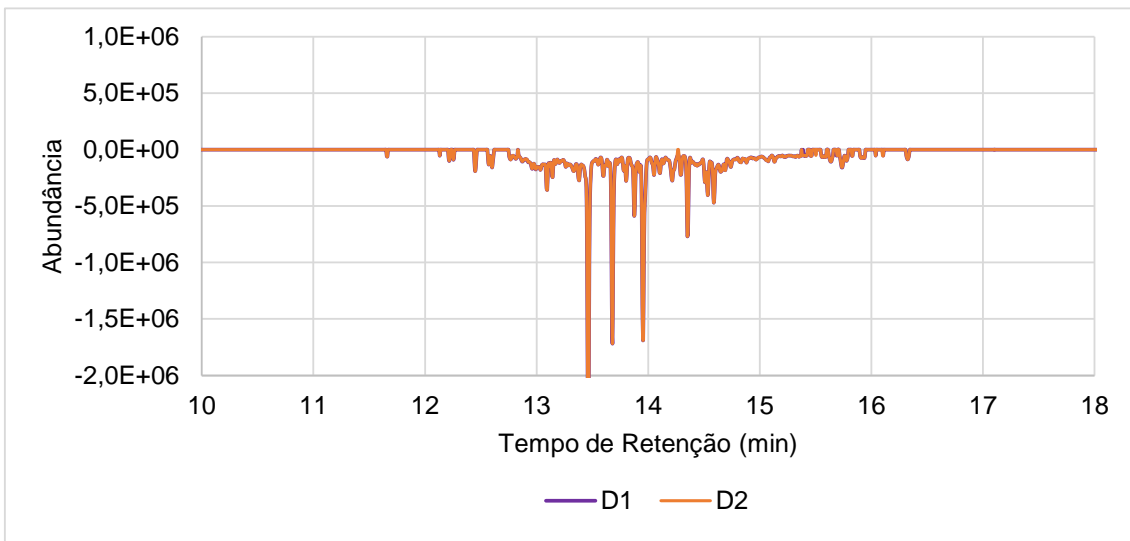


Figura 6.19. Variação da abundância dos COV da amostra D após ensaio de respirometria com dois replicados

As variações dos COV dos replicados da amostra D são iguais. Todos os COVs detetados na amostra inicial foram reduzidos na sua abundância após o ensaio de respirometria. Muitos dos COV detetados na amostra inicial não foram detetados nos replicados após o ensaio. Isto pode significar que foram degradados, transformados ou volatilizados para a fase gasosa dos *OxiTop*. Na Figura 6.20 estão representadas as variações relativas à amostra G.

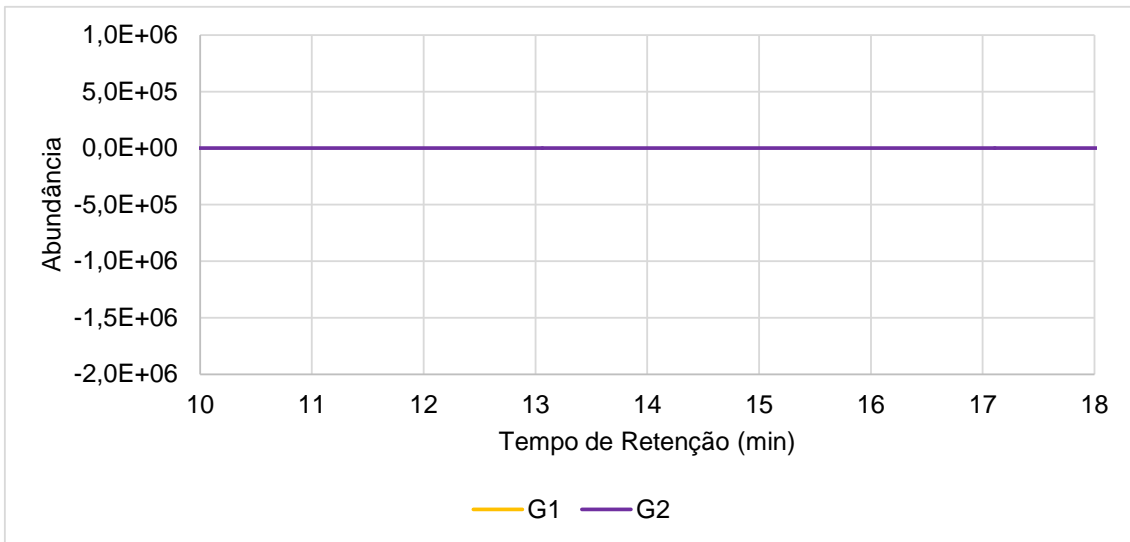


Figura 6.20. Variação da abundância dos COV da amostra G após ensaio de respirometria com dois replicados

Na amostra G não foram detetados COV, o que pode corroborar os resultados do ensaio de respirometria, e não foram determinados os COSV por falta de amostra. As variações das abundâncias dos COSV da amostra D em relação à amostra inicial encontram-se representadas na Figura 6.21.

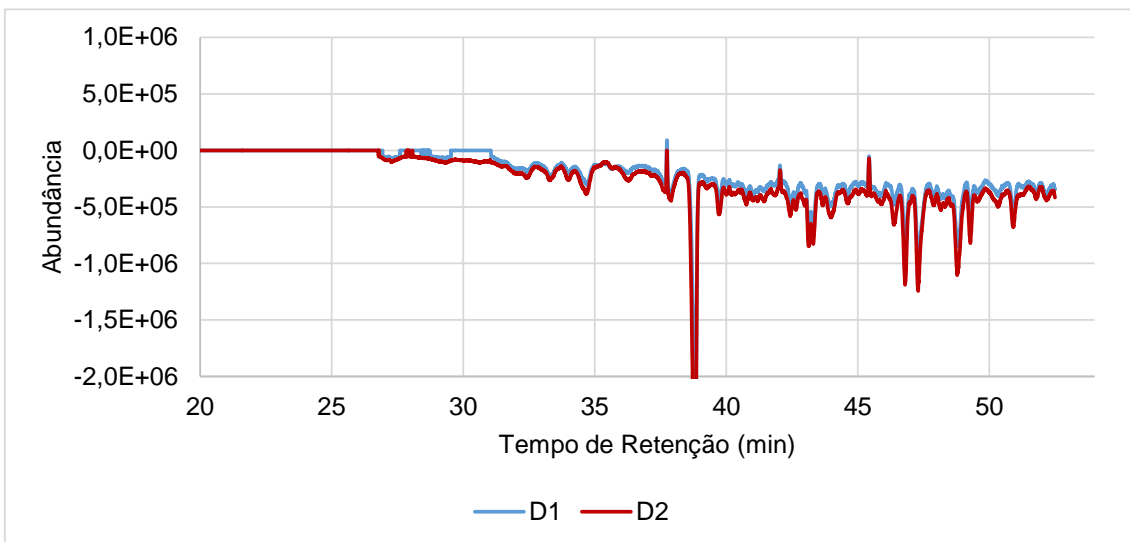


Figura 6.21. Variação da abundância dos COSV da amostra D após ensaio de respirometria com dois replicados

Nos replicados D1 e D2, a variação detetada aos 38,8 minutos é relativa ao fenantreno. Este composto foi detetado somente amostra inicial, o que pode indicar que este composto foi degradado ou transformado em outro composto.

A grande parte dos compostos diminuíram a sua abundância após o ensaio de respirometria. As variações nos dois replicados são semelhantes. Os resultados obtidos para as variações dos

COSV e COV para ambas as amostras, D e G, refletem os resultados obtidos no ensaio de respirometria. Não se tendo detectado qualquer atividade microbiana na amostra G, não foram detectadas variações nos compostos em análise. A amostra D apresentou atividade microbiana e foram detectadas variações dos compostos que corroboram o ensaio de respirometria.

As variações dos parâmetros pH, CE e E_h , de ambas as amostras, após o ensaio de respirometria encontram-se representadas na Tabela 6.19.

Tabela 6.19. Variações de pH, CE e E_h nos replicados das amostras D e G (média \pm desvio padrão; n=4)

Amostra	D	D1	D2	G	G1	G2
pH	8,89 \pm 0,05	9,24 \pm 0,05	9,28 \pm 0,04	4,88 \pm 0,27	5,15 \pm 0,12	5,23 \pm 0,01
CE (mS/cm)	299 \pm 16,4	248 \pm 22,1	262 \pm 11,8	180 \pm 38,6	111,7 \pm 0,6	108 \pm 3,6
E_h (mV)	152 \pm 4,7	148 \pm 14,7	145 \pm 14,7	313 \pm 9,4	318 \pm 5,2	319 \pm 3,9

O pH das amostras não variou significativamente quando observamos o valor do desvio padrão. O E_h das amostras após o ensaio de respirometria não sofreu variações significativas. Na amostra D o E_h diminuiu e na amostra G aumentou ligeiramente.

As amostras B e C foram utilizadas para comparar taludes à mesma profundidade e as amostras E e F para comparar diferentes profundidades na mesma célula. Com as amostras E e G comparam-se amostras de diferentes células para a mesma profundidade e com as amostras G e D diferentes células.

As amostras E e G são ambas da zona basal e foram recolhidas à mesma profundidade. Estas amostras não apresentaram atividade microbiana mensurável, mas as variações da abundância de compostos foram muito diferentes. Na amostra E observaram-se grandes variações de abundância dos COV em relação à amostra inicial ao contrário da amostra G. Porém a amostra G apresentou resultados na caracterização físico-química menos favoráveis e não apresentou variações de abundância de COV.

7. Conclusões

O trabalho realizado permitiu caracterizar qualitativamente amostras de solo provenientes das bacias de lamas oleosas do RESIM e avaliar a sua contaminação e o seu potencial de atenuação natural. Foi realizada uma caracterização físico-química de amostras de solo endógeno das bacias, da camada impermeabilizante, de um talude, de localizações desconhecidas, e amostras da bacia 3. A caracterização das amostras do talude e camada impermeabilizante de localização desconhecida e as amostras da bacia 3 foi realizada, para a maioria dos parâmetros, antes e após um ensaio de respirometria manométrico. Esta caracterização permitiu-nos avaliar as variações dos parâmetros analisados ocorridas durante um intervalo de tempo em ambiente controlado de modo a verificar se ocorriam processos de atenuação natural.

A determinação de COSV e COV das amostras de solo foi realizada pelo método GC-MS. Os resultados revelaram a presença de contaminantes na maioria das amostras. Os compostos, ou seus derivados, detetados na maioria das amostras foram o naftaleno e compostos BTEX, principalmente benzenos. Estes compostos são indicadores de contaminação por produtos do petróleo. As amostras de solo apresentaram potenciais de biodegradação diferentes.

Os resultados dos ensaios de respirometria nem sempre refletiram as variações de compostos relativamente às amostras iniciais. Amostras que geraram elevada diminuição de pressão nos ensaios não apresentaram variações significativas nos compostos detetados, relativamente à amostra inicial. Por outro lado, amostras em que não foi detetada atividade microbiana mensurável nos ensaios de respirometria, apresentaram grandes variações de abundância dos compostos detetados. Esta discrepância pode ser explicada pela volatilização dos COV das amostras para a fase gasosa dos *OxiTop*.

As maiores diminuições de abundância dos COV correspondem a amostras que não provocaram diminuição, ou produziram apenas uma diminuição ligeira, da pressão nos ensaios. A análise dos resultados da respirometria deve ser apoiada pelos resultados das variações dos COV das amostras. Dado que os COV podem diminuir na amostra devido à sua biodegradação ou à sua volatilização para a fase gasosa, a análise das variações de abundância dos COSV permitem uma análise mais precisa da biodegradação dos compostos. O método de respirometria utilizado não se mostrou apropriado para a determinação da respiração microbiana das amostras em estudo. A volatilização de compostos influencia os resultados obtidos, isto pode significar os resultados de ensaios de respirometria utilizando o sistema *OxiTop* para amostras de solo contendo COV podem não reproduzir a respiração microbiana real.

Na amostra T só foi registada atividade microbiana após correção de humidade, de aproximadamente 0 para 20% (m/m), demonstrando assim que a humidade é um dos parâmetros que mais influencia a atividade microbiana de um solo. A amostra A, mesmo não tendo sido adicionada humidade, apresentou uma diminuição de pressão considerável.

As amostras dos taludes da bacia 3 apresentaram comportamentos diferentes na variação dos parâmetros físico-químicos determinados após os ensaios de respirometria. Das amostras provenientes da bacia 3, a amostra B, de um talude a 0-50 cm de profundidade, provocou o maior decréscimo de pressão no ensaio de respirometria. Porém não foram registadas variações significativas de COV e pouco se pôde concluir das variações dos COSV.

As amostras provenientes da mesma célula, mas de diferentes profundidades, apresentaram alterações semelhantes nos parâmetros físico-químicos e nos COSV e COV. A amostra G, da zona basal da bacia a 100-150 cm, não apresentou atividade microbiana nem variações da abundância de COV. A caracterização físico-química, realizada previamente ao ensaio de respirometria, apresentou resultados que não favorecem a atividade microbiana do solo. A

amostra E, recolhida à mesma profundidade da amostra G, apresentou resultados nas variações de COV muito significativas.

Para a mesma célula as amostras E e F, a profundidades de 100-150 cm e 150-200 cm respectivamente, apresentaram variações de pH, CE, E_h e da abundância de COVs e COSVs semelhantes. Este fato pode indicar que a população microbiana em ambas as amostras é semelhante.

À exceção da amostra T, o pH das amostras não sofreu variações significativas após os ensaios de respirometria. Para os parâmetros físico-químicos CE e E_h não foram observadas as mesmas tendências nas diferentes amostras.

Os valores médios de CE de todas as amostras diminuiu após os ensaios de respirometria. Este decréscimo pode estar relacionado, à exceção da amostra A, à correção de humidade que pode diluir os iões.

Os resultados permitiram confirmar a presença de contaminação por TPHs. Os compostos detetados na generalidade das amostras foram compostos BTEX, naftaleno e outros PAHs. A distribuição espacial dos contaminantes difere nas diferentes células, taludes e em profundidade.

Apenas com adição de humidade foi possível verificar a ocorrência de processos de atenuação natural nas amostras provenientes da bacia 3 das bacias de lamas oleosas da RESIM.

8. Trabalho Futuro

Em trabalhos futuros deveria proceder-se à caracterização química, física e toxicológica dos compostos voláteis e semi-voláteis detetados nas amostras de solo, antes e após os ensaios de respirometria, e determinadas as suas concentrações. É importante determinar as propriedades de cada composto de maneira a prever o seu comportamento e distribuição no solo, e aferir se os compostos formados ou transformados após a biodegradação, são mais tóxicos e/ou móveis do que os compostos que lhes deram origem. Poderiam ser realizadas análises qualitativas e quantitativas da população microbiana endógena.

O conhecimento da natureza e quantidade da população microbiana do solo permite prever, em certo grau, se os contaminantes presentes podem ser biodegradados. A realização de ensaios mais prolongados permitiria saber se a biodegradação aumenta, diminui ou não sofre alterações. Os compostos detetados após os ensaios podem ser apenas compostos intermédios, sendo importante determinar se estes compostos se degradariam ou não se o ensaio se prolongasse.

De forma a avaliar correctamente as variações de COV durante a biodegradação nos *OxiTop*, poderia-se recolher uma amostra da fase gasosa e identificar os compostos presentes nesta.

Seria importante avaliar amostras de um perfil vertical e horizontal da bacia de forma a conhecer a distribuição dos compostos.

Deveriam ser realizados de ensaios com amostras com a mesma humidade, natural ou adicionada, para comparar os resultados com teores de humidade definidos. Os efeitos da adição de nutrientes na biodegradação dos compostos poderiam ser avaliados em futuros ensaios.

9. Referências Bibliográficas

- AEA (2007). *Progress in management of contaminated sites* (LSI 003/CSI 015). <http://www.eea.europa.eu/data-and-maps/indicators/progress-in-management-of-contaminated-sites/progress-in-management-of-contaminated-1> (acedido a 9.09.2014)
- AEA (2010). *The European environment – state and Outlook 2010: soil*. European Environment Agency, Copenhagen.
- AEA (2014a). *Soil contamination widespread in Europe*. <http://www.eea.europa.eu/highlights/soil-contamination-widespread-in-europe> (acedido em 10.09.2014)
- AEA (2014b). *Progress in management of contaminated sites (LSI 003)*. <http://www.eea.europa.eu/data-and-maps/indicators/progress-in-management-of-contaminated-sites-3/assessment/view> (acedido em 10.09.2014)
- Akça, E., et al. (2005), 'Soil Atlas of Europe', (Luxembourg: European Soil Bureau Network European Commission).
- ATDSR (2005). *Toxicological Profile for Naphthalene, 1-Methylnaphthalene, and 2-Methylnaphthalene* GA: U.S. Department of Health and Human Services, Public Health
- ATDSR (1995). *Toxicological Profile for Polycyclic Aromatic Hydrocarbons*, GA: U.S. Department of Health and Human Services, Public Health
- ATDSR (n.d). *Overview of Total Petroleum Hydrocarbons* www.atsdr.cdc.gov/substances/ToxHealthEffects.asp?toxid=75&sysid=20 (acedido em 12.09.014)
- Bolan, N.S., Curtin, D., Adriano, D.C. (2005) *Acidity* in D. Hillel (ed.), *Encyclopedia of Soils in the Environment* (Academic Press), 11-17.
- Büchi (n.d.-a), 'BÜCHI Universal Extraction system B-811: A Comprehensive Guide to Evaluate your Heating Steps', *Application No. 811049en.doc, Version B*.
- Büchi (n.d.-b), 'Extraction System B_811'.
- CE (2012a). *Proposta de Decisão do Parlamento Europeu e do Conselho relativa a um programa geral de ação da União para 2020 em matéria de ambiente «Viver bem, dentro das limitações do nosso planeta», COM(2012) 710 final*, Bruxelas
- CE (2012b). *Report from the Commission to the European Parliament, the Council, the European Economic and Social Committee and the Committee of the Regions: The implementation of the Soil Thematic Strategy and ongoing activities, COM(2012) 46 final*, Bruxelas.
- CCE, (2001). *Comunicação da Comissão ao Conselho, ao Parlamento Europeu, ao Comité Económico e Social e ao Comité das Regiões Sobre o sexto programa de acção da Comunidade Europeia em matéria de ambiente "Ambiente 2010: o nosso futuro, a nossa escolha" - Sexto Programa de Acção em matéria de Ambiente, COM(2001) 31 final*, Bruxelas
- CCE (2006a). *Comunicação da Comissão ao Conselho, ao Parlamento Europeu, ao Comité Económico e Social e ao Comité das Regiões. Estratégia temática de proteção do solo, COM (2006) 231 final*. Comissão das Comunidades Europeias, Bruxelas.

CCE (2006b). Comissão das Comunidades Europeias, Comunicação da Comissão ao Conselho, ao Parlamento Europeu, ao Comité Económico e Social e ao Comité das Regiões. *Proposta de Directiva do Parlamento Europeu e do Conselho que estabelece um Quadro para a proteção do solo e altera a Directiva 2004/35/CE, COM(2006) 232 final, Bruxelas.*

CCME (2010). *Canadian soil quality guidelines for the protection of environmental and human health: Carcinogenic and Other PAHs. In: Canadian environmental quality guidelines, 1999,* Canadian Council of Ministers of the Environment, Winnipeg

Da Costa, J. B. (2011), *Caracterização e Constituição do solo*, Fundação Calouste Gulbenkian. Lisboa, 8ª edição.

EGF (2013). *Reabilitação da Zona das Bacias do Ecoparque RESIM de Santo André.* Parecer Técnico da Direcção de Engenharia.

Duarte, J. G. (2014) *Optimização de um método de análise de efluentes aquosos e solo por HS-GC-MS.* Instituto Superior Técnico.

EP Solo e Sedimentos (2012). *Relatório de Atividades da EP Solo e Sedimentos 2009-2011*

FRTR (n.d-a). *Landfarming.* Federal Remediation Technologies Roundtable. http://www.frtr.gov/matrix2/section4/4_13a.html (acedido a 19.9.2014)

FRTR (n.d-b). *Thermal Desorption.* Federal Remediation Technologies Roundtable. <http://www.frtr.gov/matrix2/section4/4-26.html> (acedido a 19.9.2014)

FRTR (n.d-c). *Bioventing.* Federal Remediation Technologies Roundtable. http://www.frtr.gov/matrix2/section4/4_1.html (acedido a 19.9.2014)

FRTR (n.d-d). *Biopiles.* Federal Remediation Technologies Roundtable. http://www.frtr.gov/matrix2/section4/4_11.html (acedido a 19.9.2014)

FRTR (n.d-e). *Chemical Oxidation.* Federal Remediation Technologies Roundtable. http://www.frtr.gov/matrix2/section4/4_4.html (acedido a 19.9.2014)

FRTR (n.d-f). *Soil Vapor Extraction.* Federal Remediation Technologies Roundtable. <http://www.frtr.gov/matrix2/section4/4-7.html> (acedido a 19.9.2014)

Gama, S., Arnot, J. A., Mackay, D. (2012) *Toxic Organic Chemicals* J.Gulliver (Ed.) Transport and Fate of Chemicals in the Environment. Springer, Cap. 3, 41-63

Grisso, R., et al. (2009) *Precision Farming Tools: Soil Electrical Conductivity.* Virginia Polytechnic Institute and State University (http://pubs.ext.vt.edu/442/442-508/442-508_pdf.pdf)

Guerreiro, S. S. (2011), '*Bioremediação de solos contaminados - Atenuação natural de compostos orgânicos no solo*', (Instituto Superior Técnico, UTL).

Haddad, P., Nesterenko, P., e Buchberger, W. (2008). *Recent developments and emerging directions in ion chromatography*, *Journal of Chromatography A*, 1184 (1-2), 456-473.

Haritash, A.K., Kaushik, C.P. (2009). *Biodegradation aspects of Polycyclic Aromatic Hydrocarbons (PAHs): A review.* *Journal of Hazardous Materials*.169 (2009) 1-15

- Hartel, P. G. (2005). *Microbial Processes*. D. Hillel (ed.), *Encyclopedia of Soils in the Environment* (Academic Press), Vol 2, 448-455.
- Hillel, D. (2005). *Thermal Properties and Processes*. D. Hillel (ed.), *Encyclopedia of Soils in the Environment* (Academic Press), Vol. 4, 156-163.
- ICSCS (ed.), (2006), *Manual for biological remediation techniques* (Dessau: German Federal Environmental Agency).
- Inglett, P. W., Reddy, K. R. e Corstanje, R. (2005). *Anaerobic Soils*. D. Hillel (ed.), *Encyclopedia of Soils in the Environment* (Academic Press), Vol 1. 72-77
- JRC (2012). *The State of Soil in Europe*. Luxembourg: Publications Office of the European Union
- Jorge, C. R. R. (2001). *Contaminação/Descontaminação de Solos com Gasolina – Influência das características dos solos*. (Faculdade de Engenharia da Universidade do Porto)
- Liedekerke, M. V., Prokop, G., Rabl-Berger, S., Kibblewhite, M. (2012). *2012 version of the EEA indicator CSI015 "Progress in the Management of Contaminated Sites"*
- JRC (2014). *Progress in the Management of Contaminated Sites in Europe*. Luxembourg: Publications Office of the European Union
- Llorens, A. C. (2009), '*Caracterização de solos contaminados com compostos orgânicos aromáticos e comprovação da viabilidade da técnica de fitorremediação*', (Instituto Superior Técnico, UTL).
- Kaakinen, J., Vähöja, P, Kuokkanen, T., Roppola, K. (2007). *Studies on the Effects of Certain Soil Properties on the Biodegradation of Oils Determined by the Manometric Respirometric Method*, *Journal of Automated Methods and Management in Chemistry*
- Khan, F. I. , Husain T., Hejazi R. (2004). *An overview and analysis of site remediation technologies*. *Journal of Environmental Management*, 71 (2004) 95 –122.
- Kitson, F.J., Larsen, B. S. e McEwen, C.N. (1996), *Gas Chromatography and Mass Spectrometry - A practical Guide*, Academic Press, San Diego, California, 3-23
- Kostecki, P., Morrison, R., e Dragun, J. (2005) *Hydrocarbons* D. Hillel (ed.), *Encyclopedia of Soils in the Environment* (Academic Press), Vol. 2 156-163.
- Mackay, D., W.Y. Shui, K.C. Ma e Lee, S.C. (2006). *Handbook of Physical-Chemical Properties and Environmental Fate for Organic Chemicals*. CRC Press
- MEE (1997). *Guideline for Use At Contaminated Sites in Ontario*. Ontario Ministry of Environment and Energy. Ontario, 10-15:45-72
- ME (2011). *Soil, Ground Water and Sediment Standards for Use Under Part XV.1 of the Environmental Protection Act*. Ontario Ministry of Environment Ontario, 11-16.
- Morais, A. R. (2010), '*Bioremediação de solos contaminados com compostos aromáticos*', (Instituto Superior Técnico, UTL).
- Mulligan, C. N. e Yong, R. N. (2003). *Natural attenuation of contaminated soils*. *Environment International* 30 (2004) 587 – 601

Novic, M. e Haddad, P. (2006), 'Analyte-stationary phase interactions in ion-exclusion chromatography', *Journal of Chromatography A*, 1118 (1), 19-28.

Panagos, P., Liedekerke, M.V., Yigini, Y. e Montanarella, L. (2013). *Contaminated Sites in Europe: Review of the Current Situation Based on Data Collected through a European Network*. Journal of Environmental and Public Health

Pinedo, J., Ibáñez, R., Lijzen, J.P.A., e Irabien, Á (2013). *Assessment of soil pollution based on total petroleum hydrocarbons and individual oil substances*. Journal of Environmental Management. 130, 72-79.

Pereira, R., Antunes, S.C., Marques, S.M, Gonçalves, F. (2008). *Contribution for tier 1 of ecological risk assessment of Cunha Baixa uranium mine (Central Portugal): I Soil Chemical characterization*. Science of The Total Environment. 390, (2-3), 377-386.

RESTEK, 2000. *A Technical Guide for Static Headspace Analysis Using GC*.<http://www.restek.com/pdfs/59895B.pdf> (acedido a em 18 de Agosto de 2014)

Riser-Roberts, E. (1998). *Remediation of Petroleum Contaminated Soils: Biological, Physical, and Chemical Processes*. Lewis Publishers

Rolston, D.E. (2005), 'Aeration', in D. Hillel (ed.), *Encyclopedia of Soils in the Environment* (Academic Press), 17-21.

Silva, M. S. C. (2008). *Avaliação e Remediação de Zona Contaminada por Hidrocarbonetos. Caso de estudo: "Contaminação num armazém de lubrificantes"*. Faculdade de Ciências e Tecnologia (UNL).

TPHCWG (1998). *Analysis of Petroleum Hydrocarbons in Environmental Media*. - Volume 4. Total Petroleum Hydrocarbon Criteria Working Group. Amherst Scientific Publishers, Massachusetts

TPHCWG (1997a). *Selection of Representative TPH Fractions Based on Fate and Transport Considerations* - Volume 3. Total Petroleum Hydrocarbon Criteria Working Group. Amherst Scientific Publishers, Massachusetts

TPHCWG (1997b). *Development of Fraction Specific Reference Doses (RfDs) and Reference Concentrations (RfCs) for Total Petroleum Hydrocarbons (TPH)* - Volume 4. Total Petroleum Hydrocarbon Criteria Working Group. Amherst Scientific Publishers, Massachusetts

Turbé, A., et al. (2010), 'Soil biodiversity: functions, threats and tools for policy makers', (Bio Intelligence Service, IRD e NIOO).

Vähöja, P., Roppola, K., Välimäki, I. e Kuokkanen, T. (2005). *Studies of biodegradability of certain oils in forest soil as determined by the respirometric BOD OxiTop method*, International Journal of Environmental Analytical Chemistry, Vol 85, 1065-1073

U.S. EPA (n.d.-a). *Soil Contamination*.

<http://www.epa.gov/superfund/students/wastite/soilspil.htm> (acedido a 12.09.2014)

U.S. EPA (n.d.-b). *Soils Policy: Soil Contamination in Europe*.

http://www.epa.gov/oswer/international/factsheets/200906_eu_soils_contamination.htm

(acedido a 12.09.2014)

U.S. EPA (1994a), 'Method 3541 - Automated Soxhlet Extraction'.

U.S. EPA (1994b). *Bioventing*. US Environmental Protection Agency

U.S. EPA (1994c). *Biosparging*. US Environmental Protection Agency

U.S. EPA (1994d). *Landfarming*. How To Evaluate Alternative Cleanup Technologies For Underground Storage Tank Sites: A Guide For Corrective Action Plan Reviewers Chapter V Landfarming. United States Environmental Protection Agency. US Environmental Protection Agency

U.S. EPA (1994e). *Soil Vapor Extraction*. How To Evaluate Alternative Cleanup Technologies For Underground Storage Tank Sites: A Guide For Corrective Action Plan Reviewers Chapter II SVE. United States Environmental Protection Agency.

U.S. EPA (1994f). *Biopiles*. How To Evaluate Alternative Cleanup Technologies For Underground Storage Tank Sites: A Guide For Corrective Action Plan Reviewers Chapter IV Biopiles. United States Environmental Protection Agency.

U.S. EPA (1994g). *Low-Temperature Thermal Desorption*. How To Evaluate Alternative Cleanup Technologies For Underground Storage Tank Sites: A Guide For Corrective Action Plan Reviewers Chapter VI Low-Temperature Thermal Desorption. United States Environmental Protection Agency.

U.S. EPA (1996a), '*Method 8270C - Semivolatile Organic Compounds by Gas Chromatography/Mass Spectrometry (GC/MS)*'.

U.S. EPA (1996b), '*Method 3540C - Soxhlet Extraction*'.

U.S. EPA (1996c), '*Method 5021 - Volatile Organic Compounds in Soils and other Solid Matrices Using Equilibrium Headspace Analysis*'.

U.S. EPA (1996d), '*Method 8260B - Volatile Organic Compounds – by Gas Chromatography/Mass Spectrometry (GC/MS)*'.

U.S. EPA (2004a). *Chemical Oxidation*. How To Evaluate Alternative Cleanup Technologies For Underground Storage Tank Sites: A Guide For Corrective Action Plan Reviewers Chapter XII Chemical Oxidation. United States Environmental Protection Agency.

U.S. EPA (2004b). *Monitored Natural Attenuation*. How To Evaluate Alternative Cleanup Technologies For Underground Storage Tank Sites: A Guide For Corrective Action Plan Reviewers Chapter IX Monitored Natural Attenuation. United States Environmental Protection Agency.

U.S. EPA (2004c). *Enhanced Aerobic Bioremediation*. US Environmental Protection Agency

U.S. EPA (2007), '*Method 9056A – Determination of Inorganic Anions by Ion Chromatography*'

WTW (2012). *OxiTop® Operating Manual*

Zhang, X.X., Cheng, S.P., Zhu, C.J e Sun, S.L. (2006). *Microbial PAH-Degradation in Soil: Degradation Pathways and Contributing Factors*. *Pedosphere*. 16(5), 555-565

ANEXO I – COSV detetados por GC-MS

Tabela A.1. Compostos detetados na amostra A inicial (Nome, CAS, área, método e número de replicados em que foram detetados)

Nome do Composto	CAS	Método 1		Método 2	
		Replicados	Área	Replicados	Área
1,3Cyclopentadiene,5-(-1-methylpropylidene)-	003141-02-4	1	2,4E+04		
2-Hexanone, 5-methyl-	000110-12-3			1	9,69E+04
2-Methylindene	002177-47-1	1	1,8E+05		
2-Pentanone, 4-hydroxy-	004161-60-8			2	4,16E+04
3,4,4a,9a-Tetrahydrofluorene	52652-40-1	1	2,7E+04		
4,7-Methano-1H-indene, 3a,4,7,7a-tetrahydro-	000077-73-6	1	2,2E+05		
Benzaldehyde, 2,6-difuloro-3,4-dimethoxy-	152434-99-6			1	6,18E+05
Benzene	000071-43-2			1	5,37E+04
Benzene, 1-butynyl-	000622-76-4	1	1,3E+05		
Benzene, 1-ethenyl-3-methyl-	000100-80-1	1	2,2E+05		
Benzene, 1-ethenyl-4-methyl-	000622-97-9	1	4,5E+04		
Benzene, 1-methyl-4-(2-propenyl)-	003333-13-9	1	4,3E+04		
Bicyclo[4.2.0]octa-1,3,5-triene	000694-87-1			1	6,81E+04
Biphenylene	000259-79-0	1	7,8E+05		
Cyclobuta[1,2:3,4]dicyclopentene, 1,3a,3b,6,6a,6b-hexahydro-		1	5,6E+04		
Fluorene	000086-73-7	1	9,6E+05		
Indene	000095-13-6	1	1,2E+05		
Naphthalene, 1-methyl-	000090-12-0	1	8,3E+05	2	6,38E+05
Naphthalene, 2-methyl-	000091-57-6	2	6,8E+05	1	6,81E+05
Nonane	000111-84-2	1	9,0E+04	2	8,21E+04
Pentane, 2,4-dimethyl-	000108-08-7			1	1,41E+05

Nome do Composto	CAS	Método 1		Método 2	
		Replicados	Área	Replicados	Área
Phenanthrene	000085-01-8			1	3,11E+07
Styrene	000100-42-5	1	7,5E+04	2	3,24E+04

Tabela A.2. Compostos detetados no replicado A1 após ensaio de respirometria (Nome, CAS, área, método e número de replicados em que foram detetados)

Nome do composto	CAS	Método 1		Método 2	
		Replicados	Área	Replicados	Área
1,3,5,7-Cyclooctatetraene	000629-20-9			1	8,94E+04
1,3-Cyclohexadiene	592-57-4	1	4,09E+04		
1,3-Cyclopentadiene, 5-methyl-	000096-38-8	1	4,23E+04		
1H-Indene, 1-methyl-	000767-59-9			1	8,69E+04
1H-Indene-1-methanol,a-methyl-,acetate		1	4,55E+05		
2-Heptanol, acetate	5921-82-4	1	2,50E+04		
2-Hexanol	626-93-7	1	4,31E+04		
2-Hexanone	000591-78-6	1	3,64E+04	1	3,03E+04
2-Pentanone, 4-hydroxy-	004161-60-8	2	1,16E+05	2	6,24E+04
3-Hexanol	000623-37-0	1	3,89E+04		
3-Hexen-1-yne	2806-56-6	1	3,83E+04		
3-Penten-1-yne, 3-methyl	1574-33-0	1	4,98E+04		
4,7-Methano-1H-indene, 3a,4,7,7a-tetrahydro-	000077-73-6	1	2,44E+05	1	2,14E+05
5-Methyl-6,8-dioxa-3-thiabicyclo(3.2.1)octane3,3-dioxide		1	2,65E+04		
9H-Fluorene, 1-methyl-	001730-37-6	1	5,74E+04		
Acenaphthylene	000208-96-8			1	1,21E+06
Benzene, 1-ethenyl-2-methyl-	000611-15-4			1	5,20E+04
Benzene, 1-ethenyl-3-methyl-	000100-80-1	2	2,86E+05	1	1,85E+05
Benzene, 2-propenyl-	000300-57-2			2	1,66E+05
Bicyclo[2.2.1]hept-2-ene, 5-ethenyl-	003048-64-4	1	2,29E+04		
Bicyclo[2.2.1]hept-5-ene-2-carboxylic acid, methyl ester, endo-	002903-75-5	1	2,91E+04		
Bicyclo[4.1.0]heptane, 7-(1-methylethylidene)-		1	2,47E+04		
Butane, 2,2,3,3-tetramethyl-	000594-82-1	2	1,71E+05	2	1,38E+05
Cyclobuta[1,2:3,4]dicyclopentene, 1,3a,3b,4,6a,6b-hexahydro-		1	2,51E+05	2	2,21E+05

Nome do composto	CAS	Método 1		Método 2	
		Replicados	Área	Replicados	Área
Cyclobutene, 2-propenylidene-		1	3,43E+04	2	6,69E+04
endo-5,6-Bis(hydroxymethyl)bicyclo(2.2.1)hept-2-ene	699-97-8			1	3,47E+04
Fluorene	000086-73-7	2	1,68E+06	1	2,30E+06
Hexane, 2-methyl-	000591-76-4	1	5,10E+05	1	4,78E+05
Hexane, 3-methyl-	000589-34-4	2	9,48E+04		
Indene	000095-13-6	2	1,40E+05		
Naphthalene, 2,7-dimethyl-	000582-16-1			1	7,76E+05
Pentane, 2,2-dimethyl-	000590-35-2	2	3,32E+05		
Pentane, 2,4-dimethyl-	000108-08-7			1	7,52E+05
Phenanthrene	000085-01-8	1	8,45E+06		
Styrene	000100-42-5	2	2,17E+05	2	1,90E+05

Tabela A.3. Compostos detetados no replicado A2 após ensaio de respirometria (Nome, CAS, área, método e número de replicados em que foram detetados)

Nome	CAS	Método 1		Método 2	
		Replicados	Área	Replicados	Área
(2,3,3-Trimethyloxiranyl)methanol		2	3,3E+04		
1,3,5,7-Cyclooctatetraene	000629-20-9	1	8,7E+04		
2,4-Azetidinedione, 3,3-diethyl-1-methyl-		1	2,1E+04		
2-Hexanone, 6-(acetyloxy)-				2	3,62E+05
2-Methylindene	002177-47-1	1	1,5E+05		
2-Pentanone, 4-amino-4-methyl	000625-04-7	1	2,9E+04		
2-Pentanone, 4-hydroxy-	004161-60-8	2	1,2E+05	2	1,18E+05
3-Hexanol, 4-ethyl-	19780-44-0			2	2,62E+04
4,7-Methano-1H-indene, 3a,4,7,7a-tetrahydro-	000077-73-6	2	1,9E+05	2	1,67E+05
4,7-Methanoisobenzofuran-1,3-dione, 3a,4,7,7a-tetrahydro-5-methyl-	000117-40-8	1	4,9E+04		
9H-Fluorene, 2-methyl-	001430-97-3	1	1,2E+06		
Acenaphthene	000083-32-9	2	5,3E+05		
Anthracene, 2-methyl-	000613-12-7	1	1,6E+06		
Benzene	000071-43-2			2	4,20E+04
Benzene, (1-methylethyl)-	000098-82-8	2	3,3E+04	2	2,77E+04
Benzene, 1,1'-(1-ethenyl-1,3-propanediyl)bis-	061141-97-7			1	8,94E+04
Benzene, 1,3-diethenyl-	000108-57-6	1	3,0E+04		
Benzene, 1-butynyl-	000622-76-4	1	5,1E+04	2	1,32E+05
Benzene, 1-ethenyl-2-methyl-	000611-15-4			1	1,29E+05
Benzene, 1-ethenyl-3-methyl-	000100-80-1	2	2,0E+05		
Benzene, 1-ethenyl-4-methyl-	000622-97-9	2	5,6E+04		
Benzene, 2-ethenyl-1,4-dimethyl-	002039-89-6	1	2,5E+04		
Biphenylene	000259-79-0	2	6,4E+05		
Cyclobutene, 2-propenylidene-				1	3,16E+04

Nome	CAS	Método 1		Método 2	
		Replicados	Área	Replicados	Área
Cycloprop[a]indene, 1,1a,6,6a-tetrahydro-	015677-15-3	1	1,6E+05		
Fluorene	000086-73-7	2	1,5E+06	1	2,97E+06
Indene	000095-13-6	2	1,1E+05		
Naphthalene	000091-20-3	1	1,3E+05		
Naphthalene, 1,5-dimethyl-	000571-61-9	1	5,0E+05		
Naphthalene, 1-methyl-	000090-12-0	2	3,4E+05		
Naphthalene, 2,3-dimethyl-	000581-40-8	2	1,0E+06		
Naphthalene, 2,6-dimethyl-	000581-42-0	2	3,0E+05		
Naphthalene, 2-ethenyl-	000827-54-3	2	3,0E+05		
Naphthalene, 2-methyl-	000091-57-6	2	1,8E+05		
Nonane	000111-84-2	2	9,9E+04	2	1,08E+05
Pentane, 2,4-dimethyl-	000108-08-7			1	1,89E+05
Phenanthrene	000085-01-8	1	8,3E+06	1	8,47E+06
Phenol, 2,4-bis(1,1-dimethylethyl)-	000096-76-4	1	1,9E+05		
Piperazine, 1-methyl-	000109-01-3			2	2,52E+04
Styrene	000100-42-5	1	7,6E+04	2	1,07E+05
Sulfurous acid, nonyl pentyl ester		2	5,1E+05		
Tetradecane	000629-59-4	2	1,0E+05		

Tabela A.4. Compostos detetados na amostra T inicial (Nome, CAS, área, método e número de replicados em que foram detetados)

Nome	CAS	Método 1		Método 2	
		Replicados	Área	Replicados	Área
1,3,5-Cycloheptatriene	000544-25-2			2	1,54E+05
1,3-Cyclohexadiene	000592-57-4			2	4,95E+05
1,3-Cyclopentadiene	000542-92-7	2	2,36E+05	1	2,93E+05
1,4-Cyclohexadiene	000628-41-1	2	2,89E+05		
1,4-Dihydronaphthalene	000612-17-9	1	5,27E+05		
1H-Inden-1-one, 2,3-dihydro-	000083-33-0	2	1,01E+06	2	8,76E+05
1H-Indene, 1-methyl-	000767-59-9	1	7,16E+05		
2-Methylindene	002177-47-1	1	7,65E+05	2	6,54E+05
4,7-Methano-1H-indene, 3a,4,7,7a-tetrahydro-	000077-73-6	2	1,09E+06	2	9,71E+05
9H-Fluorene, 2-methyl-	001430-97-3	1	6,73E+06		
Acenaphthene	000083-32-9	1	4,50E+06	1	4,07E+06
Anthracene	000120-12-7			1	4,25E+07
Benzene	000071-43-2	1	3,54E+04		
Benzene, (1-methyl-2-cyclopropen-1-yl)-	065051-83-4	1	3,80E+05	1	7,80E+05
Benzene, 1,1'-(1-methyl-1,3-propanediyl)bis-	001520-44-1	2	5,40E+06	1	5,04E+06
Benzene, 1-ethenyl-2-methyl-	000611-15-4	1	2,29E+05	1	7,36E+05
Benzene, 1-ethenyl-3-methyl-	000100-80-1	2	8,36E+05	1	5,05E+05
Benzene, 1-propenyl-	000637-50-3			1	2,32E+05
Bicyclo[2.2.1]hept-2-ene, 5-ethenyl-	003048-64-4	1	1,05E+05		
Bicyclo[2.2.1]hept-5-ene-2-carbonitrile	000095-11-4	1	9,46E+04		
Bicyclo[2.2.1]hex-2-ene, 2-ethenyl-	118838-55-4	2	2,81E+04		
Biphenylene	000259-79-0	2	3,36E+06	1	3,64E+06
Decane, 2,5,6-trimethyl-				2	2,36E+04
Fluorene	000086-73-7	2	1,13E+07	1	1,93E+07

Nome	CAS	Método 1		Método 2	
		Replicados	Área	Replicados	Área
Hexadecane	000544-76-3			1	1,24E+06
Indene	000095-13-6	2	5,90E+05	2	5,27E+05
Naphthalene	000091-20-3	2	2,00E+06	2	1,86E+06
Naphthalene, 1,4,5-trimethyl-	002131-41-1	1	1,81E+06		
Naphthalene, 1,8-dimethyl-	000569-41-5	2	1,26E+06		
Naphthalene, 1-ethyl-	001127-76-0	2	1,39E+06	2	1,47E+06
Naphthalene, 1-methyl-	000090-12-0	2	7,22E+06	1	1,40E+06
Naphthalene, 2,3-dimethyl-	000581-40-8	2	4,63E+06	2	4,76E+06
Naphthalene, 2,6-dimethyl-	000581-42-0	2	1,25E+06	2	1,65E+06
Naphthalene, 2,7-dimethyl-	000582-16-1			1	1,18E+06
Naphthalene, 2-ethenyl-	000827-54-3	2	1,48E+06	2	1,23E+06
Naphthalene, 2-methyl-	000091-57-6	2	8,44E+05	2	6,81E+06
Nonane	000111-84-2	1	4,14E+04		
Pentadecane	000629-62-9	1	1,23E+06	1	1,85E+06
Phenanthrene	000085-01-8	2	1,75E+07		
Spiro[2.4]hepta-4,6-diene	000765-46-8	2	1,15E+05		
Spiro[bicyclo[2.2.1]hept-5-ene-2,1'-cyclopropane]	006572-50-5			1	8,79E+04
Styrene	000100-42-5	2	7,86E+05	2	7,64E+05
Tetradecane	000629-59-4	2	6,23E+05		
Toluene	000108-88-3			1	1,50E+05

Tabela A.5. Compostos detetados no replicado T1 após ensaio de respirometria (Nome, CAS, área, método e número de replicados em que foram detetados)

Nome	CAS	Método 1		Método2	
		Replicados	Área	Replicados	Área
.alpha.-Bourbonene		1	1,72E+05		
1-Buten-3-yne, 2-methyl-	000078-80-8	2	2,48E+05		
1H-Indene, 1-methyl-	000767-59-9			1	1,74E+06
1-Isopropenylnaphthalene	001855-47-6			1	1,10E+06
2-Hexanone, 6-(acetyloxy)-	4305-26-4			1	2,18E+05
2-Methylindene	002177-47-1	2	2,30E+06	2	1,10E+06
2-Pentanone, 4-hydroxy-	004161-60-8	1	2,55E+05	1	2,73E+05
4-Methylenecyclopentene		1	3,02E+05		
9H-Fluorene, 2-methyl-	001430-97-3	2	2,80E+06	1	2,43E+06
Acenaphthene	000083-32-9	2	4,75E+06	2	4,89E+06
Anthracene	000120-12-7			1	3,22E+07
Benzene	000071-43-2			1	2,82E+04
Benzene, (1-methyl-2-cyclopropen-1-yl)-	065051-83-4	1	5,94E+05		
Benzene, (2-methyl-1-propenyl)-	000768-49-0			1	3,87E+05
Benzene, 1-butynyl-	000622-76-4			1	6,49E+05
Benzene, 1-cyclopenten-1-yl-	825-54-7	1	8,92E+05	1	9,61E+05
Benzene, 1-ethenyl-2-methyl-	000611-15-4	1	8,10E+05	1	2,31E+05
Benzene, 1-ethenyl-3-methyl-	000100-80-1	2	2,07E+05	1	7,67E+05
Benzene, 1-ethyl-2-methyl-	611-14-3	1	2,12E+04		
Benzene, 1-methyl-2-(1-methylethyl)-	527-84-4			1	1,88E+05
Benzene, 1-methyl-3-(phenylmethyl)-	620-47-3	1	4,35E+06		
Benzene, 1-methyl-4-(2-propenyl)-	3333-13-9	1	1,60E+05		

Nome	CAS	Método 1		Método2	
		Replicados	Área	Replicados	Área
Benzene, 1-propenyl-	000637-50-3			1	2,36E+05
Benzene, 2-propenyl-	000300-57-2			1	6,28E+05
Biphenyl	000092-52-4	1	4,97E+06		
Biphenylene	000259-79-0	2	3,12E+06	2	3,43E+06
Cyclobutene, 2-propenylidene-		1	1,26E+05		
Cyclopentene, 1-ethenyl-3-methylene-		1	3,68E+04		
Fluorene	000086-73-7	2	1,05E+07	2	1,46E+07
Heptadecane	000629-78-7	1	8,45E+05		
Hexadecane	000544-76-3	2	1,59E+06		
Hexane, 2-methyl-	000591-76-4	2	1,32E+05	2	1,51E+05
Hexane, 3-methyl-	589-34-4	1	3,44E+04		
Indan, 1-methyl-	000767-58-8	1	3,37E+05		
Indene	000095-13-6	2	7,87E+05	2	5,96E+05
Naphtalene, 2-ethenyl-	827-54-3	2	1,93E+06	2	1,50E+06
Naphthalene	000091-20-3	2	5,28E+06	2	5,81E+06
Naphthalene, 1-ethyl-	001127-76-0	2	1,55E+06	2	1,21E+06
Naphthalene, 1-methyl-	000090-12-0	1	7,62E+06	2	7,44E+05
Naphthalene, 2-ethenyl-	000827-54-3			1	3,06E+06
Naphthalene, 2-ethyl-	000939-27-5	2	1,91E+06	2	1,89E+06
Naphthalene, 2-methyl-	000091-57-6	1	1,13E+07	2	1,12E+07
Nonadecane	000629-92-5			1	4,42E+06
Nonane	000111-84-2	1	9,73E+04	1	1,09E+05
Pentadecane	000629-62-9	2	1,22E+06		
Phenanthrene	000085-01-8	2	1,78E+06		
Propanedinitrile, methylene-	000922-64-5	2	3,69E+04		

Nome	CAS	Método 1		Método2	
		Replicados	Área	Replicados	Área
Propanoic acid, 2-hydroxy-, methyl ester, (+)-	2155-30-8			1	2,00E+04
Styrene	000100-42-5	2	6,11E+05	2	7,53E+05
Tetradecane	000629-59-4	2	9,25E+05	2	8,91E+05
Tridecane	000629-50-5	1	3,08E+05		
Tricyclo(5.2.1.0(2,6))dec-3-ene, 4-ethyl		1	5,85E+05		
Tetracyclo[3.3.1.0(2,8).0(4,6)]-non-2-ene		1	1,21E+05		
Bicyclo(4.1.0)heptane, 7-(phenylmethylene)-		1	6,95E+05		
cis-Bicyclo(4.2.0)octa-3,7-diene-		1	4,92E+04		
3-Oxabicyclo[3.3.0]octan-2-one, 4-methoxy-6-methylene-, trans-		1	7,98E+05		
9,10-Dimethylenetricyclo[4.2.1.1(2,5)]decane				1	2,50E+05
Bicyclo[2.2.1]hept-2-ene, 2-methyl-	000694-92-8	1	3,27E+05		
Bicyclo[2.2.1]hept-2-ene, 5-ethenyl-	003048-64-4	2	9,45E+04	2	7,93E+04
3-Phenylbicyclo(3.2.1)octa-2,6-diene				2	1,81E+06
Bicyclo(3.2.1)octa-2,6-diene, 2-phenyl-		2	1,99E+06		
Bicyclo[2.2.2]oct-2-ene	000931-64-6	1	6,64E+05		
1,2,3-Propanetriol, monoacetate	000106-61-6	1	1,14E+06		
Benzene, 1,2,3-trimethyl-	000526-73-8	1	2,05E+04		
Bicyclo[2.2.2]oct-5-ene-2,2,3,3-tetracarbonitrile	001017-93-2			1	2,38E+05
1,3,5-Cycloheptatriene	000544-25-2	1	1,09E+05	2	1,50E+05
1,3,5-Hexatriene	002235-12-3	2	2,50E+05		
Naphthalene, 1,4,6-trimethyl-	002131-42-2	2	2,03E+06		
Bicyclo(4.2.1)nona-2,4,7-triene, 7-isopropenyl-		2	6,99E+05		
4,7-Methano-1H-indene, 3a,4,7,7a-tetrahydro-	000077-73-6	2	1,30E+06	2	1,13E+06
4,7-Methanoisobenzofuran-1,3-dione, 3a,4,7,7a-tetrahydromethyl-	025134-21-8			1	5,05E+05
3a,4,5,6,7,7a-Hexahydro-4,7-methanoindene	004488-57-7	1	6,42E+05		

Nome	CAS	Método 1		Método2	
		Replicados	Área	Replicados	Área
4,7-Methanoindene, 3a,4,5,6,7,7a-hexahydro-, endo-	002825-86-7			1	3,98E+05
1,3,8-p-Menthatriene	21195-59-5	1	4,95E+04		
1,2,4a,4b,7,8,8a,8b-Octahydrobiphenylene		1	1,70E+05	1	1,36E+05
Cyclohexane, 1,2-dichloro-, trans-	000822-86-6	1	2,84E+05		
Naphtalene, 1,2-dihydro-	447-53-0	1	2,64E+05		
Naphthalene, 1,2-dihydro-4-methyl-	004373-13-1	1	1,89E+05		
1H-Indene, 2,3-dihydro-1,2-dimethyl-	017057-82-8	1	2,52E+05		
Ethanol, 2,2'-oxybis-	111-46-6			1	3,95E+04
Hexane, 2,2-dimethyl-	590-73-8	2	4,73E+04	2	6,15E+04
Pentane, 2,2-dimethyl-	000590-35-2	2	7,71E+04		
1,3-Cyclohexadiene	000592-57-4			1	5,20E+05
1,3-Cyclopentadiene	000542-92-7			2	2,89E+05
1,3-Cyclopentadiene, 5-(1-methylethylidene)-	2175-91-9			1	5,03E+04
Naphthalene, 1,3-dimethyl-	000575-41-7	1	1,80E+06		
Benzene, 1,1'-(1-methyl-1,3-propanediyl)bis-	001520-44-1	2	4,70E+06	2	4,56E+06
1H-Inden-1-one, 2,3-dihydro-	000083-33-0	2	1,27E+06	2	1,24E+06
1H-Indene, 2,3-dihydro-4-methyl-	000824-22-6			1	2,38E+05
1H-Indene, 2,3-dihydro-5-methyl-	000874-35-1	1	5,83E+05		
Benzene, 1-ethyl-2,3-dimethyl-	000933-98-2	1	1,27E+05		
Naphthalene, 2,3-dimethyl-	000581-40-8	2	7,02E+06	2	6,73E+06
1,4-Dihydronaphthalene	000612-17-9	2	1,26E+06	1	4,33E+05
1,4-Methanonaphthalene, 1,4-dihydro-	4453-90-1	2	1,49E+06		
Benzene, 1,4-diethyl-	105-05-5	1	2,94E+04		
Benzene, 2-ethenyl-1,4-dimethyl-	002039-89-6	1	1,05E+05	1	1,43E+05
Benzene, 2-ethyl-1,4-dimethyl-	1758-88-9			1	3,51E+04

Nome	CAS	Método 1		Método2	
		Replicados	Área	Replicados	Área
1-Methylcyclohexa-2,4-diene-		1	2,34E+04		
2,4-Dimethylstyrene	002234-20-0	1	1,69E+05		
Benzene, 2,4-dimethyl-1-(1-methylpropyl)-	001483-60-9	1	7,99E+05	1	8,79E+05
Pentane, 2,4-dimethyl-	000108-08-7			2	8,65E+05
Naphthalene, 1,6-dimethyl-	000575-43-9	1	1,65E+06	1	2,26E+06
Naphthalene, 2,6-dimethyl-	000581-42-0	2	2,86E+06	2	1,84E+06
Spiro[2.4]hepta-4,6-diene	000765-46-8	1	1,33E+05	1	1,60E+05
Naphthalene, 2,7-dimethyl-	000582-16-1	1	8,87E+05		
4,7-Methano-1H-indene, octahydro-	006004-38-2	1	4,42E+05	1	4,12E+05
Naphthalene, 1,8-dimethyl-	000569-41-5	1	1,40E+06		

Tabela A.6. Compostos detetados no replicado T2 após ensaio de respirometria (Nome, CAS, área, método e número de replicados em que foram detetados)

Nome	CAS	Método 1		Método2	
		Replicados	Área	Replicados	Área
1,3,5-Cycloheptatriene	000544-25-2	2	1,29E+05	2	1,00E+05
1,3,5-Hexatriene, (Z)-	002612-46-6	1	1,62E+05		
1,3-Cyclohexadiene	000592-57-4	1	2,07E+05		
1,3-Cyclopentadiene	000542-92-7	1	1,87E+05	1	1,90E+05
1,4-Methanonaphthalene, 1,4-dihydro-	004453-90-1	1	1,11E+06		
1-Buten-3-yne, 2-methyl-	000078-80-8	1	2,08E+05	1	1,05E+05
1H-Inden-1-one, 2,3-dihydro-	000083-33-0	1	5,31E+05	1	9,66E+05
2-Hexanone, 6-(acetyloxy)-	4305-26-4	2	2,37E+05		
2'-Hydroxybutyrophenone oxime	021667-43-6	1	3,30E+05		
2-Pentanone, 4-hydroxy-	004161-60-8	2	5,75E+04	2	7,31E+04
4,7-Methano-1H-indene, 3a,4,7,7a-tetrahydro-	000077-73-6	2	7,17E+05	2	6,50E+05
4-Methylenecyclopentene	014548-32-4	2	1,57E+05		
Acenaphthene	000083-32-9	2	3,80E+06	2	3,62E+06
Benzene	000071-43-2	1	4,52E+04		
Benzene, (1-methyl-2-cyclopropen-1-yl)-	065051-83-4	1	3,17E+05		
Benzene, (2,4-cyclopentadien-1-ylidenemethyl)-		2	1,18E+06		
Benzene, 1,1'-(1-methyl-1,3-propanediyl)bis-	001520-44-1	2	3,29E+06	1	3,26E+06
Benzene, 1-butynyl-	000622-76-4	1	3,38E+05	2	5,00E+05
Benzene, 1-ethenyl-3-methyl-	000100-80-1	2	5,21E+05	2	4,54E+05
Benzene, 1-propenyl-	000637-50-3	1	4,45E+05		
Benzene, 2,4-dimethyl-1-(1-methylpropyl)-	001483-60-9	1	3,94E+05		
Bicyclo[2.2.1]hept-2-ene, 5-ethenyl-	003048-64-4	1	8,32E+04		
Bicyclo[3.2.0]hept-2-ene, cis-	7095-65-0	1	6,32E+04		
Bicyclo[4.2.0]octa-1,3,5-triene, 7-methyl-	055337-80-9	1	1,39E+05		

Nome	CAS	Método 1		Método 2	
		Replicados	Área	Replicados	Área
Biphenylene	000259-79-0	2	2,26E+06		
cis-Bicyclo[4.2.0]octa-3,7-diene-		2	2,70E+04		
Cyclobutene, 2-propenylidene-	052097-85-5	1	8,86E+04		
Fluorene	000086-73-7	2	7,97E+06	2	1,71E+07
Hexadecane	000544-76-3	1	1,22E+06		
Indene	000095-13-6	2	3,93E+05	2	3,00E+05
Naphthalene	000091-20-3	2	7,42E+05	2	8,94E+05
Naphthalene, 1,8-dimethyl-	000569-41-5	1	1,21E+06	1	1,31E+06
Naphthalene, 1-ethyl-	001127-76-0	1	6,95E+05	1	8,08E+05
Naphthalene, 1-methyl-	000090-12-0	2	7,80E+06	1	5,72E+06
Naphthalene, 2,3-dimethyl-	000581-40-8	2	4,65E+06	2	4,51E+06
Naphthalene, 2,6-dimethyl-	000581-42-0	2	1,22E+06	2	1,60E+06
Naphthalene, 2-ethenyl-	000827-54-3	1	7,83E+06	1	9,68E+05
Naphthalene, 2-methyl-	000091-57-6	2	2,85E+06	1	7,99E+06
Nonane	000111-84-2	2	3,68E+04	2	4,18E+04
Phenanthrene	000085-01-8	1	1,82E+07	1	2,95E+07
Propanedinitrile, methylene-	000922-64-5	1	4,59E+04		
Styrene	000100-42-5	2	4,42E+05	2	4,95E+05
Tetradecane	000629-59-4	1	5,37E+05		
1H-Indene, 1-methyl-	000767-59-9			1	5,88E+05
2-Heptanol, acetate	5921-82-4			2	2,12E+05
2-Methylindene	002177-47-1			1	2,87E+05
Anthracene	000120-12-7			1	2,10E+07
Toluene	000108-88-3				9,65E+04

Tabela A.7. Compostos detetados na amostra B inicial (Nome, CAS, área, método e número de replicados em que foram detetados)

Nome	CAS	Método 1		Método 2	
		Replicados	Área	Replicados	Área
1,3-Dioxolane-2-butanol,2-methyl-		1	3,70E+05		
2-Pentanone, 4-hydroxy-	004161-60-8	1	1,46E+05	1	1,37E+05
3a,4,5,6,7,7a-Hexahydro-4,7-methanoindene	004488-57-7	1	1,47E+05		
4,7-Methano-1H-indene, 3a,4,7,7a-tetrahydro-	000077-73-6	2	1,74E+05	2	1,57E+05
Acenaphthylene	000208-96-8	1	7,71E+05		
Benzene, (1-methylethyl)-	000098-82-8	1	2,80E+04		
Benzene, (propoxymethyl)		1	2,33E+04		
Benzene, 1-ethenyl-3-methyl-	000100-80-1	2	1,95E+05	2	1,26E+05
Bicyclo(3,2,0)hepta-2,6-diene	2422-86-8	1	3,28E+04	2	2,13E+04
Exo-tricyclo[5.2.1.0(2.6)]decane		1	7,73E+04		
Indene	000095-13-6	2	1,85E+05	2	1,01E+05
Naphthalene, 1,2-dihydro-	000447-53-0	2	1,85E+05	1	1,69E+05
Nonane	000111-84-2	1	5,00E+04	1	4,61E+04
Oxirane-2-carboxylic acid, 2-aminocarbonyl-3-methyl-3-(1-methylethyl)-, ethyl ester		1	3,55E+04		
Styrene	000100-42-5	2	1,89E+05	2	2,19E+05
2-Hexanone, 6-(acetyloxy)-				2	3,39E+05
3-Octanamine	24552-04-3			1	2,37E+04
Acetic acid	64-19-7			1	9,94E+04
Benzene	000071-43-2			1	4,21E+04
Benzene, (1-nitroethyl)-				1	3,38E+04
Benzene, 1-butynyl-	000622-76-4			1	2,39E+05
Benzene, 1-ethenyl-4-methyl-	000622-97-9			1	7,09E+04
Cyclobutene,2-propenylidene-				1	3,97E+04
Pentane, 2,2-dimethyl-	590-35-2			2	5,38E+04

Tabela A.8. Compostos detetados no replicado B1 após ensaio de respirometria (Nome, CAS, área, método e número de replicados em que foram detetados)

Nome	CAS	Método 1		Método 2	
		Replicados	Área	Replicados	Área
1,3,5,7-Cyclooctatetraene	000629-20-9	1	2,78E+05		
1,3-Cyclohexadiene	000592-57-4	1	3,47E+04		
1,3-Cyclopentadiene, 1-methyl-	000096-39-9	2	7,73E+04		
1,3-Dioxolane-4-methanol, 2,2-dimethyl-	100-79-8			1	2,57E+04
1,4-Dihydronaphthalene	000612-17-9	1	8,58E+04		
1H-Indene, 1-methyl-	000767-59-9	1	6,13E+04		
1H-Indene-1-methanol, .alpha.-methyl-, acetate		1	3,56E+05		
2-Heptanol, acetate	5921-82-4			1	6,23E+04
2-Hexanol	626-93-7	1	6,44E+04		
2-Hexanone	000591-78-6	1	5,29E+04	1	3,09E+04
2-Hexanone, 6-(acetyloxy)-		1	5,18E+04		
2-Pentanone, 4-hydroxy-	004161-60-8	1	2,89E+05	1	2,97E+05
3a,4,5,6,7,7a-Hexahydro-4,7-methanoindene	004488-57-7	1	2,52E+05		
3-Hexanol	000623-37-0	1	7,18E+04	1	6,09E+04
3-Hexanone	000589-38-8	1	2,78E+04		
4,7-Methano-1H-indene, 3a,4,7,7a-tetrahydro-	000077-73-6	2	1,81E+05	1	1,27E+05
4,7-Methano-1H-indene, octahydro-	006004-38-2	1	1,56E+05	1	1,40E+05
4,7-Methanoindene, 3a,4,5,6,7,7a-hexahydro-, endo-	002825-86-7			1	1,82E+05
Acetic acid	0064-19-7	1	3,62E+04		
Benzene, 1-butynyl-	000622-76-4	1	1,65E+05	1	1,56E+05
Benzene, 1-ethenyl-3-methyl-	000100-80-1	2	1,81E+05	1	1,21E+05
Benzene, 1-ethenyl-4-methyl-	000622-97-9			1	5,37E+04
Benzene, 1-propenyl-	000637-50-3			1	1,55E+05

Nome	CAS	Método 1		Método 2	
		Replicados	Área	Replicados	Área
Benzene, 1-propynyl-	000673-32-5			1	1,25E+05
Benzene, 2,4-dimethyl-1-(1-methylpropyl)-	001483-60-9	1	2,04E+05		1,99E+05
Benzene, 2-propenyl-	000300-57-2	1	5,59E+04		
Biphenylene	000259-79-0	1	5,84E+05		
Butane, 2,2,3,3-tetramethyl	000594-82-1	2	1,67E+05	1	1,51E+05
Cyclobuta[1,2:3,4]dicyclopentene, 1,3a,3b,6,6a,6b-hexahydro-	000612-09-9			1	1,13E+05
Cyclobutene, 2-propenylidene-		1	2,62E+04	2	2,54E+04
Hexane, 2-methyl-	000591-76-4	1	5,36E+05	2	4,95E+05
Hexane, 3,3,4,4-tetramethyl-	5171-84-6	1	3,22E+04		
Hexane, 3-methyl-	000589-34-4	2	9,81E+04		
Indene	000095-13-6	2	2,23E+05	1	1,36E+05
Nonane	000111-84-2	1	3,60E+04	1	3,76E+04
Pentane, 2,2-dimethyl-	000590-35-2	2	3,24E+05		
Pentane, 3,3-dimethyl-	562-49-2	1	2,66E+04		
Styrene	000100-42-5	1	2,20E+05	2	2,07E+05
Toluene	108-88-3			1	2,82E+04
Triacetin	102-76-1	1	3,71E+05		
Tricyclo(5.2.1.0(2,6))dec-4-ene, 4-methyl-		1	4,29E+05	1	3,52E+05

Tabela A.9. Compostos detetados no replicado B2 após ensaio de respirometria (Nome, CAS, área, método e número de replicados em que foram detetados)

Nome	CAS	Método 1		Método 2	
		Replicados	Área	Replicados	Área
1,2,3-Propanetriol, diacetate	25395-31-7	1	7,26E+05		
1,3-Cyclohexadiene	592-57-4	1	4,01E+04		
1,3-Cyclopentadiene, 1-methyl-	00096-39-9	1	6,48E+04		
2-Hexanol	000626-93-7	1	3,80E+04		
2-Hexanone	000591-78-6	1	4,29E+04	1	2,41E+04
2-Hexanone, 4-hydroxy-3-propyl-		1	2,81E+04		
2-Pentanone, 4-hydroxy-	004161-60-8	2	1,57E+05	2	1,61E+05
3-Hexanol	000623-37-0	1	4,14E+04	1	2,56E+04
3-Hexanone	000589-38-8	1	2,17E+04		
4,7-Methano-1H-indene, 3a,4,7,7a-tetrahydro-	000077-73-6	2	1,10E+05	1	1,33E+05
4,7-Methanoindene, 3a,4,5,6,7,7a-hexahydro-, endo-	002825-86-7	1	1,08E+05		
4-Methylenecyclopentene		1	5,29E+04		
Benzene, 1-ethenyl-3-methyl-	000100-80-1	1	5,29E+04	2	2,30E+05
Benzene, 1-propenyl-	000637-50-3	2	9,93E+04		
Bicyclo[4.2.0]octa-1,3,5-triene	000694-87-1	1	1,78E+05		
Butane, 2,2,3,3-tetramethyl-	000594-82-1	2	1,79E+05	1	1,35E+05
Hexane, 3-methyl-	000589-34-4	2	1,02E+05		
Indene	000095-13-6	2	1,31E+05	2	1,22E+05
Nonane	000111-84-2	1	2,58E+04		
Pentane, 2,2-dimethyl-	000590-35-2	2	3,19E+05		
Pentane, 3,3-dimethyl-	000562-49-2	2	3,74E+04		
Spiro(2.4)hepta-4,6-diene-	765-46-8	1	3,86E+04		

Nome	CAS	Método 1		Método 2	
		Replicados	Área	Replicados	Área
Styrene	000100-42-5	1	1,73E+05	1	2,17E+05
1,3,5,7-Cyclooctatetraene	000629-20-9			1	2,81E+05
1,3-Dioxolane-2-butanol,2-methyl				1	3,13E+04
Benzene, 1-ethenyl-2-methyl-	611-15-4			1	4,96E+04
Cyclobutene, 2-propenylidene-				2	6,93E+04
Octane, 2,4,6-trimethyl-	62016-37-9			1	2,83E+04
Triquinacene	006053-74-3			1	2,18E+05
1,2,3-Propanetriol, diacetate	025395-31-7			1	4,88E+05
Benzene, 1-butynyl-	000622-76-4			1	1,04E+05
Cyclobuta[1,2:3,4]dicyclopentene, 1,3a,3b,4,6a,6b-hexahydro-	105226-58-2			1	9,99E+04
Hexane, 2,2-dimethyl-	590-73-8			1	1,17E+05
Hexane, 2-methyl-	000591-76-4			1	4,34E+05
Pentane, 2,3-dimethyl-	000565-59-3			1	6,53E+04

Tabela A.10. Compostos detetados na amostra C inicial (Nome, CAS, área, método e número de replicados em que foram detetados)

Nome	CAS	Método 1		Método 2	
		Replicados	Área	Replicados	Área
.alpha.,.beta.,.beta.-Trimethylstyrene	000769-57-3	1	3,37E+05		
1,2,4a,4b,7,8,8a,8b-Octahydrobiphenylene		1	2,72E+05		
1,3,5-Cycloheptatriene	000544-25-2	1	1,09E+05	2	1,24E+05
1,3-Cyclopentadiene	000542-92-7	2	1,72E+05		
1,3-Cyclopentadiene, 1-methyl-	000096-39-9	1	2,17E+05		
1,3-Cyclopentadiene, 5-(1-methylethylidene)-	002175-91-9	1	4,40E+04		
1,3-Cyclopentadiene, 5-methyl-	000096-38-8	1	1,42E+05		
1,4-Dihydronaphthalene	000612-17-9	1	8,41E+05		
1H-Indene, 1,1-dimethyl-	018636-55-0	1	7,54E+05		
1H-Indene, 1-methyl-	000767-59-9	1	2,29E+06	1	2,81E+06
1H-Indene, 2,3-dihydro-4-methyl-	000824-22-6	1	1,45E+06		
1H-Indene, 2,3-dihydro-5-methyl-	000874-35-1	1	5,81E+05	1	4,21E+05
1H-Pyrrole, 1-methyl-	000096-54-8	1	4,98E+05	1	4,17E+05
2-Butene, 3-chloro-1-phenyl-, (Z)-	016608-68-7	1	1,96E+05		
2-Hexanone,6-hydroxy-	21856-89-3	1	3,16E+05		
2-Methylindene	002177-47-1	2	1,09E+06	1	1,36E+06
2-Pentanone, 4-hydroxy-	004161-60-8	1	1,05E+05	2	1,14E+05
3a,4,5,6,7,7a-Hexahydro-4,7-methanoindene	004488-57-7	2	4,90E+05	1	2,37E+05
4,7-Methano-1H-indene, 3a,4,7,7a-tetrahydro-	000077-73-6	2	5,53E+05	2	4,72E+05
4,7-Methano-1H-indene, octahydro-	006004-38-2	2	3,63E+05	2	3,14E+05
5-Norbornen-2-yl acetate	006143-29-9	1	3,22E+04		
9,10-Dimethylenetricyclo[4.2.1.1(2,5)]decane		1	3,48E+05		
9H-Fluorene, 2-methyl-	001430-97-3	1	4,49E+06		
Acenaphthene	000083-32-9	2	3,91E+06	2	3,90E+06

Nome	CAS	Método 1		Método 2	
		Replicados	Área	Replicados	Área
Benzene, 1,1'-(1-methyl-1,3-propanediyl)bis-	001520-44-1	2	3,45E+06	2	3,22E+06
Benzene, 1,2,4-trimethyl-	95-63-6	1	7,96E+04		
Benzene, 1,2-diethyl-	000135-01-3	1	1,28E+05		
Benzene, 1-ethenyl-2-methyl-	000611-15-4	1	1,42E+05		
Benzene, 1-ethenyl-3-methyl-	000100-80-1	2	5,92E+05	2	5,20E+05
Benzene, 1-ethyl-4-methyl-	000622-96-8	1	1,12E+05	1	8,69E+04
Benzene, 1-propenyl-	000637-50-3	1	5,10E+05	2	1,36E+05
Benzene, 2,4-dimethyl-1-(1-methylpropyl)-	001483-60-9	2	7,11E+05	1	1,31E+06
Benzene, 2-ethenyl-1,4-dimethyl-	002039-89-6	2	1,35E+05	2	2,53E+05
Benzene, 2-propenyl-	000300-57-2	2	1,49E+05		
Benzene, 4-ethyl-1,2-dimethyl-	000934-80-5	1	2,41E+05	1	2,92E+05
Benzene,(2,4-cyclopentadien-1-ylidenemethyl)-		2	1,36E+06		
Benzeneethanol, .beta.-ethenyl-	006052-63-7	1	5,81E+05		
Bicyclo[2.2.2]oct-5-ene-2,2,3,3-tetracarbonitrile	001017-93-2	1	7,57E+05		
Bicyclo[2.2.2]oct-5-ene-2,3-dicarbonitrile		1	3,62E+05		
Biphenylene	000259-79-0	2	2,56E+06	1	2,56E+06
Cholesta-4,6-dien-3-ol,(3b)-	14214-69-8	1	3,71E+05		
cis-Bicyclo(4,2,0)octa-3,7-diene		1	3,31E+04		
Fluorene	000086-73-7	2	8,77E+06	2	1,11E+07
Indan, 1-methyl-	000767-58-8	1	6,79E+05	1	5,78E+05
Indene	000095-13-6	2	5,75E+05	1	5,16E+05
Naphthalene	000091-20-3	1	1,69E+05		
Naphthalene, 1,2-dihydro-6-methyl-	002717-47-7	1	3,21E+05		
Naphthalene, 1,4,5-trimethyl-	002131-41-1	1	1,56E+06		
Naphthalene, 1,4,6-trimethyl-	002131-42-2	1	1,47E+06		

Nome	CAS	Método 1		Método 2	
		Replicados	Área	Replicados	Área
Naphthalene, 1,8-dimethyl-	000569-41-5	1	1,44E+06	1	1,21E+06
Naphthalene, 1-ethyl-	001127-76-0	2	1,10E+06	2	1,56E+06
Naphthalene, 1-methyl-	000090-12-0	1	6,66E+05	2	6,02E+06
Naphthalene, 2,3-dimethyl-	000581-40-8	2	5,00E+06	2	4,94E+06
Naphthalene, 2,6-dimethyl-	000581-42-0	2	1,42E+06	2	1,64E+06
Naphthalene, 2-ethyl-	000939-27-5	2	1,50E+06		
Naphthalene, 2-methyl-	000091-57-6	1	9,43E+06	1	4,88E+05
Nonadecane	000629-92-5	1	4,31E+05		
Nonane	000111-84-2	1	1,21E+05	2	7,68E+04
Phenanthrene	85-01-8	2	1,83E+06		
Spiro[2.4]hepta-4,6-diene	000765-46-8	2	9,78E+04		
Spiro[bicyclo[2.2.1]hept-5-ene-2,1'-cyclopropane]		1	3,05E+04		
Styrene	000100-42-5	2	4,49E+05	2	5,56E+05
Tetracyclo[5.3.0.0<2,6>.0<3,10>]deca-4,8-diene	034324-40-8	1	4,12E+05		
Tetradecane	000629-59-4	1	5,11E+05		
Toluene	000108-88-3	1	1,34E+05		
Tricyclo(6.2.2.0(2,7))dodeca-6,9-diene		2	6,04E+05		
Tricyclo[5.2.1.0(2,6)]dec-4-ene, 4-methyl-		1	4,85E+06		
Tridecane	629-50-5	2	3,16E+05		
1-(.beta.-d-Ribofuranosyl)-4-difluormethoxy-uracil				1	6,98E+05
1,3-Cyclopentadiene, 1-methyl-	000096-39-9			2	7,04E+04
1,4-Cyclohexadiene	000628-41-1			1	9,71E+04
2-Nonanone	821-55-6			2	9,69E+04
4,7-Methanoindene, 3a,4,5,6,7,7a-hexahydro-, endo-	002825-86-7			1	8,28E+05
4,7-Methanoisobenzofuran-1,3-dione, 3a,4,7,7a-tetrahydro-5-methyl-	000117-40-8			1	3,79E+05

Nome	CAS	Método 1		Método 2	
		Replicados	Área	Replicados	Área
Benzene, (2-cyclopropylethenyl)-				2	7,07E+05
Benzene, 1-ethenyl-3-ethyl-	007525-62-4			1	1,60E+05
Benzene, 1-ethenyl-4-methyl-	000622-97-9			1	1,80E+05
Bicyclo[2.1.1]hex-2-ene, 2-ethenyl-				2	3,49E+04
Bicyclo[4.2.0]octa-1,3,5-triene	000694-87-1			1	5,03E+04
Cycloprop[a]indene, 1,1a,6,6a-tetrahydro-	015677-15-3			1	1,66E+06
Naphthalene, 1,2,3,4-tetrahydro-	119-64-2			2	5,79E+05
Naphthalene, 2-ethenyl-	827-54-3			2	1,24E+06
Naphthalene, 1,6-dimethyl-	000575-43-9			1	1,63E+06
Naphthalene, 2,7-dimethyl-	000582-16-1			2	1,15E+06
Pentane, 2,2-dimethyl-	590-35-2			2	1,16E+05
Tricosane	000638-67-5			1	3,72E+05
Tricyclo(5.2.1.0(2,6))dec-3-ene, 4-ethyl-				1	6,07E+05

Tabela A.11. Compostos detetados no replicado C1 após ensaio de respirometria (Nome, CAS, área e método em que foram detetados)

Nome	CAS	Método 1	Método 2
		Área	Área
.alpha.,.beta.,.beta.-Trimethylstyrene	000769-57-3	3,92E+05	
1,2,3-Propanetriol, diacetate	25395-31-7	1,80E+06	
1,2,4a,4b,7,8,8a,8b-Octahydrobiphenylene		2,75E+05	2,04E+05
1,3,5-Cycloheptatriene	000544-25-2	1,40E+05	3,02E+05
1,3,5-Heptatriene, (E,E)-	17679-93-5	3,02E+04	
1,3-Cyclohexadiene	000592-57-4	3,93E+05	
1,3-Cyclopentadiene	000542-92-7	1,33E+05	5,34E+05
1,3-Cyclopentadiene, 5-(1-methylethylidene)-	2175-91-9		6,13E+04
11-Methylene-tricyclo(4.3.1.1(2,5))undecane			2,48E+05
1-Butanone, 2-hydroxy-1-phenyl-			8,39E+05
1-Cycloocten-5-yne, (Z)-	66633-23-6	2,37E+04	
1H-Cyclopropa[b]naphthalene, 1a,2,7,7a-tetrahydro-		2,48E+05	
1H-Indene, 1,3-dimethyl-	002177-48-2	3,07E+05	
1H-Indene, 1-ethenyl-2,3-dihydro-			1,21E+06
1H-Indene, 2,3-dihydro-1,6-dimethyl-	017059-48-2		4,25E+05
1H-Indene, 2,3-dihydro-4-methyl-	000824-22-6		7,72E+05
1H-Indene, 2,3-dihydro-5-methyl-	000874-35-1	1,81E+06	5,61E+05
1H-Indene, 2,3-dimethyl-	004773-82-4	5,69E+05	
1H-Indene, 4,7-dimethyl-	006974-97-6	2,37E+05	
2-Heptanol, acetate	5921-82-4		7,61E+04
2-Hexanethiol	1679-06-7		5,18E+04
2-Hexanol	626-93-7	7,24E+04	
2-Hexanone	000591-78-6		4,95E+04
2-Methylindene	002177-47-1	1,77E+06	3,88E+06

Nome	CAS	Método 1	Método 2
		Área	Área
2-Pentanone, 4-hydroxy-	004161-60-8	2,93E+05	3,36E+05
3a,4,5,6,7,7a-Hexahydro-4,7-methanoindene	004488-57-7	1,77E+06	1,18E+06
3-Hexanol	000623-37-0	7,63E+04	8,47E+04
3-Hexanone	000589-38-8	2,31E+04	
4,7-Methano-1H-indene, 3a,4,7,7a-tetrahydro-	000077-73-6	1,07E+06	1,03E+06
4,7-Methano-1H-indene, octahydro-	006004-38-2	1,40E+06	1,55E+06
5-Methylene-2-norbornene	000694-91-7	3,27E+04	
6,7-Dimethyl-3H-isobenzofuran-1-one		1,99E+06	
9,10-Dimethylenetricyclo(4.2.1.1(2,5))decane			3,67E+05
9H-Fluorene, 1-methyl-	001730-37-6	7,26E+04	
9H-Fluorene, 2-methyl-	001430-97-3	2,98E+06	
Acenaphthene	000083-32-9	3,59E+06	4,06E+06
Acetic acid	000064-19-7	3,76E+04	
Benzene((cyclohex-1-en-1-yl)methyl)-		2,11E+06	
Benzene, (2,4-cyclopentadien-1-ylidenemethyl)-		1,63E+06	
Benzene, (2-methyl-1-propenyl)-	000768-49-0	7,92E+05	8,58E+05
Benzene, 1,1'-(1-methyl-1,3-propanediyl)bis-	001520-44-1	2,55E+06	2,56E+06
Benzene, 1,2,4,5-tetramethyl-	000095-93-2		3,15E+05
Benzene, 1,2,4-trimethyl-	0095-63-6	1,09E+05	
Benzene, 1,2-diethyl-	000135-01-3	1,49E+05	
Benzene, 1,3,5-trimethyl-	000108-67-8		9,13E+04
Benzene, 1-butynyl-	000622-76-4		1,78E+06
Benzene, 1-ethenyl-2-methyl-	000611-15-4		5,87E+05
Benzene, 1-ethenyl-3-methyl-	000100-80-1	2,82E+05	3,58E+05
Benzene, 1-ethyl-2-methyl-	000611-14-3	8,45E+04	

Nome	CAS	Método 1	Método 2
		Área	Área
Benzene, 1-ethyl-3-methyl-	000620-14-4	1,22E+05	1,17E+05
Benzene, 1-ethyl-4-methyl-	000622-96-8		8,27E+04
Benzene, 1-methyl-2-(1-methylethyl)-	000527-84-4	1,84E+05	
Benzene, 1-methyl-3-(1-methylethyl)-	000535-77-3		2,24E+05
Benzene, 1-methyl-3-propyl-	001074-43-7		1,10E+05
Benzene, 1-methyl-4-(1-methylethyl)-	000099-87-6		1,03E+05
Benzene, 2,4-dimethyl-1-(1-methylpropyl)-	001483-60-9		2,03E+06
Benzene, 2-ethenyl-1,4-dimethyl-	002039-89-6	3,11E+05	3,01E+05
Benzene, 2-ethyl-1,4-dimethyl-	001758-88-9		1,92E+05
Benzene, 4-ethyl-1,2-dimethyl-	000934-80-5	2,91E+05	4,00E+05
Benzeneethanol, alfa, beta-dimethyl-	52089-32-4	2,73E+04	
Bicyclo[2.2.1]hept-2-ene, 2-methyl-	000694-92-8	9,93E+05	
Bicyclo[2.2.1]heptan-2-ol, 1,3,3-trimethyl-, (1R-endo)-			7,09E+05
Biphenyl	000092-52-4		2,43E+06
Biphenylene	000259-79-0	1,41E+06	2,02E+06
Borinic acid,diethyl-,methyl ester	7397-46-8	2,83E+04	
Butane, 2,2,3,3-tetramethyl	000594-82-1	2,21E+05	1,91E+05
Cyclobutene, 2-propenylidene-		2,54E+05	
Cyclohexane, 1,2-dichloro-, trans-	000822-86-6	6,01E+05	
Cyclohexene, 4-chloro-	000930-65-4		7,02E+05
Cyclopentene,3-methylene-	000930-26-7	3,25E+05	
Cyclopropane, (1-methyl-1,2-propadienyl)-	051549-86-1		3,14E+04
Dodecane	112-40-3	1,16E+06	
Eicosane	000112-95-8	7,62E+05	
Ethanol, 2,2'-oxybis-	000111-46-6		5,28E+04

Nome	CAS	Método 1	Método 2
		Área	Área
Fluorene	000086-73-7	7,30E+06	9,37E+06
Hexane, 3-methyl-	000589-34-4	1,21E+05	
Indane	000496-11-7	5,32E+05	
Indene	000095-13-6	6,57E+05	4,42E+05
Naphthalene, 1,2-dihydro-6-methyl-	002717-47-7	1,14E+06	
Naphthalene, 1,6-dimethyl-	000575-43-9	1,17E+06	
Naphthalene, 1-ethyl-	001127-76-0	2,03E+06	1,17E+06
Naphthalene, 1-methyl-	000090-12-0	2,70E+07	1,36E+07
Naphthalene, 2,3-dimethyl-	000581-40-8	5,83E+06	5,92E+06
Naphthalene, 2,6-dimethyl-	000581-42-0	2,32E+06	1,56E+06
Naphthalene, 2,7-dimethyl-	000582-16-1		2,58E+06
Naphthalene, 2-ethenyl	827-54-3		1,31E+06
Naphthalene, 2-ethyl-	000939-27-5		2,07E+06
Naphthalene, 2-methyl-	000091-57-6		6,64E+06
Nonadecane	000629-92-5		7,33E+05
Nonane	000111-84-2	6,96E+04	8,10E+04
Oxirane, 2-methyl-2-(1-methylethyl)-	72221-03-5	1,02E+05	
Pentane, 2,2-dimethyl-	000590-35-2	3,18E+05	
Pentane, 2,3-dimethyl-	565-59-3		1,30E+05
Spiro[2.4]hepta-4,6-diene	000765-46-8		1,29E+05
Styrene	000100-42-5	4,69E+05	6,21E+05
Tetracyclo[5.3.0.0<2,6>.0<3,10>]deca-4,8-diene	034324-40-8		3,86E+05
Triacetin	000102-76-1		1,83E+06
Tricyclo(4.1.1.0(7,8))oct-3-ene	102575-25-7		7,36E+04
Tricyclo(5.2.1.0(2,6))dec-3-ene, 4-ethyl-		1,79E+06	

Nome	CAS	Método 1	Método 2
		Área	Área
Tricyclo(5.2.1.0(2,6))dec-3-ene, 4-ethyl-			1,36E+06
Tricyclo(6.2.2.0(2,7))dodeca-6,9-diene-		1,45E+06	1,46E+06
Tricyclo[5.2.1.0(2,6)]dec-4-ene, 4-methyl-		5,56E+06	
Tricyclo[5.2.1.0(2,6)]deca-3,6-diene-8,9-dicarboxylic acid, 4-methyl-, dimethyl ester, endo-	1000150-64-4	3,79E+05	
Tridecane	000629-50-5	3,54E+05	

Tabela A.12. Compostos detetados no replicado C2 após ensaio de respirometria (Nome, CAS, área e método em que foram detetados)

Nome	CAS	Método 1	Método 2
		Área	Área
1,2,3-Propanetriol, diacetate	025395-31-7	1,06E+06	7,00E+05
1,2,4a,4b,7,8,8a,8b-Octahydrobiphenylene		3,76E+05	
1,3,5-Cycloheptatriene	000544-25-2	1,72E+05	2,42E+05
1,3-Cyclopentadiene	000542-92-7	2,42E+05	4,97E+05
1,3-Cyclopentadiene, 1-methyl-	000096-39-9	3,28E+05	
11-Methylene-tricyclo[4.3.1.1(2,5)]undecane		4,22E+05	2,17E+05
2,4-Dimethylstyrene	2234-20-0	3,61E+05	
2-Hexanol	000626-93-7	1,55E+05	
2-Hexanone	000591-78-6	1,60E+05	7,87E+04
2-Pentanone, 4-hydroxy-	004161-60-8	4,33E+05	3,74E+05
2-Tolyloxirane		7,38E+04	
3a,4,5,6,7,7a-Hexahydro-4,7-methanoindene	004488-57-7	2,52E+06	1,48E+06
3-Hexanol	000623-37-0	1,73E+05	1,18E+05
3-Hexanone	000589-38-8	7,84E+04	
4,7-Methano-1H-indene, 3a,4,7,7a-tetrahydro-	000077-73-6	1,95E+06	1,37E+06
4,7-Methano-1H-indene, octahydro-	006004-38-2	2,01E+06	1,69E+06
Acenaphthene	000083-32-9	2,45E+06	2,18E+06
Acetic acid	000064-19-7	6,15E+04	
Benzene, (2,4-cyclopentadien-1-ylidenemethyl)-		8,76E+05	
Benzene, (2-cyclopropylethenyl)-		7,63E+05	
Benzene, (3-methyl-2-butenyl)-	004489-84-3	3,20E+05	
Benzene, 1,2,4,5-tetramethyl-	000095-93-2	3,07E+05	
Benzene, 1,2,4-trimethyl-	000095-63-6	1,86E+05	
Benzene, 1,4-diethyl-	000105-05-5	2,14E+05	

Nome	CAS	Método 1	Método 2
		Área	Área
Benzene, 1-butynyl-	000622-76-4	1,66E+06	
Benzene, 1-ethenyl-3-methyl-	000100-80-1	1,74E+05	1,62E+05
Benzene, 1-ethyl-3,5-dimethyl-	934-74-7	7,02E+05	
Benzene, 1-ethyl-3-methyl-	000620-14-4	2,66E+05	1,72E+05
Benzene, 1-methyl-3-propyl-	1074-43-7	1,71E+05	
Benzene, 1-methyl-4-(1-methylethyl)-	000099-87-6	1,56E+05	
Benzene, 1-propenyl-	637-50-3	1,10E+05	
Benzene, 2-ethenyl-1,4-dimethyl-	002039-89-6	2,41E+05	1,80E+05
Benzene, 4-ethyl-1,2-dimethyl-	000934-80-5	1,51E+05	3,54E+05
Bicyclo[2.2.1]hept-2-ene, 5-ethenyl-	3048-64-4	6,47E+04	
Bicyclo[2.2.2]oct-5-ene-2,2,3,3-tetracarbonitrile	001017-93-2	5,22E+05	
Bicyclo[2.2.2]oct-5-ene-2-carbonitrile, 2-chloro-		5,00E+05	
Butane, 2,2,3,3-tetramethyl-	000594-82-1	5,08E+05	
Cyclobutane, 1,2-bis(1,3-butadienyl)-		1,48E+06	
Cyclohexane, methyl-	000108-87-2	2,56E+04	
Cyclopentane, 1,1-dimethyl-	001638-26-2	3,19E+04	
Cyclopentane, ethyl-	1640-89-7	2,92E+04	
Decane, 2,5,6-trimethyl-		3,71E+04	
Dodecane	000112-40-3	8,03E+05	
Fluorene	000086-73-7	4,50E+06	4,90E+06
Heptane, 3,4,5-trimethyl-	020278-89-1	3,54E+04	3,86E+04
Heptane, 4-propyl-	3178-29-8	2,54E+04	
Hexane, 2-methyl-	000591-76-4	1,21E+06	8,88E+05
Hexane, 3-ethyl-	619-99-8	3,14E+04	
Hexane, 3-methyl-	000589-34-4	2,30E+05	

Nome	CAS	Método 1	Método 2
		Área	Área
Indan, 1-methyl-	000767-58-8	9,52E+05	7,59E+05
Indane	000496-11-7	8,08E+05	
Naphthalene, 1,2-dihydro-6-methyl-	002717-47-7	3,12E+05	
Naphthalene, 1-ethyl-	001127-76-0	1,20E+06	7,64E+05
Naphthalene, 2,3-dimethyl-	000581-40-8	4,27E+06	3,45E+06
Naphthalene, 2,6-dimethyl-	000581-42-0	1,56E+06	1,16E+06
Naphthalene, 2-methyl-	000091-57-6	9,40E+06	8,07E+06
Nonane	000111-84-2	1,55E+05	1,24E+05
Pentane, 2,2-dimethyl-	000590-35-2	4,21E+05	
Pentane, 3,3-dimethyl-	000562-49-2	5,73E+04	
Phenanthrene	000085-01-8	2,54E+06	
Styrene	000100-42-5	4,29E+05	4,32E+05
Toluene	000108-88-3	9,65E+04	9,28E+04
Tricyclo[4.2.1.0<2,5>]non-3-ene	007078-40-2	3,74E+04	
Tricyclo[5.2.1.0(2,6)]dec-4-ene, 4-methyl-		5,81E+06	3,38E+06
Tricyclo[6.2.2.0(2,7)]dodeca-6,9-diene		1,50E+06	
1-Cycloocten-5-yne, (Z)-	66633-23-6		4,88E+04
1,3-Dioxolane-2-butanol, 2-methyl-			4,65E+04
1H-Indene, 2,3-dihydro-4-methyl-	000824-22-6		6,59E+05
2-Methylindene	002177-47-1		1,26E+06
4,7-Methanoisobenzofuran-1,3-dione, 3a,4,7,7a-tetrahydro-5-methyl-	000117-40-8		1,82E+05
Benzene, 1,2,3-trimethyl-	000526-73-8		8,45E+04
Benzene, 1,3-diethyl-	141-93-5		2,64E+05
Benzene, 1-cyclopenten-1-yl-	825-54-7		9,01E+05
Benzene, 1-ethenyl-2-methyl-	611-15-4		7,40E+05

Nome	CAS	Método 1	Método 2
		Área	Área
Benzene, 1-ethenyl-4-ethyl-	003454-07-7		4,28E+05
Benzene, 1-ethyl-2,3-dimethyl-	000933-98-2		2,79E+05
Benzene, 1-ethyl-4-methyl-	000622-96-8		1,30E+05
Benzene, 2,4-dimethyl-1-(1-methylpropyl)-	001483-60-9		1,46E+06
Benzene, 2-ethyl-1,4-dimethyl-	001758-88-9		1,22E+05
Bicyclo[2.2.2]oct-2-ene	000931-64-6		7,53E+05
Naphthalene, 1,2,3,4-tetrahydro-	000119-64-2		1,14E+06
Naphthalene, 2-ethenyl-	827-54-3		5,33E+05
Nonadecane	000629-92-5		3,39E+05
Tetracyclo[5.3.0.0<2,6>.0<3,10>]deca-4,8-diene	034324-40-8		2,91E+05
Tricyclo[5.2.1.0(2,6)]dec-3-ene, 4-ethyl-			7,83E+05

Tabela A.13. Compostos detetados na amostra D inicial (Nome, CAS, área, método e número de replicados em que foram detetados)

Nome	CAS	Método 1		Método 2	
		Replicados	Área	Replicados	Área
2-Pentanone, 4-hydroxy-	004161-60-8	2	7,02E+04	2	7,05E+04
Acetic acid	64-19-7			1	1,01E+05
Benzene	000071-43-2	2	5,38E+04	1	3,73E+04
Benzene, 1,2,4-trimethyl-	95-63-6			1	2,78E+04
Benzene, 1-ethyl-3-methyl-	620-14-4	1	4,10E+04		
Hexane, 2,4-dimethyl-	000589-43-5	1	3,96E+05		
Nonane	000111-84-2	2	8,99E+04	2	1,03E+05
Pentane, 2,4-dimethyl-	000108-08-7			1	9,68E+04
Phenanthrene	000085-01-8	1	3,06E+07		
Propanoic acid,2-oxo-	127-17-3	2	4,74E+04		

Tabela A.14. Compostos detetados no replicado D1 após ensaio de respirometria (Nome, CAS, área e método em que foram detetados)

Nome	CAS	Método 1	Método 2
		Área	Área
2-Heptanol, acetate	5921-82-4		1,09E+05
2-Hexanethiol	001679-06-7	8,98E+04	9,41E+04
2-Hexanol, (S)-	052019-78-0		1,96E+05
2-Hexanol, 3,4-dimethyl-	19550-05-1		3,25E+04
2-Hexanone	000591-78-6	1,50E+05	1,14E+05
2-Pentanone, 4-hydroxy-	004161-60-8	4,78E+05	5,10E+05
2-Propanone, 1-chloro-	000078-95-5	2,96E+04	
3-Hexanol	000623-37-0	1,97E+05	1,49E+05
3-Hexanone	000589-38-8	6,88E+04	6,56E+04
4,4-Ethylenedioxy-1-pentylamine			7,85E+04
Acetic acid	000064-19-7	6,42E+04	
Bicyclo[4.2.0]octa-1,3,5-triene	000694-87-1	1,12E+05	
Ethanol, 2-(2-butoxyethoxy)-, acetate	124-17-4	8,14E+04	
Furan, tetrahydro-2,5-dimethyl-, cis-	2144-41-4		3,68E+04
Heptane, 2,2,4,6,6-pentamethyl-	013475-82-6	3,10E+05	
Hexane, 2-methyl-	000591-76-4	7,64E+05	6,82E+05
Hexane, 3-methyl-	000589-34-4	1,39E+05	
Nonane	000111-84-2	1,01E+05	9,64E+04
Pentane, 2,2,4-trimethyl-	000540-84-1		2,74E+05
Pentane, 3,3-dimethyl-	000562-49-2	3,21E+04	
Propanoic acid, 2-methyl-, 1-(1,1-dimethylethyl)-2-methyl-1,3-propanediyl ester		9,33E+05	8,02E+05
Styrene	000100-42-5		1,34E+05
Triacetin	000102-76-1	1,17E+06	1,11E+06

Tabela A.15. Compostos detetados no replicado D2 após ensaio de respirometria (Nome, CAS, área e método em que foram detetados)

Nome	CAS	Método 1	Método 2
		Área	Área
1,3-Dioxolane-2-butanol, 2-methyl-			8,50E+04
1-Butoxy-2-propanol acetate		8,25E+04	
1-Octadecene	000112-88-9		5,03E+05
2-Hexanethiol	001679-06-7	1,18E+05	
2-Hexanol	000626-93-7	2,09E+05	1,85E+05
2-Hexanol, 3,4-dimethyl-	19550-05-1		2,07E+04
2-Hexanone	000591-78-6	1,42E+05	1,02E+05
2-Pentanethiol, 4-methyl-	001639-05-0		1,26E+05
2-Pentanone, 4-hydroxy-	004161-60-8	4,54E+05	4,52E+05
2-Propanone, 1-chloro-	000078-95-5	2,03E+04	
3-Heptadecene, (Z)-		5,60E+05	
3-Hexanol	000623-37-0	1,95E+05	1,34E+05
3-Hexanone	000589-38-8	6,55E+04	5,05E+04
Acetic acid	000064-19-7	5,73E+04	1,03E+05
Butanal	000123-72-8	2,72E+04	
Butane, 2,2,3,3-tetramethyl-	000594-82-1	2,86E+05	
Cyclohexane	000110-82-7		1,75E+06
Furan, tetrahydro-2,5-dimethyl-	001003-38-9		2,93E+04
Furan, tetrahydro-2,5-dimethyl-, trans-(<i>trans</i>)-	38484-59-2	2,75E+04	
Hexane, 2-methyl-	000591-76-4	7,45E+05	6,77E+05
Hexane, 3-methyl-	000589-34-4	1,31E+05	
Hydrazine, 1,1-dimethyl-2-(1-methylpropyl)-	054007-24-8	2,05E+04	
Isobornyl acetate	125-12-2	4,99E+04	

Nome	CAS	Método 1	Método 2
		Área	Área
N-Ethyl-3-methoxyaniline			3,22E+04
Nonane	000111-84-2	9,11E+04	9,75E+04
Pentane, 2,2,4-trimethyl-	000540-84-1		2,44E+05
Pentane, 2,2-dimethyl-	000590-35-2	3,24E+05	
Pentane, 3,3-dimethyl-	000562-49-2	4,08E+04	
Propanoic acid, 2-methyl-, 1-(1,1-dimethylethyl)-2-methyl-1,3-propanediyl ester		1,10E+06	9,67E+05
Styrene	000100-42-5	1,07E+05	1,21E+05
Triacetin	000102-76-1	1,02E+06	9,60E+05

Tabela A.16. Compostos detetados na amostra E inicial (Nome, CAS, área, método e número de replicados em que foram detetados)

Nome	CAS	Método 1		Método 2	
		Replicados	Área	Replicados	Área
1,1'-Biphenyl, 3-methyl-	000643-93-6	2	2,24E+06	1	1,92E+06
1,3,5-Cycloheptatriene	000544-25-2			2	5,03E+04
1,4-Dihydronaphthalene	000612-17-9			1	1,63E+06
1H-Indene, 1,1-dimethyl-	018636-55-0	1	7,00E+05		
1H-Indene, 1,3-dimethyl-	002177-48-2	1	2,52E+05		
1H-Indene, 2,3-dihydro-5-methyl-	000874-35-1	1	8,96E+05	1	8,28E+05
1H-Indene, 2,3-dimethyl-	004773-82-4	1	3,93E+05		
1H-Indene, 4,7-dimethyl-	006974-97-6	1	2,16E+05		
1-Propanone, 1-(2,4-dimethylphenyl)-	35031-55-1			2	4,96E+05
2,4-Dimethylstyrene	002234-20-0	1	2,63E+05	1	1,75E+05
2-Heptanol,acetate	5921-82-4	1	3,98E+05		
2-Methylindene	002177-47-1	1	3,37E+05		
2-Pentanone, 4-hydroxy-	004161-60-8	1	1,74E+05	1	1,89E+05
2-Tolyloxirane				1	1,30E+05
3a,4,5,6,7,7a-Hexahydro-4,7-methanoindene	004488-57-7	1	1,27E+06	1	7,51E+05
3-Hexanol,4-ethyl-	19780-44-0	1	2,95E+04	1	3,56E+04
3-Penten-1-yne, (E)-	002004-69-5	1	3,85E+04		
4,7-Methano-1H-indene, 3a,4,7,7a-tetrahydro-	000077-73-6	2	7,53E+05	2	7,24E+05
4,7-Methano-1H-indene, octahydro-	006004-38-2			1	3,15E+05
Acenaphthene	000083-32-9	2	1,68E+06	2	1,81E+06
Benzene, (1-methyl-2-cyclopropen-1-yl)-	065051-83-4	1	5,32E+06	1	4,78E+06
Benzene, (1-methylethyl)-	000098-82-8	1	7,33E+04	1	5,39E+04
Benzene, (2-methyl-1-propenyl)-	000768-49-0			1	1,45E+05
Benzene, 1,1'-(1-ethenyl-1,3-propanediyl)bis-	61141-87-7	1	7,61E+04		

Nome	CAS	Método 1		Método 2	
		Replicados	Área	Replicados	Área
Benzene, 1,2,3-trimethyl-	526-73-8			1	2,81E+05
Benzene, 1,2,4,5-tetramethyl-	000095-93-2			1	2,62E+05
Benzene, 1,2-diethyl-	000135-01-3	1	8,99E+04		
Benzene, 1,3,5-trimethyl-	000108-67-8	1	1,76E+05	1	1,81E+05
Benzene, 1,3-diethenyl-	000108-57-6	1	7,98E+04	1	2,87E+05
Benzene, 1,3-dimethyl-	000108-38-3	1	1,22E+05		
Benzene, 1-butynyl-	000622-76-4	1	5,93E+05	1	1,50E+05
Benzene, 1-ethenyl-2-methyl-	000611-15-4	1	4,60E+05	1	6,12E+05
Benzene, 1-ethenyl-3,5-dimethyl-	005379-20-4			1	2,40E+05
Benzene, 1-ethenyl-3-ethyl-	007525-62-4			1	3,79E+05
Benzene, 1-ethenyl-3-methyl-	000100-80-1	2	3,59E+05	1	1,67E+06
Benzene, 1-ethenyl-4-methyl-	000622-97-9	1	4,53E+04		
Benzene, 1-ethyl-2-methyl-	000611-14-3	1	1,19E+05	1	1,87E+05
Benzene, 1-ethyl-3,5-dimethyl-	000934-74-7			1	2,15E+05
Benzene, 1-ethyl-3-methyl-	000620-14-4	1	3,52E+05	1	3,14E+05
Benzene, 1-methyl-2-(1-methylethyl)-	000527-84-4			1	1,35E+05
Benzene, 1-methyl-3-(1-methylethyl)-	000535-77-3			1	2,46E+05
Benzene, 1-methyl-3-propyl-	001074-43-7	1	1,17E+05		
Benzene, 1-methyl-4-(1-methylethyl)-	000099-87-6	1	2,53E+05		
Benzene, 1-propenyl-	000637-50-3	1	8,09E+04	2	7,65E+04
Benzene, 2,4-dimethyl-1-(1-methylpropyl)-	001483-60-9	1	4,24E+05		
Benzene, 2-butenyl-	001560-06-1	2	3,09E+04		
Benzene, 2-ethenyl-1,3,5-trimethyl-	000769-25-5	1	1,40E+05		
Benzene, 2-ethenyl-1,4-dimethyl-	002039-89-6	1	3,52E+05	1	2,70E+05
Benzene, 2-propenyl-	000300-57-2			1	5,83E+04

Nome	CAS	Método 1		Método 2	
		Replicados	Área	Replicados	Área
Benzene, 4-ethyl-1,2-dimethyl-	000934-80-5	1	1,69E+05		
Benzene, cyclopropyl-	000873-49-4	1	6,34E+05		
Benzene, propyl-	000103-65-1	1	6,61E+04		
Benzene,((methylsulfinyl)methyl)-	824-86-2	1	3,12E+04		
Biphenyl	000092-52-4	2	4,94E+06	1	4,70E+06
Biphenylene	000259-79-0			1	1,63E+06
Cycloprop[a]indene, 1,1a,6,6a-tetrahydro-	015677-15-3			1	3,06E+05
Decane	000124-18-5	1	7,24E+04	1	8,36E+04
Ethylbenzene	000100-41-4	1	1,47E+05	1	1,42E+05
Fluorene	000086-73-7	2	3,42E+06	2	4,17E+06
Indane	000496-11-7			1	4,68E+05
Indene	000095-13-6	2	2,91E+06	2	2,54E+06
Naphthalene	000091-20-3	2	3,17E+07	1	3,09E+07
Naphthalene, 1,2,3,4-tetrahydro-	000119-64-2	1	5,54E+05	1	5,63E+05
Naphthalene, 1,2-dihydro-	000447-53-0	1	1,84E+06		
Naphthalene, 1,2-dihydro-6-methyl-	002717-47-7	1	6,26E+05	1	7,06E+05
Naphthalene, 1,7-dimethyl-	000575-37-1	1	1,10E+06	1	7,30E+05
Naphthalene, 1-ethyl-	001127-76-0			2	1,08E+06
Naphthalene, 1-methyl-	000090-12-0			1	1,58E+07
Naphthalene, 2,3-dimethyl-	000581-40-8	1	2,82E+06	1	3,32E+06
Naphthalene, 2,6-dimethyl-	000581-42-0	1	8,32E+05	1	6,90E+05
Naphthalene, 2-ethyl-	000939-27-5	1	9,74E+05		
Naphthalene, 2-methyl-	000091-57-6	2	1,14E+07	1	9,41E+06
Nonane	000111-84-2	1	2,48E+05	1	2,21E+05
o-Xylene	000095-47-6			1	1,20E+05

Nome	CAS	Método 1		Método 2	
		Replicados	Área	Replicados	Área
Phenethylamine, N-benzyl-p-chloro-				1	3,67E+04
p-Xylene	000106-42-3	1	1,38E+05	1	1,73E+05
Pyrene	000129-00-0	1	3,43E+05		
Styrene	000100-42-5	2	1,57E+05	2	1,70E+05
Toluene	000108-88-3	1	4,02E+04	1	3,08E+04

Tabela A.17. Compostos detetados no replicado E1 após ensaio de respirometria (Nome, CAS, área, método e número de replicados em que foram detetados)

Nome	CAS	Método 1		Método 2	
		Replicados	Área	Replicados	Área
(1-Methylbuta-1,3-dienyl)benzene		2	4,00E+05		
1,1'-Biphenyl, 2-methyl-	000643-58-3	2	3,67E+05		
1,1'-Biphenyl, 3-methyl-	000643-93-6			2	1,16E+06
1,1'-Biphenyl, 4-methyl-	000644-08-6	2	1,29E+06		
1,2,3-Propanetriol, diacetate	025395-31-7	1	1,67E+06	2	5,74E+05
1,2,3-Propanetriol, monoacetate	026446-35-5	2	5,69E+04		
1,3,5,7-Cyclooctatetraene	000629-20-9	1	1,07E+05	1	1,16E+05
1,4-Dihydronaphthalene	000612-17-9	2	1,85E+05	1	3,52E+05
1,4-Methanonaphthalene,1,4-dihydro-9-((1-methylethylidene)-	007350-72-3	1	3,60E+05		
1H-Cyclopropa[b]naphthalene, 1a,2,7,7a-tetrahydro-		1	3,25E+04		
1H-Indene, 1,1-dimethyl-	018636-55-0	1	6,88E+04		
1H-Indene, 1,3-dimethyl-	002177-48-2	1	6,11E+04		
1H-Indene, 1-methyl-	000767-59-9	1	1,31E+06		
1H-Indene, 1-methylene-	002471-84-3	2	4,54E+04		
1H-Indene, 2,3-dihydro-4-methyl-	000824-22-6	2	2,67E+04		
1H-Indene, 2,3-dimethyl-	004773-82-4	2	2,65E+04		
1H-Indene, 3-methyl-	000767-60-2			1	2,89E+05
1H-Indene, 4,7-dimethyl-	006974-97-6	1	2,98E+04		
2,2'-Dimethylbiphenyl	000605-39-0	2	4,90E+05		
2-Ethyl-1-H-indene	017059-50-6	2	2,34E+05		
2-Ethyl-2,3-dihydro-1H-indene	56147-63-8	1	8,46E+04		
2-Methylindene	002177-47-1	1	7,73E+05	1	7,87E+05
2-Pentanone, 4-hydroxy-	004161-60-8	1	8,57E+04	1	1,12E+05
3-(2-Methyl-propenyl)-1H-indene		2	1,12E+05		

Nome	CAS	Método 1		Método 2	
		Replicados	Área	Replicados	Área
3a,4,5,6,7,7a-Hexahydro-4,7-methanoindene	004488-57-7	2	2,60E+05		
3-Hexanol	000623-37-0	1	3,34E+04		
4,7-Methano-1H-indene, 3a,4,7,7a-tetrahydro-	000077-73-6	2	5,68E+04	1	1,25E+05
5-Ethyldecane	17302-36-2	2	4,93E+04		
9H-Fluorene, 1-methyl-	001730-37-6	1	7,49E+05		
9H-Fluorene, 2,3-dimethyl-	004612-63-9	2	6,97E+04		
9H-Fluorene, 2-methyl-	001430-97-3	2	1,08E+06		
Acenaphthene	000083-32-9	2	9,74E+05	1	1,68E+06
Acenaphthylene	000208-96-8	1	8,24E+05		
Azulene, 4,6,8-trimethyl-	000941-81-1	1	3,54E+05		
Benzene, (1-methyl-2-cyclopropen-1-yl)-	065051-83-4	1	3,14E+05		
Benzene, (2-methyl-1-butenyl)-	056253-64-6	1	5,28E+04		
Benzene, (3-methyl-2-butenyl)-	004489-84-3	1	2,48E+04		
Benzene, [1-(2,4-cyclopentadien-1-ylidene)ethyl]-		1	2,58E+05		
Benzene, 1,1'-(1-ethenyl-1,3-propanediyl)bis-	061141-97-7	1	3,77E+04		
Benzene, 1,1'-(1-methyl-1,3-propanediyl)bis-	001520-44-1	2	8,35E+05		
Benzene, 1,2,3,4-tetramethyl-	000488-23-3	1	6,18E+04		
Benzene, 1,2,4,5-tetramethyl-	00095-93-2	1	4,29E+04		
Benzene, 1,3,5-trimethyl-	000108-67-8	1	2,37E+04		
Benzene, 1,3-diethenyl-	000108-57-6	2	3,91E+04		
Benzene, 1-butyryl-	000622-76-4	1	7,71E+04	1	1,10E+05
Benzene, 1-ethenyl-2-methyl-	000611-15-4			1	2,07E+05
Benzene, 1-ethenyl-3-methyl-	000100-80-1	1	4,22E+05	1	3,62E+05
Benzene, 1-ethenyl-4-methyl-	000622-97-9	1	1,98E+05		
Benzene, 1-ethyl-3-methyl-	000620-14-4	1	5,60E+04		

Nome	CAS	Método 1		Método 2	
		Replicados	Área	Replicados	Área
Benzene, 1-methyl-4-(2-propenyl)-	003333-13-9	1	8,55E+04		
Benzene, 1-propenyl-	000637-50-3	1	1,00E+05		
Benzene, 2,4-dimethyl-1-(1-methylpropyl)-	001483-60-9	1	1,55E+05		
Benzene, 2-ethenyl-1,3,5-trimethyl	000769-25-5	1	3,88E+04		
Benzene, 2-ethenyl-1,4-dimethyl-	002039-89-6	2	3,31E+04		
Benzene, 2-propenyl-	00300-57-2	1	8,38E+04		
Benzene, 4-ethyl-1,2-dimethyl-	000934-80-5	1	3,50E+04		
Benzene,((1-methylethylidene)cyclopropyl)-,(R)-		1	5,33E+04		
Bicyclo[4.2.0]octa-1,3,5-triene	000694-87-1	1	1,08E+05		
Bicyclo[4.2.0]octa-1,3,5-triene, 2,4-dimethyl-		1	3,85E+04		
Bicyclo[4.2.0]octa-1,3,5-triene, 7-methyl-		1	5,64E+04		
Biphenyl	000092-52-4	2	1,60E+06	1	3,77E+06
Biphenylene	000259-79-0	1	9,47E+05		
Butane, 2,2,3-trimethyl-	000464-06-2	1	9,87E+04		
Cyclobutanespiro-2`-bicyclo(1.1.0)butane-4`-spirocyclobutane	000095-47-6	1	4,06E+04		
Cyclobutene, 2-propenyldiene				1	3,36E+04
Cycloprop[a]indene, 1,1a,6,6a-tetrahydro-	015677-15-3			1	9,65E+05
Decane, 6-ethyl-2-methyl-	62108-21-8			1	2,21E+04
Dibutyl phthalate	00084-74-2	2	1,15E+06		
Dicyclopropa[cd,gh]pentalene, octahydro-1-(2-methyl-1-propenylidene)-	062025-03-0	2	1,93E+05		
Fluorene	000086-73-7	2	2,64E+06	2	2,17E+06
Fluorene, 1,4-dihydro-		2	7,87E+05		
Fluorene, 2,4a-dihydro-		2	7,66E+05		
Fluorene-9-methanol	024324-17-2	1	5,75E+05		
Hexadecane	000544-76-3	2	5,60E+05		

Nome	CAS	Método 1		Método 2	
		Replicados	Área	Replicados	Área
Hexane, 2,2,4-trimethyl-	016747-26-5	2	5,23E+04		
Hexane, 2,2-dimethyl-	590-73-8			2	6,66E+04
Hexane, 2-methyl-	000591-76-4	2	1,48E+05	2	1,86E+05
Hexane, 3-methyl-	000589-34-4	2	3,12E+04		
Indene	000095-13-6	2	1,64E+05	1	4,05E+05
Naphthalene	000091-20-3	2	2,07E+06	2	2,18E+06
Naphthalene, 1,2,3,4-tetrahydro-	000119-64-2	1	1,49E+05		
Naphthalene, 1,2-dihydro-3-methyl-	002717-44-4	1	1,18E+05		
Naphthalene, 1,3-dimethyl-	000575-41-7	1	1,28E+06		
Naphthalene, 1,4,5-trimethyl-	002131-41-1	1	4,04E+05		
Naphthalene, 1,4,6-trimethyl-	002131-42-2	2	1,43E+05		
Naphthalene, 1,6-dimethyl-	000575-43-9	1	1,41E+05		
Naphthalene, 1,7-dimethyl-	000575-37-1	1	4,73E+05		
Naphthalene, 1,8-dimethyl-	000569-41-5	2	7,18E+04		
Naphthalene, 1-ethyl-	001127-76-0	2	4,67E+05		
Naphthalene, 1-methyl-	000090-12-0			2	2,91E+06
Naphthalene, 2,3-dimethyl-	000581-40-8	2	2,32E+05	1	3,00E+06
Naphthalene, 2,6-dimethyl-	000581-42-0	2	3,50E+05	1	6,71E+05
Naphthalene, 2-ethenyl-	000827-54-3	2	8,89E+05	1	1,52E+06
Naphthalene, 2-ethyl-	000939-27-5			1	9,43E+05
Naphthalene, 2-methyl-	000091-57-6	1	9,56E+06	1	7,01E+06
o-Isopropenyltoluene	007399-49-7	1	2,86E+04		
Pent-1-yn-3-ene, 4-methyl-3-phenyl-		2	4,44E+04		
Pentadecane	000629-62-9	1	2,40E+05		
Pentane, 2,2-dimethyl-	000590-35-2	1	8,90E+04		

Nome	CAS	Método 1		Método 2	
		Replicados	Área	Replicados	Área
Pentane, 2,3-dimethyl-	000565-59-3			2	5,56E+04
Pentane, 2,4-dimethyl-	000108-08-7			2	1,01E+06
Phenanthrene	000085-01-8	1	8,93E+06	2	1,70E+07
Phenanthrene, 1-methyl-	000832-69-9	1	1,65E+06		
Phenol, 2,4-bis(1,1-dimethylethyl)-	000096-76-4	1	9,03E+04		
Styrene	000100-42-5			1	1,84E+05
Tetradecane	000629-59-4	2	1,30E+05		
Triacetin	000102-76-1	1	9,13E+05		

Tabela A.18. Compostos detetados no replicado E2 após ensaio de respirometria (Nome, CAS, área, método e número de replicados em que foram detetados)

Nome	CAS	Método 1		Método 2	
		Replicados	Área	Replicados	Área
1,1'-Biphenyl, 3-methyl-	000643-93-6	2	4,19E+06	2	2,60E+06
1,3,5,7-Cyclooctatetraene	000629-20-9			1	2,48E+05
1,3,5-Cycloheptatriene	000544-25-2			1	4,85E+04
1,3-Cyclopentadiene, 1-methyl	96-39-9	1	2,79E+04		
1,3-Cyclopentadiene,5-(1-methylpropylidene)-	003141-02-4	1	4,13E+04	1	7,10E+04
1,4-Dihydronaphthalene	000612-17-9	1	1,07E+06	1	7,84E+05
1H-Indene, 1,1-dimethyl-	018636-55-0	1	6,50E+05		
1H-Indene, 2,3-dihydro-2-methyl-	000824-63-5	1	3,72E+05		
1H-Indene, 2,3-dimethyl-	004773-82-4	1	2,39E+05		
1H-Indene-1-methanol, alfa-methyl-,acetate		1	5,39E+05		
2,4-Dimethylstyrene	002234-20-0	1	1,62E+05	1	1,25E+05
2-Cyclopentene-1-propanal		1	9,80E+04		
2-Hexanone, 4-hydroxy-3-propyl-		1	2,09E+04		
2-Methylindene	002177-47-1	1	2,50E+06	1	2,24E+06
2-Pentanone, 4-hydroxy-	004161-60-8	1	9,77E+04	1	1,31E+05
3a,4,5,6,7,7a-Hexahydro-4,7-methanoindene	004488-57-7	1	4,02E+05		
3-Hexanol	623-37-0	1	4,55E+04	1	2,39E+04
4-(para-Tolyl)-butyric acid	4521-22-6			1	4,08E+04
4,7-Methano-1H-indene, 3a,4,7,7a-tetrahydro-	000077-73-6			1	1,40E+05
4,7-Methanoindene, 3a,4,5,6,7,7a-hexahydro-, endo-	002825-86-7			1	1,93E+05
Acenaphthene	000083-32-9	1	2,50E+06	1	2,47E+06
Acenaphthylene	000208-96-8	1	1,20E+06		

Nome	CAS	Método 1		Método 2	
		Replicados	Área	Replicados	Área
alfa-Nitrodibenzyl sulfone	21272-20-0	1	2,84E+04		
Anthracene	000120-12-7	1	7,26E+06		
Benzene, (1-methyl-1-propenyl)-, (E)-	000768-00-3			1	8,85E+04
Benzene, (1-methyl-2-cyclopropen-1-yl)-	065051-83-4	1	1,59E+06		
Benzene, (1-methylethyl)-	98-82-8	1	2,06E+04		
Benzene, (2-cyclopropylethenyl)-		1	6,46E+05		
Benzene, (2-methyl-1-propenyl)-	000768-49-0	1	1,03E+05		
Benzene, 1,3-diethenyl-	000108-57-6	1	1,95E+05		
Benzene, 1-butynyl-	000622-76-4			2	1,85E+05
Benzene, 1-ethenyl-2-methyl-	000611-15-4			1	1,31E+05
Benzene, 1-ethenyl-3-methyl-	000100-80-1	1	2,01E+05	2	1,46E+05
Benzene, 1-ethenyl-4-ethyl-	003454-07-7			1	3,41E+05
Benzene, 1-ethenyl-4-methyl-	000622-97-9	1	1,48E+05		
Benzene, 1-ethyl-3-methyl-	000620-14-4	1	7,39E+04		
Benzene, 1-ethyl-4-methyl-	622-96-8			1	2,61E+04
Benzene, 1-methyl-2-(2-propenyl)-	001587-04-8			1	1,58E+05
Benzene, 1-methyl-4-(2-propenyl)-	003333-13-9			1	7,54E+04
Benzene, 1-propenyl-	000637-50-3	1	7,16E+05		
Benzene, 2-ethenyl-1,4-dimethyl-	002039-89-6	1	1,45E+05		
Benzene, 2-propenyl-	000300-57-2	1	1,29E+05	1	5,09E+05
Benzene, 4-ethyl-1,2-dimethyl-	000934-80-5	1	7,37E+04		
Bicyclo[4.2.0]octa-1,3,5-triene	000694-87-1	1	1,17E+05		
Biphenyl	000092-52-4	2	6,51E+06	1	5,94E+06
Biphenylene	000259-79-0			1	1,21E+06
Butane, 2,2,3,3-tetramethyl-	000594-82-1	1	1,49E+05	1	1,36E+05

Nome	CAS	Método 1		Método 2	
		Replicados	Área	Replicados	Área
Butane, 2,2,3-trimethyl-	000464-06-2	1	2,98E+05		
cis-Bicyclo(4.2.0)octa-3,7-diene		1	2,35E+04		
Cyclobuta[1,2:3,4]dicyclopentene, 1,3a,3b,4,6a,6b-hexahydro-	105226-58-2	2	1,97E+05		
Cyclobutene, 2-propenylidene-		1	9,77E+04	1	1,04E+05
Ethylbenzene	000100-41-4	1	2,44E+04		
Fluorene	000086-73-7	2	5,22E+06	1	5,98E+06
Hexadecane	000544-76-3	1	1,19E+06		
Hexane, 2,2,5-trimethyl-	003522-94-9	1	1,42E+05		
Hexane, 2,2-dimethyl	590-73-8			1	1,30E+05
Hexane, 3,3,4,4-tetramethyl	5171-84-6	1	3,80E+04		
Hexane, 3-methyl-	000589-34-4	2	8,90E+04		
Indane	000496-11-7	1	1,11E+05		
Indene	000095-13-6	2	8,03E+05	2	5,85E+05
Naphthalene	000091-20-3	2	2,12E+07	1	1,88E+07
Naphthalene, 1,2-dihydro-6-methyl	2717-47-7			1	9,17E+05
Naphthalene, 1,6-dimethyl-	000575-43-9			2	9,22E+05
Naphthalene, 1,8-dimethyl-	000569-41-5	1	9,13E+05		
Naphthalene, 1-ethyl-	001127-76-0	1	1,71E+06	1	7,23E+05
Naphthalene, 1-methyl-	000090-12-0	1	1,87E+07	1	1,59E+07
Naphthalene, 2,3-dimethyl-	000581-40-8	1	4,38E+06	2	4,39E+06
Naphthalene, 2,6-dimethyl-	000581-42-0	1	1,49E+06	1	1,30E+06
Naphthalene, 2-ethenyl-	827-54-3	1	9,13E+05		
Naphthalene, 2-ethyl-	000939-27-5			1	1,44E+06
Naphthalene, 2-methyl-	000091-57-6	2	1,79E+07	1	1,29E+07
Nonadecane	000629-92-5	1	5,94E+05		

Nome	CAS	Método 1		Método 2	
		Replicados	Área	Replicados	Área
Pentane, 2,2-dimethyl-	000590-35-2	1	2,98E+05		
Pentane, 3,3-dimethyl-	562-49-2	1	2,65E+04		
Phenanthrene	000085-01-8			1	8,34E+06
Styrene	000100-42-5	1	1,92E+05	1	1,80E+05
Tetradecane	000629-59-4			1	5,01E+05
Triacetin	102-76-1			1	2,67E+05
Tricyclo(6.2.2.0(2,7))dodeca-6,9-diene		1	2,92E+05	1	3,29E+05
Tridecane	000629-50-5	1	2,79E+05		

Tabela A.19. Compostos detetados na amostra F inicial (Nome, CAS, área, método e número de replicados em que foram detetados)

Nome	CAS	Método 1		Método 2	
		Replicados	Área	Replicados	Área
1,1'-Biphenyl, 3-methyl-	000643-93-6	2	9,09E+05	1	1,46E+06
1,3-Cyclopentadiene, 5-(1-methylethylidene)-	2175-91-9			1	4,27E+04
1,3-Methanopentalene, 1,2,3,5-tetrahydro-		1	7,24E+04		
1,4-Dihydronaphthalene	000612-17-9			1	6,71E+05
1H-Indene, 2,3-dihydro-5-methyl-	000874-35-1	1	4,66E+05		
2,2`-Dimethylbiphenyl	605-39-0			1	5,03E+04
2-Hexanone, 6-(acetyloxy)-		2	4,70E+05	1	4,13E+05
2-Methylindene	002177-47-1	2	2,88E+06	1	1,12E+06
2-Pentanone, 4-hydroxy-	004161-60-8	2	2,23E+05	1	1,91E+05
3a,4,5,6,7,7a-Hexahydro-4,7-methanoindene	004488-57-7	2	6,53E+05	2	3,37E+05
3-Hexanol, 4-ethyl-	19780-44-0	1	3,95E+04		
4-(para-Tolyl)-butyric acid	4521-22-6			1	1,20E+05
4,7-Methano-1H-indene, 3a,4,7,7a-tetrahydro-	000077-73-6	2	3,73E+05	1	3,17E+05
9H-Fluorene, 1-methyl-	001730-37-6			1	7,03E+04
Acenaphthene	000083-32-9	1	1,61E+06	1	1,61E+06
Acetic acid, anhydride with formic acid	2258-42-6	1	3,78E+04		
Benzene	000071-43-2	2	1,01E+05	1	5,46E+04
Benzene, (1-methyl-2-cyclopropen-1-yl)-	065051-83-4	2	1,73E+06	1	1,65E+06
Benzene, (1-methylethyl)-	000098-82-8	1	8,53E+04	1	5,57E+04
Benzene, (2-methyl-1-propenyl)-	000768-49-0	2	1,45E+05	1	5,81E+04
Benzene, 1,2,3-trimethyl-	000526-73-8	1	7,89E+04		
Benzene, 1,2,5-trimethyl-	95-63-6	1	2,49E+04		
Benzene, 1,3,5-trimethyl-	000108-67-8	1	8,70E+04		
Benzene, 1,3-diethenyl-	000108-57-6	1	1,18E+05	1	1,18E+05

Nome	CAS	Método 1		Método 2	
		Replicados	Área	Replicados	Área
Benzene, 1-butynyl-	000622-76-4			1	2,50E+06
Benzene, 1-ethenyl-2-methyl-	000611-15-4	2	1,77E+05	1	7,86E+05
Benzene, 1-ethenyl-3-ethyl-	007525-62-4			2	3,43E+05
Benzene, 1-ethenyl-3-methyl-	000100-80-1	1	3,96E+05	2	1,49E+05
Benzene, 1-ethyl-2,3-dimethyl-	000933-98-2	1	1,40E+05		
Benzene, 1-ethyl-3-methyl-	000620-14-4	2	1,66E+05	1	1,30E+05
Benzene, 1-methyl-2-(1-methylethyl)-	000527-84-4	2	1,23E+05		
Benzene, 1-methyl-4-(2-propenyl)-	003333-13-9	1	8,30E+04		
Benzene, 1-propenyl-	000637-50-3			2	3,00E+05
Benzene, 2-ethenyl-1,4-dimethyl-	002039-89-6	2	1,63E+05	1	2,41E+05
Benzene, 2-ethyl-1,4-dimethyl-	001758-88-9			1	8,98E+04
Bicyclo[4.2.0]octa-1,3,5-triene, 3-methyl-	022250-74-4	1	9,16E+05		
Biphenyl	000092-52-4	2	2,92E+06	2	3,12E+06
Ethylbenzene	000100-41-4	1	4,84E+04		
Fluorene	000086-73-7	2	1,96E+06	2	6,46E+06
Indane	000496-11-7	1	2,93E+05	2	2,09E+05
Indene	000095-13-6	2	1,45E+06	1	1,25E+06
Naphthalene	000091-20-3	2	1,94E+07	2	1,76E+07
Naphthalene, 1,2-dihydro-	000447-53-0	1	1,07E+06	2	8,52E+05
Naphthalene, 1-ethyl-	001127-76-0	1	7,29E+05	2	5,63E+05
Naphthalene, 1-methyl-	000090-12-0	2	7,05E+06	1	2,28E+07
Naphthalene, 2,3-dimethyl-	000581-40-8	2	1,54E+06	2	1,58E+06
Naphthalene, 2,7-dimethyl-	000582-16-1	1	3,86E+05	1	3,86E+05
Naphthalene, 2-methyl-	000091-57-6	2	9,86E+06	1	7,45E+06
N-Hydroxymethyl-2-phenylacetamide	006291-06-1	1	3,03E+04		

Nome	CAS	Método 1		Método 2	
		Replicados	Área	Replicados	Área
Nonane	000111-84-2	2	2,92E+05	2	2,39E+05
Phenanthrene	000085-01-8	2	1,40E+07	1	2,31E+06
p-Xylene	000106-42-3	1	4,62E+04	1	6,33E+04
Styrene	000100-42-5	1	1,10E+05	2	7,58E+04
Tricyclo(6.2.2.0(2,7))dodeca-6,9-diene		1	3,33E+05		

Tabela A.20. Compostos detetados no replicado F1 após ensaio de respirometria (Nome, CAS, área e método em que foram detetados)

Nome	CAS	Método 1	Método 2
		Área	Área
1,1'-Biphenyl, 3-methyl-	000643-93-6	2,27E+06	1,84E+06
1,2,3-Propanetriol, diacetate	25395-31-7	1,39E+06	1,25E+06
1,3,5-Hexatriene, (Z)-	2612-46-6	4,27E+04	
1,3-Cyclopentadiene, 1-methyl-	000096-39-9	4,99E+04	
1,3-Cyclopentadiene, 5-(1-methylpropylidene)-	003141-02-4	4,42E+04	
1,4-Dihydronaphthalene	000612-17-9	6,78E+05	1,05E+06
2H-1,3-Benzoxazine, 6-bromo-3,4-dihydro-3-(phenylmethyl)-	55955-91-4	3,45E+04	
2-Hexanol	000626-93-7	1,18E+05	9,73E+04
2-Hexanone	000591-78-6	6,48E+04	4,61E+04
2-Methylindene	002177-47-1	1,15E+06	
2-Pentanone, 4-hydroxy-	4161-60-8	3,02E+05	2,90E+05
3a,4,5,6,7,7a-Hexahydro-4,7-methanoindene	004488-57-7	3,57E+05	1,88E+05
3-Hexanol	000623-37-0	8,97E+04	5,78E+04
3-Hexanone	000589-38-8	2,69E+04	
4,7-Methano-1H-indene, 3a,4,7,7a-tetrahydro-	000077-73-6	2,00E+05	
Benzene, 1,2,3-trimethyl-	526-73-8	3,87E+04	4,27E+04
Benzene, 1-butynyl-	000622-76-4	1,52E+06	1,56E+06
Benzene, 1-ethenyl-2-methyl-	000611-15-4	6,26E+05	1,12E+05
Benzene, 1-ethenyl-3-methyl-	000100-80-1	1,31E+05	5,41E+05
Benzene, 1-ethyl-2-methyl-	000611-14-3	8,40E+04	
Benzene, 1-propenyl-	000637-50-3	1,34E+05	
Benzene, 2-ethenyl-1,4-dimethyl-	002039-89-6	2,82E+05	8,19E+04
Bicyclo[2.2.1]heptane, 2,2-dimethyl-3-methylene-, (1S)-		3,68E+05	
Biphenyl	000092-52-4	4,03E+06	4,00E+06

Nome	CAS	Método 1	Método 2
		Área	Área
Butane, 2,2,3,3-tetramethyl-	594-82-1	2,00E+05	
Cyclobutene, 2-propenylidene-		4,69E+04	8,44E+04
Fluorene	000086-73-7	3,55E+06	4,18E+06
Hexane, 2-methyl-	000591-76-4	5,92E+05	5,36E+05
Hexane, 3,3,4,4-tetramethyl-	5171-84-6	4,21E+04	
Hexane, 3-methyl-	000589-34-4	1,14E+05	
Indane	000496-11-7	1,02E+05	
Indene	000095-13-6	7,29E+05	5,94E+05
Naphthalene	000091-20-3	1,42E+07	1,33E+07
Naphthalene, 1-ethyl-	001127-76-0	9,05E+05	8,73E+05
Naphthalene, 1-methyl-	000090-12-0	1,14E+07	1,06E+07
Naphthalene, 2,3-dimethyl-	000581-40-8	2,52E+06	3,21E+06
Naphthalene, 2,6-dimethyl-	000581-42-0	8,22E+05	1,13E+06
Nonane	000111-84-2	4,97E+04	
Pentane, 2,2-dimethyl-	000590-35-2	3,36E+05	
Styrene	000100-42-5	1,47E+05	2,20E+05
2-Heptanol, acetate	5921-82-4		8,40E+04
4-(para-Tolyl)-butyric acid	4521-22-6		6,33E+04
Acenaphthene	000083-32-9		2,13E+06
Anthracene	000120-12-7		4,34E+04
Benzene, 1-ethyl-3-methyl-	000620-14-4		3,55E+04
Benzene, 1-methyl-3-(1-methylethyl)-	535-77-3		1,16E+05
Cyclobuta[1,2:3,4]dicyclopentene, 1,3a,3b,4,6a,6b-hexahydro-			1,85E+05
Cyclohexane, 1,2,4-tris(methylene)-	14296-81-2		1,42E+05
Naphthalene, 2,7-dimethyl-	000582-16-1		7,16E+05

		Método 1	Método 2
Nome	CAS	Área	Área
Naphthalene, 2-methyl-	000091-57-6		8,00E+06

Tabela A.21. Compostos detetados no replicado F2 após ensaio de respirometria (Nome, CAS, área e método em que foram detetados)

Nome	CAS	Método 1	Método 2
		Área	Área
1,1'-Biphenyl, 3-methyl-	000643-93-6	2,19E+06	2,23E+06
1,2,3-Propanetriol, diacetate	025395-31-7	1,57E+06	
1,3,5-Cycloheptatriene	000544-25-2		6,04E+04
1,3-Cyclopentadiene	000542-92-7	5,00E+05	
1,3-Cyclopentadiene, 1-methyl-	0096-39-9	2,71E+04	
1,3-Dioxolane-2-butanol, 2-methyl-		5,26E+04	
1,4-Dihydronaphthalene	000612-17-9	7,74E+05	8,10E+05
1H-Indene, 2,3-dihydro-5-methyl-	000874-35-1		3,17E+05
1-Phenyl-1-butene	000824-90-8		1,76E+05
2,4-Dimethylstyrene	002234-20-0	1,19E+05	
2,5-Dimethylbenzyl cyanide	16213-85-7		5,66E+04
2-Heptanol, acetate	5921-82-4		8,36E+04
2-Hexanol	000626-93-7	1,45E+05	1,49E+05
2-Hexanone	000591-78-6	8,31E+04	6,70E+04
2-Methylindene	002177-47-1	1,81E+06	2,31E+06
2-Pentanone, 4-hydroxy-	004161-60-8	3,01E+05	3,48E+05
3a,4,5,6,7,7a-Hexahydro-4,7-methanoindene	004488-57-7	4,87E+05	
3-Hexanol	000623-37-0	1,01E+05	9,81E+04
3-Hexanone	000589-38-8	3,74E+04	
3-Penten-1-yne, 3-methyl-	1574-33-0	4,16E+04	
4,7-Methano-1H-indene, 3a,4,7,7a-tetrahydro-	000077-73-6	2,31E+05	
4,7-Methanoindene, 3a,4,5,6,7,7a-hexahydro-, endo-	002825-86-7		2,96E+05
Acenaphthene	000083-32-9	1,87E+06	2,04E+06
Acetic acid, methoxy-	625-45-6	3,96E+04	

Nome	CAS	Método 1	Método 2
		Área	Área
Benzene, (1-methyl-2-cyclopropen-1-yl)-	065051-83-4		1,58E+06
Benzene, (2-methyl-1-propenyl)-	000768-49-0		8,91E+04
Benzene, 1,2,4-trimethyl-	000095-63-6	4,94E+04	
Benzene, 1-butynyl-	000622-76-4	1,29E+06	
Benzene, 1-ethenyl-2-methyl-	000611-15-4	6,01E+05	1,96E+05
Benzene, 1-ethenyl-3-ethyl-	007525-62-4	3,67E+05	
Benzene, 1-ethenyl-3-methyl-	000100-80-1		6,71E+05
Benzene, 1-ethyl-3-methyl-	000620-14-4	1,06E+05	1,30E+05
Benzene, 1-propenyl-	000637-50-3	1,50E+05	
Benzene, 2-ethenyl-1,4-dimethyl-	002039-89-6		1,57E+05
Benzene, 4-ethyl-1,2-dimethyl-	000934-80-5		4,56E+04
Bicyclo[4.2.0]octa-1,3,5-triene, 7-methyl-			1,29E+05
Biphenyl	000092-52-4	4,53E+06	5,42E+06
Butane, 2,2,3,3-tetramethyl-	594-82-1	2,10E+05	
Camphene	000079-92-5	1,37E+05	
Cyclobuta[1,2:3,4]dicyclopentene, 1,3a,3b,4,6a,6b-hexahydro-	105226-58-2		2,61E+05
Cyclobutene, 2-propenylidene-		5,54E+04	
Ethylbenzene	100-41-4	3,12E+04	
Fluorene	000086-73-7	3,16E+06	6,31E+06
Heptane, 2,4,6-trimethyl-	2613-61-8	6,14E+04	
Hexane, 3-methyl-	000589-34-4	1,15E+05	
Indane	496-11-7		1,50E+05
Indene	000095-13-6	6,89E+05	8,08E+05
Naphthalene	000091-20-3	1,64E+07	1,88E+07
Naphthalene, 1,2-dihydro-6-methyl-	002717-47-7		5,28E+05

Nome	CAS	Método 1	Método 2
		Área	Área
Naphthalene, 1,8-dimethyl-	000569-41-5		8,38E+05
Naphthalene, 1-ethyl-	001127-76-0	9,52E+05	
Naphthalene, 1-methyl-	000090-12-0		1,08E+07
Naphthalene, 2,3-dimethyl-	000581-40-8	2,55E+06	4,18E+06
Naphthalene, 2,6-dimethyl-	000581-42-0	7,48E+05	1,30E+06
Naphthalene, 2-ethyl-	000939-27-5		1,30E+06
Naphthalene, 2-methyl-	000091-57-6	1,29E+07	1,70E+07
Nonane	000111-84-2		6,56E+04
Octadecane	000593-45-3		4,64E+05
Pentane, 2,2-dimethyl-	000590-35-2	2,91E+05	
Pentane, 2,3,4-trimethyl-	000565-75-3	3,90E+04	
Pentane, 2,3-dimethyl-	565-59-3		1,53E+05
Phenanthrene	000085-01-8	5,10E+06	
p-Xylene	000106-42-3	2,17E+04	2,87E+04
Styrene	000100-42-5	1,29E+05	2,83E+05
Triacetin	000102-76-1		1,94E+06

ANEXO II – COV detetados por GC-MS (amostras sem adição de sal)

Tabela A.22. Compostos detetados no replicado A1 após ensaio de respirometria (Nome, CAS e área)

Nome	CAS	Área
(1-Methylbuta-1,3-dienyl)benzene	054758-36-0	1,17E+05
(1-Methylenebut-2-enyl)benzene	070588-46-4	5,59E+04
1-(2,2-Dimethylcyclopropyl)-2-phenylacetylene		7,11E+04
1,1'-Biphenyl, 2-methyl-	000643-58-3	1,06E+05
1,1'-Biphenyl, 3-methyl-	000643-93-6	1,55E+05
1,3-Cyclopentadiene	000542-92-7	5,81E+04
1,3-Cyclopentadiene	000542-92-7	5,16E+04
11-Methylene-tricyclo[4.3.1.1(2,5)]undecane		2,01E+05
1H-Indene, 1,3-dimethyl-	002177-48-2	8,38E+05
1H-Indene, 1-methyl-	000767-59-9	2,49E+06
1H-Indene, 2,3-dihydro-1,2-dimethyl-	017057-82-8	6,84E+04
1H-Indene, 2,3-dihydro-4-methyl-	000824-22-6	5,74E+05
2,3,4,5,6,7-Hexahydro-1H-cyclopenta[a]pentalene		2,21E+05
2,4-Dimethylstyrene	002234-20-0	2,16E+05
2,7-Methanonaphthalene, 1,2,4a,7,8,8a-hexahydro-	58008-61-0	3,53E+05
2-Cyclopenten-1-one, 3-methyl-2-(2,4-pentadienyl)-, (Z)-	22610-79-3	6,41E+05
2-Methylindene	002177-47-1	1,71E+06
2-Tolylloxirane	2783-26-8	7,86E+04
3a,4,5,6,7,7a-Hexahydro-4,7-methanoindene	004488-57-7	3,60E+06
3-Phenyl-1-butanol	2722-36-3	3,38E+05
4,7-Methano-1H-indene, 3a,4,7,7a-tetrahydro-	000077-73-6	4,68E+05
4,7-Methano-1H-indene, octahydro-2-methylene-	68284-23-1	2,24E+05
9H-Fluorene, 1-methyl-	001730-37-6	4,80E+04
Acenaphthene	000083-32-9	3,40E+05
Azetidine, 3-methyl-3-phenyl-	5961-33-1	8,71E+04
Azulene	000275-51-4	2,20E+05
Benzene, [(cyclohex-1-en-1-yl)methyl]-	004714-09-4	1,64E+05
Benzene, 1,2,3-trimethyl-	000526-73-8	2,78E+05
Benzene, 1,2,3-trimethyl-	000526-73-8	7,02E+05
Benzene, 1-ethenyl-4-methyl-	000622-97-9	3,17E+05
Benzene, 1-ethyl-2,4-dimethyl-	000874-41-9	6,75E+05
Benzene, 1-ethyl-2-methyl-	000611-14-3	3,44E+05
Benzene, 1-ethyl-3-methyl-	000620-14-4	5,47E+05
Benzene, 1-methyl-2-(1-methylethyl)-	000527-84-4	2,37E+05
Benzene, 1-methyl-4-(2-propenyl)-	003333-13-9	1,30E+06
Benzene, 1-methyl-4-propyl-	1074-55-1	1,11E+05
Benzene, 2,4-dimethyl-1-(1-methylpropyl)-	001483-60-9	5,30E+05
Benzene, 2-ethyl-1,4-dimethyl-	001758-88-9	2,95E+05
Benzeneacetaldehyde, à,2,5-trimethyl-	52417-50-2	8,02E+04
Bicyclo[2.2.1]hept-2-ene, 2-methyl-	000694-92-8	1,50E+04

Nome	CAS	Área
Bicyclo[2.2.1]hept-2-ene, 5-ethenyl-	003048-64-4	4,70E+04
Bicyclo[3.2.1]octa-2,6-diene, 2-phenyl-	101166-08-9	3,11E+04
Cyclooctene, 4-methylene-6-(1-propenylidene)-	61142-29-8	8,89E+04
Fluorene	000086-73-7	2,98E+05
Heptacyclo[8.4.0(2,6).0(3,8).0(5,7).0(9,13).0(12,14)]tetradecane		1,29E+05
Naphthalene, 1,2,3,4-tetrahydro-	000119-64-2	2,69E+05
Naphthalene, 1,2-dihydro-6-methyl-	002717-47-7	4,01E+05
Naphthalene, 1,3-dimethyl-	000575-41-7	3,22E+05
Naphthalene, 1,4,6-trimethyl-	002131-42-2	3,58E+04
Naphthalene, 1-ethyl-	001127-76-0	3,12E+05
Naphthalene, 1-ethyl-	001127-76-0	2,01E+05
Naphthalene, 2,3-dimethyl-	000581-40-8	5,90E+05
Naphthalene, 2,6-dimethyl-	000581-42-0	3,38E+05
Naphthalene, 2-methyl-	000091-57-6	1,29E+06
Naphthalene, 2-methyl-	000091-57-6	2,63E+06
Octane, 2,6-dimethyl-	2051-30-1	2,73E+04
p-Xylene	000106-42-3	2,81E+04
Tetracyclo[5.3.0.0<2,6>.0<3,10>]deca-4,8-diene	034324-40-8	6,04E+05

Tabela A.23. Compostos detetados no replicado A1 após ensaio de respirometria (Nome, CAS e área)

Nome	CAS	Área
1-(2,2-Dimethylcyclopropyl)-2-phenylacetylene		4,03E+04
1,1'-Biphenyl, 2-methyl-	000643-58-3	4,89E+04
1,3-Cyclopentadiene	000542-92-7	5,81E+04
1H-Indene, 1,3-dimethyl-	002177-48-2	1,84E+05
1H-Indene, 1-methyl-	000767-59-9	3,77E+05
1-Isopropenyl-naphthalene	1855-47-6	3,15E+04
2,7-Methanonaphthalene, 1,2,4a,7,8,8a-hexahydro-	58008-61-0	3,58E+04
2-Cyclopenten-1-one, 3-methyl-2-(2,4-pentadienyl)-, (Z)-	22610-79-3	2,48E+05
2-Methyl-5,5-diphenyl-4-(methylthio)imidazole	024133-96-8	5,21E+04
3a,4,5,6,7,7a-Hexahydro-4,7-methanoindene	004488-57-7	3,90E+05
3-Phenyl-1-butanol	2722-36-3	4,23E+04
4,7-Methano-1H-indene, 3a,4,7,7a-tetrahydro-	000077-73-6	2,08E+04
4,7-Methano-1H-indene, octahydro-	006004-38-2	1,65E+05
4,7-Methano-1H-indene, octahydro-2-methylene-	068284-23-1	1,22E+05
9,10-Dimethylenetricyclo[4.2.1.1(2,5)]decane		9,73E+04
9H-Fluorene, 1-methyl-	001730-37-6	3,48E+04
Acenaphthene	000083-32-9	7,49E+04
Benzene, (3-methyl-2-butenyl)-	004489-84-3	2,12E+04
Benzene, 1,1'-(1,2-dimethyl-1,2-ethanediyl)bis-, (R*,S*)-	4613-11-0	2,20E+04
Benzene, 1-ethyl-3,5-dimethyl-	000934-74-7	1,77E+04
Benzene, 1-methyl-2-(1-methylethyl)-	000527-84-4	1,79E+04
Benzene, 1-methyl-3-propyl-	1074-43-7	1,18E+04
Benzene, 1-methyl-4-propyl-	1074-55-1	1,49E+04
Benzene, 2,4-dimethyl-1-(1-methylpropyl)-	001483-60-9	2,53E+05
Benzene, 4-ethyl-1,2-dimethyl-	000934-80-5	4,16E+04
Benzeneethanol, à,à-dimethyl-	52089-32-4	1,52E+04
Bicyclo[4.1.0]heptane, 7-(phenylmethylene)-	82253-12-1	4,90E+04
Biphenyl	000092-52-4	1,55E+04
Cyclooctene, 4-methylene-6-(1-propenylidene)-	61142-29-8	2,43E+04
Eicosane	000112-95-8	4,94E+04
Eicosane	000112-95-8	2,80E+04
Naphthalene, 1,2-dihydro-6-methyl-	002717-47-7	5,58E+04
Naphthalene, 1,3-dimethyl-	000575-41-7	1,46E+04
Naphthalene, 1,4,6-trimethyl-	002131-42-2	2,02E+04
Naphthalene, 2-(1-methylethyl)-	2027-17-0	7,68E+04
Naphthalene, 2,3-dimethyl-	000581-40-8	1,38E+05
Naphthalene, 2,7-dimethyl-	000582-16-1	1,11E+05
Naphthalene, 2-methyl-	000091-57-6	8,89E+04
Tetracyclo[5.3.0.0<2,6>.0<3,10>]deca-4,8-diene	034324-40-8	8,43E+04
Tricyclo[5.2.1.0(2,6)]dec-3-ene, 4-ethyl-		6,89E+04

Tabela A.24. Compostos detetados no replicado A2 após ensaio de respirometria (Nome, CAS e área)

Nome	CAS	Área
Tricyclo[5.2.1.0(2,6)]dec-3-ene, 4-ethyl-		1,80E+05
1,1'-Biphenyl, 2-methyl-	000643-58-3	5,75E+04
1,3-Cyclopentadiene	000542-92-7	3,52E+04
1,4,8-Metheno-1H-cyclopent[f]azulene, 3a,4,4a,7,7a,8,9,9a-octahydro	22723-47-3	1,87E+04
11-Methylene-tricyclo[4.3.1.1(2,5)]undecane		9,68E+04
1H-Indene, 4,7-dimethyl-	006974-97-6	1,20E+05
1-Isopropenylnaphthalene	001855-47-6	5,15E+04
1-Penten-4-yn-3-ol, 1-phenyl-	014604-31-0	8,31E+03
2,7-Methanonaphthalene, 1,2,4a,7,8,8a-hexahydro-	58008-61-0	9,50E+04
2-Cyclopenten-1-one, 3-methyl-2-(2,4-pentadienyl)-, (Z)-	22610-79-3	2,54E+05
2-Ethyl-2,3-dihydro-1H-indene	56147-63-8	7,91E+04
3a,4,5,6,7,7a-Hexahydro-4,7-methanoindene	004488-57-7	7,86E+05
4-(4-Methylbenzoylmethyl)-2H-1,4-benzoxazin-3(4H)-one	105492-44-2	1,23E+04
4,7-Methano-1H-indene, 3a,4,7,7a-tetrahydro-	000077-73-6	7,44E+04
4,7-Methano-1H-indene, octahydro-	006004-38-2	1,89E+05
4,7-Methano-1H-indene, octahydro-2-methylene-	068284-23-1	1,52E+05
9,10-Dimethylenetricyclo[4.2.1.1(2,5)]decane		9,38E+04
9H-Fluorene, 9-methyl-	2523-37-7	4,03E+04
Acenaphthene	000083-32-9	1,72E+05
Benzene, [(cyclohex-1-en-1-yl)methyl]-	004714-09-4	8,82E+04
Benzene, 1,2,4,5-tetramethyl-	000095-93-2	2,99E+04
Benzene, 1,3,5-trimethyl-2-propyl-	004810-04-2	2,38E+05
Benzene, 1,4-diethyl-2-methyl-	13632-94-5	9,56E+04
Benzene, 1-ethyl-3-methyl-	000620-14-4	2,84E+04
Benzene, 1-methyl-3-propyl-	1074-43-7	1,11E+04
Benzene, 1-methyl-4-propyl-	1074-55-1	1,67E+04
Benzene, 2,4-diethyl-1-methyl-	1758-85-6	7,71E+04
Benzene, 2-ethenyl-1,3,5-trimethyl-	000769-25-5	2,88E+04
Benzene, 2-ethyl-1,4-dimethyl-	001758-88-9	6,25E+04
Benzene, 4-ethyl-1,2-dimethyl-	000934-80-5	7,85E+04
Benzocycloheptatriene	264-09-5	7,33E+04
Bicyclo[4.1.0]heptane, 7-(phenylmethylene)-	82253-12-1	5,41E+04
Cyclopentanespiro-2'-bicyclo[1.1.0]butane-4'-spirocyclopentane	114310-66-6	5,96E+04
Decane	000124-18-5	2,26E+04
Decane, 4-methyl-	2847-72-5	1,55E+04
Eicosane	000112-95-8	3,45E+04
Fluorene	000086-73-7	1,15E+05
Naphthalene, 1,2,3,4-tetrahydro-	000119-64-2	4,01E+04
Naphthalene, 1,2-dihydro-6-methyl-	002717-47-7	8,78E+04
Naphthalene, 1,3-dimethyl-	000575-41-7	3,76E+04
Naphthalene, 1,4,5-trimethyl-	002131-41-1	7,24E+04

Nome	CAS	Área
Naphthalene, 1,4,6-trimethyl-	002131-42-2	2,38E+04
Naphthalene, 1,4-dimethyl-	000571-58-4	3,33E+05
Naphthalene, 1,6,7-trimethyl-	2245-38-7	3,32E+04
Naphthalene, 1-methyl-	000090-12-0	1,33E+05
Naphthalene, 2-(1-methylethyl)-	2027-17-0	1,07E+05
Naphthalene, 2,3-dimethyl-	000581-40-8	1,93E+05
Naphthalene, 2,7-dimethyl-	000582-16-1	1,87E+05
Tricyclo[5.2.1.0(2,6)]dec-3-ene, 4-ethyl-		5,37E+04
Tricyclo[5.2.1.0(2,6)]dec-4-ene, 4-methyl-	1000150-03-0	5,11E+05
Tridecane	629-50-5	9,52E+04

Tabela A.25. Compostos detetados na amostra B inicial (Nome, CAS e área)

Nome	CAS	Área
Bicyclo[3.2.1]octa-2,6-diene, 2-phenyl-	101166-08-9	4,47E+04
(1-Methylenebut-2-enyl)benzene	070588-46-4	1,52E+05
1,1'-Biphenyl, 2-methyl-	000643-58-3	4,99E+04
1,1'-Biphenyl, 3-methyl-	000643-93-6	1,69E+05
1,1'-Biphenyl, 4-methyl-	000644-08-6	1,05E+05
1-Cyclohexene-1-carboxaldehyde, 4-(1-methylethenyl)-, (S)-	18031-40-8	1,55E+04
1H-1,2,4-Triazole, 3-propyl-	19932-60-6	2,57E+04
1H-Indene, 2,3-dihydro-4-methyl-	000824-22-6	4,48E+04
2,7-Methanonaphthalene, 1,2,4a,7,8,8a-hexahydro-	58008-61-0	1,18E+04
2-Cyclopenten-1-one, 3-methyl-2-(2,4-pentadienyl)-, (Z)-	22610-79-3	1,19E+05
2-Methylindene	002177-47-1	3,20E+05
3a,4,5,6,7,7a-Hexahydro-4,7-methanoindene	004488-57-7	2,17E+05
3-Ethylidenecycloheptene		9,57E+04
3-Phenyl-1-butanol	2722-36-3	1,92E+04
4,7-Methano-1H-indene, 3a,4,7,7a-tetrahydro-	000077-73-6	2,28E+04
4,7-Methano-1H-indene, octahydro-	006004-38-2	1,07E+05
4,7-Methano-1H-indene, octahydro-2-(1-methylethylidene)-	74793-54-7	4,43E+04
9H-Fluorene, 9-methyl-	2523-37-7	3,48E+04
Acenaphthene	000083-32-9	1,82E+05
Adamantane, cyclopropylidene-	99298-53-0	2,03E+04
Azulene, 4,6,8-trimethyl-	000941-81-1	1,97E+04
Benzene, [(cyclohex-1-en-1-yl)methyl]-	004714-09-4	7,13E+04
Benzene, 1,1'-(1,2-dimethyl-1,2-ethanediy)bis-	5789-35-5	2,22E+04
Benzene, 1,1'-(1-methyl-1,3-propanediy)bis-	001520-44-1	4,02E+04
Benzene, 1,2,3-trimethyl-	526-73-8	1,12E+05
Benzene, 1,3-dimethyl-	000108-38-3	4,39E+04
Benzene, 1-ethyl-2-methyl-	000611-14-3	5,50E+04
Benzene, 1-ethyl-3-methyl-	000620-14-4	1,84E+04
Benzene, 1-methyl-2-(1-methylethyl)-	000527-84-4	2,88E+04
Benzene, 2,4-dimethyl-1-(1-methylpropyl)-	001483-60-9	9,45E+04
Benzene, cyclopropyl-	873-49-4	2,30E+04
Biphenyl	000092-52-4	3,07E+05
Diphenylmethane	101-81-5	1,45E+04
Dodecane, 2,6,11-trimethyl-	31295-56-4	1,99E+04
Ethylbenzene	000100-41-4	2,72E+04
Fluorene	000086-73-7	1,98E+05
Indane	000496-11-7	5,43E+04
Indene	000095-13-6	1,13E+05
Naphthalene	000091-20-3	1,74E+06
Naphthalene, 1,2,3,4-tetrahydro-	000119-64-2	2,27E+04
Naphthalene, 1,2-dihydro-	000447-53-0	1,05E+05
Naphthalene, 1,2-dihydro-6-methyl-	002717-47-7	7,19E+04
Naphthalene, 1,3-dimethyl-	000575-41-7	1,28E+05
Naphthalene, 1,4-dimethyl-	000571-58-4	3,12E+05
Naphthalene, 1-ethyl-	001127-76-0	1,20E+05
Naphthalene, 1-methyl-	000090-12-0	9,05E+05
Naphthalene, 2,6-dimethyl-	000581-42-0	1,11E+05
Naphthalene, 2-methyl-	000091-57-6	1,13E+06
Nonane	000111-84-2	1,44E+04
p-Xylene	000106-42-3	4,86E+04

Nome	CAS	Área
Toluene	000108-88-3	3,02E+04
trans-3-Caren-2-ol		6,04E+04
Tricyclo[5.2.1.0(2,6)]dec-3-ene, 4-ethyl-		7,75E+04

Tabela A.26. Compostos detetados no replicado B1 após ensaio de respirometria (Nome, CAS e área)

Nome	CAS	Área
(1-Methylbuta-1,3-dienyl)benzene	054758-36-0	3,85E+04
1,3,5-Cycloheptatriene, 2,4-diethyl-7,7-dimethyl-		4,75E+04
1,3-Cyclohexadien-5-ol, 1-phenyl-		2,87E+04
1,3-Cyclopentadiene	000542-92-7	6,81E+04
1,4,4a,8a-Tetrahydro-1,4-methanonaphthalene-5,8-dione	001200-89-1	3,30E+04
1,4-Dihydronaphthalene	000612-17-9	5,88E+04
11-Methylene-tricyclo[4.3.1.1(2,5)]undecane	1000193-95-4	1,62E+05
1-Buten-3-yne, 2-methyl-	000078-80-8	5,28E+04
1H-Indene, 1,3-dimethyl-	002177-48-2	2,50E+05
2'-Ethylpropiophenone	016819-79-7	3,95E+05
3a,4,5,6,7,7a-Hexahydro-4,7-methanoindene	004488-57-7	1,10E+06
4,7-Methano-1H-indene, 3a,4,7,7a-tetrahydro-	000077-73-6	8,12E+04
4,7-Methano-1H-indene, octahydro-2-(1-methylethylidene)-	74793-54-7	4,29E+04
4,7-Methanoindene, 3a,4,5,6,7,7a-hexahydro-, endo-	2825-86-7	2,85E+04
5-Allyl-2-norbornene	031663-53-3	2,46E+04
7-Methoxymethyl-2,7-dimethylcyclohepta-1,3,5-triene	73992-48-0	4,94E+04
9,10-Dimethylenetricyclo[4.2.1.1(2,5)]decane		8,38E+04
Adamantane, cyclopropylidene-	99298-53-0	5,83E+04
Benz[f]azulene, 1,2,3,3a,4,9,10,10a-octahydro-	54798-84-4	3,45E+04
Benzene, 1,1'-(1-ethenyl-1,3-propanediyl)bis-	061141-97-7	1,79E+04
Benzene, 1,3-diethenyl-	000108-57-6	8,68E+04
Benzene, 1-ethenyl-3-ethyl-	007525-62-4	2,88E+04
Bicyclo[2.2.1]hept-2-ene, 2-methyl-	000694-92-8	1,20E+04
Bicyclo[2.2.1]hept-2-ene, 5-ethenyl-	003048-64-4	1,39E+04
Bicyclo[2.2.1]heptane, 2-ethyl-	002146-41-0	1,79E+04
Bicyclo[3.2.1]octa-2,6-diene, 2-phenyl-	101166-08-9	3,20E+04
Bicyclo[3.3.1]non-2-en-9-one	004844-11-5	1,35E+05
Bicyclo[4.1.0]heptan-3-ol, 4,7,7-trimethyl-, (1à,3à,4à,6à)-	52486-23-4	6,77E+04
Bicyclo[4.1.0]heptane, 7-(phenylmethylene)-	82253-12-1	2,90E+04
Cyclobuta[1,2:3,4]dicyclopentene, decahydro-3a-methyl-6-methylene-1-(1-methylethyl)-, [1S-(1.alpha.,3a.alpha.,3b.beta.,6a.beta.,6b.alpha.)]-	005208-59-3	1,29E+05
Cyclohexane, 1,1,3-trimethyl-	003073-66-3	1,33E+04
Cyclopentane, (3-methylbutylidene)-	53366-51-1	2,13E+04
Cyclopropane, (R,R)-1-((Z)-hex-1'-enyl)-2-ethenyl-	077210-40-3	2,94E+04
Decane, 2,4,6-trimethyl-	62108-27-4	1,65E+04
Endo-tricyclo[5.2.1.0(2,6)]decane	1000215-28-8	7,04E+05
Indene	000095-13-6	1,51E+04
Naphthalene, 1,2-dihydro-6-methyl-	002717-47-7	6,32E+04
Naphthalene, 2-methyl-	000091-57-6	4,93E+04
Naphthalene, decahydro-2-methyl-	2958-76-1	1,82E+04
Silicic acid, diethyl bis(trimethylsilyl) ester	3555-45-1	1,88E+04
Tricyclo[5.2.1.0(2,6)]dec-3-ene, 4-ethyl-		1,63E+05
Tricyclo[5.2.1.0(2,6)]dec-4-ene, 4-methyl-		9,18E+05

Tabela A.27. Compostos detetados no replicado B2 após ensaio de respirometria (Nome, CAS e área)

Nome	CAS	Área
(1-Methylbuta-1,3-dienyl)benzene	054758-36-0	2,31E+05
1,1'-Biphenyl, 2-methyl-	000643-58-3	1,55E+05
1,1'-Biphenyl, 3-methyl-	000643-93-6	2,78E+05
1,1'-Biphenyl, 4-methyl-	000644-08-6	2,53E+05
1,3-Cyclopentadiene	000542-92-7	1,17E+05
1,4,4a,5,8,8a-Hexahydro-naphthalene	1000190-92-0	1,40E+05
11-Methylene-tricyclo[4.3.1.1(2,5)]undecane	1000193-95-4	2,62E+05
1-Buten-3-yne, 2-methyl-	000078-80-8	2,58E+05
1H-Indene, 1,3-dimethyl-	002177-48-2	1,26E+06
1H-Indene, 2,3-dihydro-4-methyl-	000824-22-6	1,29E+06
1-Penten-3-yne, 2-methyl-	000926-55-6	1,59E+05
2-Cyclopenten-1-one, 3-methyl-2-(2,4-pentadienyl)-, (Z)-	22610-79-3	7,59E+05
2-Ethyl-1-H-indene	017059-50-6	1,46E+05
2-Methylindene	002177-47-1	4,90E+06
3a,4,5,6,7,7a-Hexahydro-4,7-methanoindene	004488-57-7	4,40E+06
3-Ethyl-6-trifluoroacetooctane		6,64E+04
4,7-Methano-1H-indene, 2,3,3a,4,7,7a-hexahydro-	019398-83-5	1,03E+06
4,7-Methano-1H-indene, octahydro-2-(1-methylethylidene)-	74793-54-7	1,79E+05
4,7-Methano-1H-indene, octahydro-2-methylene-	068284-23-1	1,85E+05
7-Methoxymethyl-2,7-dimethylcyclohepta-1,3,5-triene	73992-48-0	1,22E+06
Acenaphthene	000083-32-9	4,46E+05
Adamantane, cyclopropylidene-	99298-53-0	5,97E+04
Benzene, (1-ethyl-1-propenyl)-	004701-36-4	2,68E+05
Benzene, (1-methylethyl)-	000098-82-8	1,35E+05
Benzene, (3-methyl-2-butenyl)-	004489-84-3	7,57E+04
Benzene, 1,1'-(1-methyl-1,3-propanediyl)bis-	001520-44-1	7,85E+04
Benzene, 1,2,3-trimethyl-	526-73-8	8,73E+06
Benzene, 1,2,4,5-tetramethyl-	000095-93-2	3,74E+05
Benzene, 1,3-diethenyl-	000108-57-6	4,33E+05
Benzene, 1,3-dimethyl-	000108-38-3	4,06E+06
Benzene, 1-ethenyl-3-methyl-	000100-80-1	1,41E+06
Benzene, 1-ethenyl-4-methyl-	000622-97-9	2,57E+06
Benzene, 1-ethyl-2,3-dimethyl-	000933-98-2	2,03E+05
Benzene, 1-ethyl-2-methyl-	000611-14-3	2,42E+06
Benzene, 1-ethyl-3-methyl-	000620-14-4	2,86E+06
Benzene, 1-methyl-2-(1-methylethyl)-	000527-84-4	1,32E+06
Benzene, 1-methyl-2-propyl-	1074-17-5	1,07E+05
Benzene, 1-methyl-4-(2-propenyl)-	003333-13-9	4,02E+05
Benzene, 1-methyl-4-propyl-	1074-55-1	2,99E+05
Benzene, 2,4-dimethyl-1-(1-methylpropyl)-	001483-60-9	4,82E+05
Benzene, 2-butenyl-	001560-06-1	3,02E+05
Benzene, 4-ethenyl-1,2-dimethyl-	027831-13-6	1,29E+06
Benzene, cyclopropyl-	000873-49-4	2,69E+06
Benzene, propyl-	000103-65-1	6,26E+05
Benzene,1-methyl-1,2-propadienyl-	022433-39-2	6,94E+06
Bicyclo[2.2.1]hept-2-ene, 5-ethenyl-	003048-64-4	9,05E+05
Bicyclo[2.2.1]heptane, 2-ethenyl-	002146-39-6	8,52E+04
Bicyclo[3.2.1]octa-2,6-diene, 2-phenyl-	101166-08-9	1,64E+05
Bicyclo[3.3.1]non-2-en-9-one	004844-11-5	1,40E+05
Bicyclo[5.2.0]non-1-ene	065811-17-8	2,15E+05

Nome	CAS	Área
Biphenyl	000092-52-4	1,36E+06
Cyclohexane, 1,1,3-trimethyl-	003073-66-3	9,64E+04
Cyclohexane, propyl-	001678-92-8	9,44E+04
Cyclohexene, 4-ethenyl-	000100-40-3	2,54E+05
Dodecane, 2,6,11-trimethyl-	31295-56-4	7,60E+04
Ethylbenzene	000100-41-4	4,92E+06
Fluorene	000086-73-7	3,97E+05
Indene	000095-13-6	7,09E+06
Naphthalene	000091-20-3	2,15E+07
Naphthalene, 1-(2-propenyl)-	002489-86-3	8,48E+04
Naphthalene, 1,2,3,4-tetrahydro-	000119-64-2	4,64E+05
Naphthalene, 1,2-dihydro-	000447-53-0	2,48E+06
Naphthalene, 1,2-dihydro-6-methyl-	002717-47-7	5,16E+05
Naphthalene, 1,3-dimethyl-	000575-41-7	1,73E+05
Naphthalene, 1-ethyl-	001127-76-0	3,97E+05
Naphthalene, 1-methyl-	000090-12-0	7,45E+06
Naphthalene, 2,3-dimethyl-	000581-40-8	9,79E+05
Naphthalene, 2,6-dimethyl-	000581-42-0	4,12E+05
Octane	000111-65-9	2,24E+05
Octane, 2,6-dimethyl-	002051-30-1	1,51E+05
Octane, 2-methyl-	003221-61-2	1,44E+05
p-Xylene	000106-42-3	5,11E+06
Tetracyclo[3.3.1.0(2,8).0(4,6)]-non-2-ene	1000191-13-7	7,00E+05
Toluene	000108-88-3	1,65E+06
Tricyclo[5.2.1.0(2,6)]dec-3-ene, 4-ethyl-		1,81E+05

Tabela A.28. Compostos detetados na amostra C inicial (Nome, CAS e área)

Nome	CAS	Área
1-Methyl-1,2,3,4-tetrahydronaphthalen-1-ol	14944-28-6	1,14E+05
Tricyclo[5.2.1.0(2,6)]dec-3-ene, 4-ethyl-		7,44E+05
.alpha.,.beta.,.beta.-Trimethylstyrene	000769-57-3	1,98E+05
1,1'-Biphenyl, 2-methyl-	000643-58-3	6,08E+04
1,3-Cyclopentadiene	000542-92-7	8,04E+05
11-Methylene-tricyclo[4.3.1.1(2,5)]undecane		9,75E+05
1-Cyclohexene-1-carboxaldehyde, 4-(1-methylethenyl)-, (S)-	18031-40-8	1,43E+06
1H-Indene, 1,3-dimethyl-	002177-48-2	5,54E+05
1H-Indene, 2,3-dihydro-4-methyl-	000824-22-6	1,53E+06
1H-Indene, 3a,4,7,7a-tetrahydro-	003048-65-5	1,36E+06
1-Isopropenyl-naphthalene	1855-47-6	1,27E+05
1-Penten-3-yne	000646-05-9	1,04E+06
1-Penten-3-yne, 2-methyl-	000926-55-6	7,62E+05
2,3,4,5,6,7-Hexahydro-1H-cyclopenta[a]pentalene		5,28E+05
3a,4,5,6,7,7a-Hexahydro-4,7-methanoindene	004488-57-7	1,45E+07
3a,6-Methano-3aH-indene, 2,3,4,5,6,7-hexahydro-	098640-10-9	6,23E+05
3-Ethyl-6-trifluoroacetoxyoctane		1,35E+05
3-Phenyl-1-butanol	2722-36-3	5,01E+05
4,7-Methano-1H-indene, 2,3,3a,4,7,7a-hexahydro-	019398-83-5	9,52E+05
4,7-Methano-1H-indene, 3a,4,7,7a-tetrahydro-	000077-73-6	2,30E+06
6,7-Dimethyl-3H-isobenzofuran-1-one	343852-50-6	1,84E+06
7-Formylbicyclo[4.1.0]heptane		9,24E+04
7-Phenylbicyclo[3.2.0]heptan-6-one	73788-97-3	1,24E+05
9,10-Dimethylenetricyclo[4.2.1.1(2,5)]decane		4,55E+05
Acenaphthene	000083-32-9	3,73E+05
Benzene, (2,4-cyclopentadien-1-ylidenemethyl)-	7338-50-3	8,68E+04
Benzene, 1,1'-(1-methyl-1,3-propanediyl)bis-	001520-44-1	7,49E+04
Benzene, 1,3,5-trimethyl-	000108-67-8	1,49E+06
Benzene, 1-ethenyl-2-methyl-	000611-15-4	1,66E+06
Benzene, 1-ethyl-2-methyl-	000611-14-3	4,53E+06
Benzene, 1-ethyl-3,5-dimethyl-	000934-74-7	5,38E+05
Benzene, 1-ethynyl-4-methyl-	766-97-2	6,30E+05
Benzene, 1-methyl-2-(1-methylethyl)-	000527-84-4	1,68E+06
Benzene, 1-methyl-4-propyl-	1074-55-1	4,75E+05
Benzene, 4-ethyl-1,2-dimethyl-	000934-80-5	1,55E+06
Bicyclo[2.2.1]hept-2-ene, 2-methyl-	000694-92-8	6,59E+05
Bicyclo[2.2.1]hept-2-ene, 5-ethenyl-	003048-64-4	2,25E+06
Bicyclo[2.2.1]heptane, 2-ethenyl-	002146-39-6	6,97E+04
Bicyclo[2.2.1]heptane, 2-ethyl-	002146-41-0	3,44E+05
Bicyclo[2.2.2]oct-5-en-2-one	002220-40-8	4,76E+05
Biphenyl	000092-52-4	2,06E+05
cis-2-Methyl-.beta.-methyl-.beta.-nitrostyrene	1000122-79-5	6,29E+04
Cycloheptanol, 1-methyl-2-methylene-		1,75E+06
Cyclohexane, 1,1,3-trimethyl-	003073-66-3	2,16E+05
Cyclohexane, 1,3-dimethyl-, cis-	000638-04-0	7,20E+04
Cyclohexane, 1,4-dimethyl-, trans-	002207-04-7	5,86E+04
Cyclohexene, 1-ethyl-	001453-24-3	1,82E+05
Cyclohexene, 4-ethenyl-	000100-40-3	7,29E+05
Cyclopentane, 1-methyl-2-propyl-	3728-57-2	6,54E+04
Eicosane	000112-95-8	8,93E+04

Nome	CAS	Área
Endo-tricyclo[5.2.1.0(2.6)]decane	1000215-28-8	7,95E+06
Fluorene	000086-73-7	3,08E+05
Heptane, 2,5-dimethyl-	002216-30-0	1,41E+05
Heptane, 2,6-dimethyl-	001072-05-5	9,82E+04
Heptane, 3-methyl-	000589-81-1	9,18E+04
Indane	000496-11-7	6,41E+06
Methyl ethyl cyclopentene	019780-56-4	6,80E+04
Naphthalene, 1-(1-methylethyl)-	6158-45-8	1,33E+05
Naphthalene, 1,2,3,4-tetrahydro-	000119-64-2	9,62E+05
Naphthalene, 1,2-dihydro-6-methyl-	002717-47-7	4,05E+05
Naphthalene, 1,8-dimethyl-	000569-41-5	1,40E+05
Naphthalene, 1-ethyl-	001127-76-0	1,29E+05
Naphthalene, 2,3-dimethyl-	000581-40-8	4,48E+05
Naphthalene, 2,6-dimethyl-	000581-42-0	2,99E+05
Naphthalene, 2,7-dimethyl-	000582-16-1	1,80E+05
Naphthalene, 2-ethyl-	000939-27-5	2,50E+05
Naphthalene, 2-methyl-	000091-57-6	2,93E+06
Octane, 3-methyl-	002216-33-3	3,54E+05
Octane, 4-methyl-	002216-34-4	2,93E+05
o-Xylene	000095-47-6	2,46E+05
o-Xylene	000095-47-6	2,34E+06
Tetracyclo[5.3.0.0<2,6>.0<3,10>]deca-4,8-diene	034324-40-8	9,32E+05
Tricyclo[5.2.1.0(2,6)]dec-3-ene, 3-phenyl-		6,08E+04
Tricyclo[5.2.1.0(2,6)]dec-3-ene, 4-ethyl-		1,25E+06

Tabela A.29. Compostos detetados no replicado C1 após ensaio de respirometria (Nome, CAS e área)

Nome	CAS	Área
Benzene, [(cyclohex-1-en-1-yl)methyl]-		2,33E+05
1,1'-Biphenyl, 2-methyl-	000643-58-3	4,18E+04
1,1'-Biphenyl, 3-methyl-	000643-93-6	8,72E+04
1,3-Cyclopentadiene	000542-92-7	2,84E+05
1-Buten-3-yne, 2-methyl-	000078-80-8	8,99E+04
1-Cyclohexene-1-carboxaldehyde, 4-(1-methylethenyl)-, (S)-	18031-40-8	7,69E+05
1H-Indene, 1,3-dimethyl-	002177-48-2	6,55E+05
1H-Indene, 2,3-dihydro-4,7-dimethyl-	006682-71-9	1,46E+05
1H-Indene, 2,3-dihydro-4-methyl-	000824-22-6	9,61E+05
1H-Indene, 2,3-dimethyl-	004773-82-4	1,77E+05
1H-Indene, 3a,4,7,7a-tetrahydro-	003048-65-5	2,51E+05
1H-Phenylene	203-80-5	6,00E+04
1-Penten-3-yne	000646-05-9	3,61E+05
1-Penten-3-yne, 2-methyl-	000926-55-6	1,01E+05
2,3-Dioxabicyclo[2.2.2]oct-5-ene	006671-70-1	4,74E+04
3-(2-Methyl-propenyl)-1H-indene	1000187-78-5	8,20E+04
3a,4,5,6,7,7a-Hexahydro-4,7-methanoindene	004488-57-7	6,68E+06
3a,6-Methano-3aH-indene, 2,3,4,5,6,7-hexahydro-	098640-10-9	2,16E+05
3-Ethylidenecycloheptene		1,75E+05
3-Hexen-1-yne, (E)-	002807-09-2	3,20E+05
3-Phenyl-1-butanol	2722-36-3	3,16E+05
4,7-Methano-1H-indene, 2,3,3a,4,7,7a-hexahydro-2-methylene-	068284-25-3	2,94E+05
4,7-Methano-1H-indene, 3a,4,7,7a-tetrahydro-	000077-73-6	9,40E+05
4,7-Methano-1H-indene, octahydro-	006004-38-2	4,13E+06
5-Allyl-2-norbornene	031663-53-3	2,25E+05
6,7-Dimethyl-3H-isobenzofuran-1-one	343852-50-6	1,27E+06
9,10-Dimethylenetricyclo[4.2.1.1(2,5)]decane		3,28E+05
9H-Fluorene, 9-methyl-	2523-37-7	5,85E+04
Acenaphthene	000083-32-9	4,13E+05
Acenaphthylene	208-96-8	1,34E+05
Acetic acid, oxo((1-phenylethyl)amino)-, hydrazide	000093-95-8	2,95E+04
Benzene, 1,1'-(1-methyl-1,3-propanediyl)bis-	001520-44-1	9,11E+04
Benzene, 1,3,5-trimethyl-	000108-67-8	3,34E+05
Benzene, 1,3-dimethyl-	000108-38-3	2,71E+05
Benzene, 1-ethyl-2,4-dimethyl-	000874-41-9	3,35E+05
Benzene, 1-ethyl-2-methyl-	000611-14-3	1,10E+06
Benzene, 1-methyl-2-(1-methylethyl)-	000527-84-4	1,43E+06
Benzene, 1-methyl-4-propyl-	1074-55-1	1,99E+05
Benzene, 1-propenyl-	000637-50-3	4,18E+05
Benzene, 2-ethyl-1,3-dimethyl-	002870-04-4	2,81E+05
Bicyclo[2.2.1]hept-2-ene, 1-methyl-	000822-73-1	6,14E+04
Bicyclo[2.2.1]hept-2-ene, 5-ethenyl-	003048-64-4	2,28E+05
Bicyclo[2.2.1]heptane, 2-ethyl-	002146-41-0	5,15E+04
Bicyclo[4.1.0]heptane, 7-(phenylmethylene)-	82253-12-1	1,06E+05
Bicyclo[4.3.0]non-3-ene, 3,4-dimethyl-7-exo-methylene-		6,99E+05
Bicyclo[4.1.0]heptane, 7-bicyclo[4.1.0]hept-7-ylidene-		3,96E+05
cis-2-Methyl-.beta.-methyl-.beta.-nitrostyrene	1000122-79-5	5,78E+04
Cycloheptanol, 1-methyl-2-methylene-		2,63E+05
Cyclohexene, 4-ethenyl-	000100-40-3	4,58E+04

Nome	CAS	Área
Eicosane	000112-95-8	1,16E+05
Fluorene	000086-73-7	3,67E+05
Indane	000496-11-7	2,19E+06
Indene	95-13-6	2,07E+05
Naphthalene, 1,2,3,4-tetrahydro-	000119-64-2	6,93E+05
Naphthalene, 1,2-dihydro-6-methyl-	002717-47-7	3,70E+05
Naphthalene, 1,4,6-trimethyl-	002131-42-2	3,56E+04
Naphthalene, 1,4-dimethyl-	000571-58-4	2,20E+05
Naphthalene, 1,6,7-trimethyl-	002245-38-7	1,38E+05
Naphthalene, 1,7-dimethyl-	575-37-1	8,28E+04
Naphthalene, 1,8-dimethyl-	000569-41-5	1,93E+05
Naphthalene, 1-ethyl-	001127-76-0	2,66E+05
Naphthalene, 1-methyl-	90-12-0	2,34E+05
Naphthalene, 2,3-dimethyl-	000581-40-8	5,05E+05
Naphthalene, 2,6-dimethyl-	581-42-0	1,46E+05
Naphthalene, 2,7-dimethyl-	000582-16-1	3,23E+05
Naphthalene, 2-methyl-	000091-57-6	2,86E+06
Silicic acid, diethyl bis(trimethylsilyl) ester	3555-45-1	2,96E+04
Tricyclo[5.2.1.0(2,6)]dec-3-ene, 4-ethyl-		9,81E+05
Tricyclo[5.2.1.0(2,6)]dec-4-ene, 4-methyl-		7,29E+06
Triquinacene	006053-74-3	6,34E+05

Tabela A.30. Compostos detetados no replicado C2 após ensaio de respirometria (Nome, CAS e área)

Nome	CAS	Área
3-Ethyl-6-trifluoroacetoxystane		5,04E+04
9H-Fluorene, 9-methyl-	2523-37-7	5,28E+04
(1-Methylenebut-2-enyl)benzene	070588-46-4	6,23E+05
1,1'-Biphenyl, 2-methyl-	000643-58-3	8,86E+04
1,3-Cyclopentadiene	000542-92-7	9,25E+05
11-Methylene-tricyclo[4.3.1.1(2,5)]undecane		1,30E+06
1-Buten-3-yne, 2-methyl-	000078-80-8	1,84E+05
1-Ethyl-5-methylcyclopentene	097797-57-4	5,01E+04
1H-Indene, 2,3-dihydro-4-methyl-	000824-22-6	1,52E+06
1H-Indene, 2,3-dimethyl-	004773-82-4	1,31E+06
1H-Indene, 3a,4,7,7a-tetrahydro-	003048-65-5	7,27E+05
1H-Indene-3-carboxaldehyde, 2,6,7,7a-tetrahydro-1,5-dimethyl-	63767-07-7	2,10E+05
1H-Phenylene	203-80-5	5,27E+04
1-Isopropenyl-naphthalene	1855-47-6	1,13E+05
1-Methyl-1,2,3,4-tetrahydronaphthalen-1-ol	014944-28-6	2,92E+05
1-Penten-3-yne, 2-methyl-	000926-55-6	2,12E+05
2,4-Dimethylstyrene	2234-20-0	3,71E+05
2,7-Methanonaphthalene, 1,2,4a,7,8,8a-hexahydro	58008-61-0	1,65E+06
2-Methyl-1-octen-3-yne	17603-76-8	8,37E+05
2-Methyl-5,5-diphenyl-4-(methylthio)imidazole	024133-96-8	3,99E+04
3a,4,5,6,7,7a-Hexahydro-4,7-methanoindene	004488-57-7	1,22E+07
4,7-Methano-1H-indene, 2,3,3a,4,7,7a-hexahydro-	019398-83-5	5,55E+05
4,7-Methano-1H-indene, 3a,4,7,7a-tetrahydro-	000077-73-6	1,95E+06
4,7-Methano-1H-indene, octahydro-	006004-38-2	7,22E+06
6,7-Dimethyl-3H-isobenzofuran-1-one	343852-50-6	1,90E+06
7-Formylbicyclo[4.1.0]heptane		4,01E+04
9,10-Dimethylenetricyclo[4.2.1.1(2,5)]decane		5,94E+05
9-Methylene-tricyclo[4.2.1.1(2,5)]decane	75156-66-0	1,32E+06
Benzene, (1-methyl-2-cyclopropen-1-yl)-	65051-83-4	2,14E+06
Benzene, (2,4-cyclopentadien-1-ylidene)methyl-	007338-50-3	3,75E+05
Benzene, (2-methyl-1-butenyl)-	056253-64-6	4,20E+05
Benzene, 1,1'-(1-methyl-1,3-propanediyl)bis-	001520-44-1	7,15E+04
Benzene, 1,3,5-trimethyl-	000108-67-8	7,55E+05
Benzene, 1,3-diethyl-	141-93-5	4,03E+05
Benzene, 1,3-dimethyl-	000108-38-3	7,30E+05
Benzene, 1-ethenyl-4-methyl-	000622-97-9	8,19E+05
Benzene, 1-ethyl-2-methyl-	000611-14-3	2,50E+06
Benzene, 1-methyl-3-(1-methylethyl)-	535-77-3	4,72E+05
Benzene, 1-methyl-4-propyl-	1074-55-1	3,52E+05
Benzene, 2-ethenyl-1,4-dimethyl-	002039-89-6	7,64E+05
Benzene, 2-ethyl-1,4-dimethyl-	001758-88-9	8,24E+05
Benzene, 4-ethyl-1,2-dimethyl-	000934-80-5	2,66E+06
Benzeneacetaldehyde, α ,2,5-trimethyl-	52417-50-2	1,06E+06
Bi-1,3,5-cycloheptatrien-1-yl	35393-05-6	4,61E+04
Bicyclo[2.2.1]hept-2-ene, 2-methyl-	000694-92-8	1,77E+05
Bicyclo[2.2.1]hept-2-ene, 5-ethenyl-	003048-64-4	8,07E+05
Bicyclo[2.2.1]hept-2-ene, 5-ethylidene-	016219-75-3	5,87E+05
Bicyclo[2.2.1]heptane, 2-ethyl-	002146-41-0	1,68E+05
Bicyclo[2.2.2]oct-2-ene	000931-64-6	3,14E+05

Nome	CAS	Área
Bicyclo[3.2.1]octa-2,6-diene, 2-phenyl-	101166-08-9	1,26E+05
Bicyclo[4.1.0]heptane, 7-(phenylmethylene)-	82253-12-1	4,83E+04
Biphenyl	000092-52-4	2,12E+05
cis-2-Methyl-.beta.-methyl-.beta.-nitrostyrene	1000122-79-5	5,34E+04
Cyclohexane, 1,1,3-trimethyl-	003073-66-3	6,85E+04
Cyclohexene, 4-ethenyl-	000100-40-3	1,99E+05
Eicosane	000112-95-8	6,30E+04
Fluorene	000086-73-7	3,37E+05
Heptane, 2,5-dimethyl-	002216-30-0	4,38E+04
Indane	000496-11-7	3,82E+06
Naphthalene, 1,2,3,4-tetrahydro-	000119-64-2	1,22E+06
Naphthalene, 1,2-dihydro-6-methyl-	002717-47-7	1,39E+05
Naphthalene, 1,4,5-trimethyl-	2131-41-1	7,46E+04
Naphthalene, 1,4,6-trimethyl-	002131-42-2	3,50E+04
Naphthalene, 1-ethyl-	001127-76-0	2,40E+05
Naphthalene, 1-methyl-	90-12-0	2,07E+05
Naphthalene, 2,3-dimethyl-	000581-40-8	5,23E+05
Naphthalene, 2,6-dimethyl-	581-42-0	1,25E+05
Naphthalene, 2,7-dimethyl-	000582-16-1	2,97E+05
Naphthalene, 2-methyl-	000091-57-6	2,78E+06
Octane, 3-methyl-	002216-33-3	1,20E+05
Octane, 4-methyl-	002216-34-4	9,20E+04
p-Xylene	000106-42-3	4,13E+04
Tetracyclo[3.3.1.0(2,8).0(4,6)]-non-2-ene	1000191-13-7	5,53E+05
Tricyclo[5.2.1.0(2,6)]dec-3-ene, 4-ethyl-		1,45E+06
Tricyclo[5.2.1.0(2,6)]dec-4-ene, 4-methyl-	061222-40-0	1,05E+07
Triquinacene	006053-74-3	1,10E+06

Tabela A.31. Compostos detetados na amostra D inicial (Nome, CAS e área)

Nome	CAS	Área
2-Cyclohexen-1-ol, 4-ethyl-1,4-dimethyl-	55162-55-5	1,40E+05
3,9-Dodecadiyne	61827-89-2	1,04E+05
9,10-Dimethylenetricyclo[4.2.1.1(2,5)]decane		2,15E+05
Benzene, 1-methyl-4-(1-methylpropyl)-	1595-16-0	3,23E+04
Cyclohexanol, 1-ethynyl-, carbamate	126-52-3	3,07E+04
1,1'-Biphenyl, 2-methyl-	643-58-3	3,96E+04
1,3-Cyclododecadiene, (E,Z)-	001129-92-6	3,19E+05
1,3-Cyclopentadiene	000542-92-7	1,57E+05
1,3-Dioxolane-4-methanol, 2-pentadecyl-, acetate, trans-	30889-32-8	4,96E+04
1,7-Dimethyl-3-phenyltricyclo[4.1.0.0(2,7)]hept-3-ene		1,26E+04
11-Methylene-tricyclo[4.3.1.1(2,5)]undecane		4,38E+05
11-Methylene-tricyclo[5.3.1.1(2,6)]dodecane		1,60E+05
1à, 4aá, 8aà-Decahydro-1-naphthalenol	36159-47-4	3,70E+04
1-Buten-3-yne, 2-methyl-	000078-80-8	1,41E+05
1H-Inden-1-one, 2,3-dihydro-3,4,7-trimethyl-	35322-84-0	2,66E+04
1H-Indene, 2,3-dihydro-1,2-dimethyl-	017057-82-8	5,49E+04
1H-Indene, 2,3-dimethyl-	004773-82-4	2,68E+05
1H-Indene-3-carboxaldehyde, 2,6,7,7a-tetrahydro-1,5-dimethyl-	63767-07-7	6,26E+04
1-Penten-3-yne, 2-methyl-	000926-55-6	4,70E+04
2-Decene, 7-methyl-, (Z)-	74630-23-2	1,85E+04
2-Methyl-5,5-diphenyl-4-(methylthio)imidazole	24133-96-8	1,70E+04
2-Pentanone, 4-cyclohexylidene-3,3-diethyl-	313253-65-5	3,71E+04
3a,4,5,6,7,7a-Hexahydro-4,7-methanoindene	004488-57-7	3,27E+06
3-Ethylidenecycloheptene		8,42E+04
4,7-Methano-1H-indene, 3a,4,7,7a-tetrahydro-	000077-73-6	2,70E+05
4,7-Methano-1H-indene, octahydro-	006004-38-2	1,85E+06
4,7-Methano-1H-indene, octahydro-2-(1-methylethylidene)-	74793-54-7	7,93E+04
4-Methyl-2-(3-methyl-but-2-enylideneamino)-pent-2-enenitrile		1,45E+04
5-Allyl-2-norbornene	031663-53-3	8,23E+04
6,7-Dimethyl-3H-isobenzofuran-1-one	343852-50-6	8,12E+05
6-Nonen-1-ol, (E)-	31502-19-9	1,03E+05
9,10-Dimethylenetricyclo[4.2.1.1(2,5)]decane		2,14E+05
9H-Fluorene, 9-methyl-	2523-37-7	2,21E+04
Acenaphthene	000083-32-9	1,52E+05
Azulene, 4,6,8-trimethyl-	000941-81-1	2,83E+04
Benzene, 1,1'-(1-methyl-1,3-propanediyl)bis-	1520-44-1	2,40E+04
Benzene, 1,3,5-trimethyl-	000108-67-8	2,52E+05
Benzene, 1,3-diethyl-	141-93-5	3,04E+04
Benzene, 1-ethenyl-2-methyl-	611-15-4	2,59E+04
Benzene, 1-ethyl-2,3-dimethyl-	000933-98-2	1,38E+05
Benzene, 1-ethyl-2-methyl-	000611-14-3	1,27E+05
Benzene, 1-methyl-2-(1-methylethyl)-	000527-84-4	2,26E+05
Benzene, 1-methyl-4-(1-methylethenyl)-	1195-32-0	1,80E+05
Benzene, 1-methyl-4-propyl-	1074-55-1	6,75E+04
Bicyclo[2.2.1]hept-2-ene, 5-ethenyl-	003048-64-4	6,50E+04
Bicyclo[2.2.1]heptane, 2-ethyl-	002146-41-0	5,32E+04
Bicyclo[4.1.0]heptan-2-ol, 1-phenyl-, endo-		9,17E+04
Bicyclo[4.1.0]heptane, 7-(phenylmethylene)-	82253-12-1	5,83E+04

Nome	CAS	Área
Biphenylene, 1,2,3,6,7,8,8a,8b-octahydro-, trans-cis-1-Ethyl-3-methyl-cyclohexane	28229-15-4	3,35E+05
Cyclobuta[1,2:3,4]dicyclopentene, decahydro-3a-methyl-6-methylene-1-(1-methylethyl)-, [1S-(1.alpha.,3a.alpha.,3b.beta.,6a.beta.,6b.alpha.)]-	019489-10-2	1,21E+04
Cycloheptanol, 1-methyl-2-methylene-	005208-59-3	2,52E+05
Cyclohexane, 1,1,3-trimethyl-		9,39E+04
Cyclohexane, 1,3,5-trimethyl-, (1à,3à,5à)-	003073-66-3	3,30E+04
Cyclohexene, 1-(2-methyl-2-cyclopenten-1-yl)-	1795-27-3	1,45E+04
Cyclohexene, 1-butyl-	58543-96-7	7,47E+04
Cyclohexene, 1-butyl-	3282-53-9	1,11E+04
Cyclotetrasiloxane, octamethyl-	556-67-2	2,54E+04
Fluorene	000086-73-7	6,99E+04
Heptylcyclohexane	5617-41-4	1,64E+04
Hydrazine, 1,1-diphenyl-	530-50-7	1,72E+04
Naphthalene, 1,2,3,4-tetrahydro-	000119-64-2	2,10E+05
Naphthalene, 1,3-dimethyl-	000575-41-7	1,01E+05
Naphthalene, 1-methyl-	90-12-0	1,27E+05
Naphthalene, 2,3,6-trimethyl-	829-26-5	5,49E+04
Naphthalene, 2,3-dimethyl-	000581-40-8	1,84E+05
Naphthalene, 2,6-dimethyl-	581-42-0	6,45E+04
Naphthalene, 2-ethyl-	939-27-5	4,08E+04
p-Menth-1-en-3-one, semicarbazone	4713-41-1	4,61E+04
Pyridine, 3-methyl-	000108-99-6	1,54E+04
Quinoline, 1,2,3,4-tetrahydro-1-(2-nitrobenzoyl)-	24223-25-4	1,97E+04
Tricyclo[4.2.1.1(2,5)]decan-3-ol	66337-85-7	6,09E+04
Tricyclo[5.2.1.0(2,6)]dec-3-ene, 4-ethyl-		6,04E+05
Tricyclo[5.2.1.0(2,6)]dec-4-ene, 4-methyl-		2,19E+06

Tabela A.32. Compostos detetados no replicado D1 após ensaio de respirometria (Nome, CAS e área)

Nome	CAS	Área
Benzene, (2,4-cyclopentadien-1-ylidenemethyl)-	7338-50-3	5,37E+03
Cyclotrisiloxane, hexamethyl-	541-05-9	4,65E+03
Fluorene	86-73-7	1,02E+04
1H-Indene, 1-ethylidene-	2471-83-2	1,93E+04
1H-Indene, 3-methyl-	767-60-2	6,57E+03
2-Propanone, (1-methylethyl)(2-propenyl)hydrazone	110213-09-7	1,37E+04
4,7-Methanoindene, 3a,4,5,6,7,7a-hexahydro-, endo-	2825-86-7	3,61E+03
Acetamide, N-[4-(trimethylsilyl)phenyl]-	17983-71-0	3,97E+03
Benzene, (cyclopropylidenemethyl)-	7555-67-1	3,08E+03
Benzene, 1-cyclobuten-1-yl-	3365-26-2	8,96E+03
Benzene, 1-ethynyl-4-methyl-	000766-97-2	1,07E+04
Naphthalene	000091-20-3	7,68E+04
Naphthalene, 1,2-dimethyl-	573-98-8	1,11E+04
Pyrazolo[1,5-a]pyridine, 3-methyl-2-phenyl-	17408-32-1	4,08E+03
Silicic acid, diethyl bis(trimethylsilyl) ester	3555-45-1	3,24E+03

Tabela A.33. Compostos detetados no replicado D2 após ensaio de respirometria (Nome, CAS e área)

Nome	CAS	Área
1H-Indene, 1-ethylidene-	2471-83-2	1,27E+04
2-Propanone, (1-methylethyl)(2-propenyl)hydrazone	110213-09-7	1,37E+04
Naphthalene	000091-20-3	4,68E+04

Tabela A.34. Compostos detetados na amostra E inicial (Nome, CAS e área)

Nome	CAS	Área
(1-Methylbuta-1,3-dienyl)benzene	054758-36-0	2,08E+05
1,1'-Biphenyl, 2-methyl-	000643-58-3	1,57E+05
1,1'-Biphenyl, 3-methyl-	000643-93-6	2,25E+05
1,1'-Biphenyl, 4-methyl-	000644-08-6	4,05E+05
1,3-Cyclopentadiene	000542-92-7	6,01E+05
1,4,8-Dodecatriene, (E,E,E)-	24252-85-5	2,08E+05
1,4-Dihydronaphthalene	000612-17-9	2,12E+06
11-Methylene-tricyclo[4.3.1.1(2,5)]undecane		3,22E+05
1-Buten-3-yne, 2-methyl-	000078-80-8	5,86E+05
1H-Indene, 1,3-dimethyl-	002177-48-2	1,08E+06
1H-Indene, 2,3-dihydro-5-methyl-	000874-35-1	1,12E+06
1-Pent-3-ynylcyclopenta-1,3-diene		1,82E+06
2-Methyl-1-octen-3-yne	17603-76-8	3,79E+05
3a,4,5,6,7,7a-Hexahydro-4,7-methanoindene	004488-57-7	5,40E+06
4,7-Methano-1H-indene, 3a,4,7,7a-tetrahydro-	000077-73-6	1,78E+06
4,7-Methano-1H-indene, octahydro-	006004-38-2	1,72E+06
4,7-Methano-1H-indene, octahydro-2-(1-methylethylidene)-	74793-54-7	1,70E+05
Benzene, (1-methylethyl)-	000098-82-8	1,42E+05
Benzene, (1-methylpropyl)-	135-98-8	2,96E+05
Benzene, (2-methyl-1-propenyl)-	000768-49-0	4,08E+05
Benzene, 1,2,4,5-tetramethyl-	000095-93-2	4,14E+05
Benzene, 1,3,5-trimethyl-	000108-67-8	1,24E+06
Benzene, 1,3-diethenyl-	000108-57-6	4,41E+05
Benzene, 1-ethenyl-4-methyl-	000622-97-9	2,82E+06
Benzene, 1-ethyl-2-methyl-	000611-14-3	2,61E+06
Benzene, 1-ethyl-3-methyl-	000620-14-4	2,75E+06
Benzene, 1-methyl-2-(1-methylethyl)-	527-84-4	1,81E+06
Benzene, 1-methyl-4-propyl-	1074-55-1	5,30E+05
Benzene, 1-propenyl-	000637-50-3	7,88E+06
Benzene, 2-(2-methoxy-1-propenyl)-1,3,5-trimethyl-	53291-95-5	6,81E+04
Benzene, 2,4-dimethyl-1-(1-methylpropyl)-	001483-60-9	6,15E+05
Benzene, 2-ethenyl-1,3,5-trimethyl-	000769-25-5	7,17E+04
Benzene, 2-ethenyl-1,4-dimethyl-	002039-89-6	2,79E+05
Benzene, 2-propenyl-	000300-57-2	8,36E+05
Benzene, propyl-	000103-65-1	7,19E+05
Benzene, 1-methyl-1,2-propadienyl-	022433-39-2	6,72E+06
Bicyclo[2.2.2]oct-5-en-2-ol	55320-40-6	2,01E+05
Bicyclo[2.2.2]oct-5-en-2-one	002220-40-8	1,81E+05
Biphenyl	000092-52-4	1,14E+06
Cyclohexane, 1,1,3-trimethyl-	003073-66-3	2,16E+05
Cyclohexane, 1,2-dimethyl-, trans-	006876-23-9	8,22E+04
Cyclohexane, 1,3-dimethyl-, cis-	000638-04-0	1,24E+05
Cyclohexane, propyl-	001678-92-8	2,78E+05
Eicosane	000112-95-8	8,25E+04
Ethylbenzene	000100-41-4	3,97E+06
Fluorene	000086-73-7	3,67E+05
Heptane, 2,4-dimethyl-	002213-23-2	7,61E+04
Heptane, 2,5-dimethyl-	002216-30-0	1,32E+05
Heptane, 2,6-dimethyl-	001072-05-5	1,46E+05
Heptane, 3-methyl-	000589-81-1	1,54E+05

Nome	CAS	Área
Indane	000496-11-7	2,83E+06
Indene	000095-13-6	6,23E+06
Naphthalene	000091-20-3	1,83E+07
Naphthalene, 1,2,3,4-tetrahydro-	000119-64-2	3,91E+05
Naphthalene, 1,2-dihydro-6-methyl-	002717-47-7	4,45E+05
Naphthalene, 1,5-dimethyl-	000571-61-9	1,49E+05
Naphthalene, 1,6-dimethyl-	000575-43-9	2,33E+05
Naphthalene, 1,7-dimethyl-	000575-37-1	8,76E+05
Naphthalene, 1-ethyl-	001127-76-0	1,62E+05
Naphthalene, 1-methyl-	000090-12-0	4,26E+06
Naphthalene, 2,3-dimethyl-	000581-40-8	3,34E+05
Naphthalene, 2,7-dimethyl-	000582-16-1	3,54E+05
Naphthalene, 2-ethenyl-	827-54-3	3,79E+05
Naphthalene, 2-ethyl-	000939-27-5	3,56E+05
Naphthalene, 2-methyl-	000091-57-6	6,16E+06
Nonane	000111-84-2	1,66E+06
Octane	000111-65-9	6,77E+05
Octane, 2,6-dimethyl-	002051-30-1	2,89E+05
Octane, 2-methyl-	003221-61-2	4,30E+05
Phenanthrene	000085-01-8	1,99E+05
p-Xylene	000106-42-3	3,81E+06
Silicic acid, diethyl bis(trimethylsilyl) ester	3555-45-1	1,62E+05
Sulfuric acid, 5,8,11-heptadecatrienyl methyl ester	056554-67-7	1,49E+05
Toluene	000108-88-3	5,70E+05
Tricyclo[4.1.1.0(2,5)]octane	70970-60-4	3,52E+05
Tricyclo[5.2.1.0(2,6)]dec-3-ene, 4-ethyl-	1000153-23-4	8,99E+05
Tricyclo[5.2.1.0(2,6)]dec-4-ene, 4-methyl-		5,18E+05

Tabela A.35. Compostos detetados no replicado E1 após ensaio de respirometria (Nome, CAS e área)

Nome	CAS	Área
(1-Methylbuta-1,3-dienyl)benzene	054758-36-0	2,08E+05
1,1'-Biphenyl, 2-methyl-	000643-58-3	1,57E+05
1,1'-Biphenyl, 3-methyl-	000643-93-6	2,25E+05
1,1'-Biphenyl, 4-methyl-	000644-08-6	4,05E+05
1,3-Cyclopentadiene	000542-92-7	6,01E+05
1,4,8-Dodecatriene, (E,E,E)-	24252-85-5	2,08E+05
1,4-Dihydronaphthalene	000612-17-9	2,12E+06
11-Methylene-tricyclo[4.3.1.1(2,5)]undecane		3,22E+05
1-Buten-3-yne, 2-methyl-	000078-80-8	5,86E+05
1H-Indene, 1,3-dimethyl-	002177-48-2	1,08E+06
1H-Indene, 2,3-dihydro-5-methyl-	000874-35-1	1,12E+06
1-Pent-3-ynylcyclopenta-1,3-diene		1,82E+06
2-Methyl-1-octen-3-yne	17603-76-8	3,79E+05
3a,4,5,6,7,7a-Hexahydro-4,7-methanoindene	004488-57-7	5,40E+06
4,7-Methano-1H-indene, 3a,4,7,7a-tetrahydro-	000077-73-6	1,78E+06
4,7-Methano-1H-indene, octahydro-	006004-38-2	1,72E+06
4,7-Methano-1H-indene, octahydro-2-(1-methylethylidene)-	74793-54-7	1,70E+05
Benzene, (1-methylethyl)-	000098-82-8	1,42E+05
Benzene, (1-methylpropyl)-	135-98-8	2,96E+05
Benzene, (2-methyl-1-propenyl)-	000768-49-0	4,08E+05
Benzene, 1,2,4,5-tetramethyl-	000095-93-2	4,14E+05
Benzene, 1,3,5-trimethyl-	000108-67-8	1,24E+06
Benzene, 1,3-diethenyl-	000108-57-6	4,41E+05
Benzene, 1-ethenyl-4-methyl-	000622-97-9	2,82E+06
Benzene, 1-ethyl-2-methyl-	000611-14-3	2,61E+06
Benzene, 1-ethyl-3-methyl-	000620-14-4	2,75E+06
Benzene, 1-methyl-2-(1-methylethyl)-	527-84-4	1,81E+06
Benzene, 1-methyl-4-propyl-	1074-55-1	5,30E+05
Benzene, 1-propenyl-	000637-50-3	7,88E+06
Benzene, 2-(2-methoxy-1-propenyl)-1,3,5-trimethyl-	53291-95-5	6,81E+04
Benzene, 2,4-dimethyl-1-(1-methylpropyl)-	001483-60-9	6,15E+05
Benzene, 2-ethenyl-1,3,5-trimethyl-	000769-25-5	7,17E+04
Benzene, 2-ethenyl-1,4-dimethyl-	002039-89-6	2,79E+05
Benzene, 2-propenyl-	000300-57-2	8,36E+05
Benzene, propyl-	000103-65-1	7,19E+05
Benzene, 1-methyl-1,2-propadienyl-	022433-39-2	6,72E+06
Bicyclo[2.2.2]oct-5-en-2-ol	55320-40-6	2,01E+05
Bicyclo[2.2.2]oct-5-en-2-one	002220-40-8	1,81E+05
Biphenyl	000092-52-4	1,14E+06
Biphenyl	000092-52-4	2,13E+05
Cyclohexane, 1,1,3-trimethyl-	003073-66-3	2,16E+05
Cyclohexane, 1,2-dimethyl-, trans-	006876-23-9	8,22E+04
Cyclohexane, 1,3-dimethyl-, cis-	000638-04-0	1,24E+05
Cyclohexane, propyl-	001678-92-8	2,78E+05
Eicosane	000112-95-8	8,25E+04
Ethylbenzene	000100-41-4	3,97E+06
Fluorene	000086-73-7	3,67E+05
Heptane, 2,4-dimethyl-	002213-23-2	7,61E+04

Nome	CAS	Área
Heptane, 2,5-dimethyl-	002216-30-0	1,32E+05
Heptane, 2,6-dimethyl-	001072-05-5	1,46E+05
Heptane, 3-methyl-	000589-81-1	1,54E+05
Indane	000496-11-7	2,83E+06
Indene	000095-13-6	6,23E+06
Naphthalene	000091-20-3	1,83E+07
Naphthalene, 1,2,3,4-tetrahydro-	000119-64-2	3,91E+05
Naphthalene, 1,2-dihydro-6-methyl-	002717-47-7	4,45E+05
Naphthalene, 1,5-dimethyl-	000571-61-9	1,49E+05
Naphthalene, 1,6-dimethyl-	000575-43-9	2,33E+05
Naphthalene, 1,7-dimethyl-	000575-37-1	8,76E+05
Naphthalene, 1-ethyl-	001127-76-0	1,62E+05
Naphthalene, 1-methyl-	000090-12-0	4,26E+06
Naphthalene, 2,3-dimethyl-	000581-40-8	3,34E+05
Naphthalene, 2,7-dimethyl-	000582-16-1	3,54E+05
Naphthalene, 2-ethenyl-	827-54-3	3,79E+05
Naphthalene, 2-ethyl-	000939-27-5	3,56E+05
Naphthalene, 2-methyl-	000091-57-6	6,16E+06
Nonane	000111-84-2	1,66E+06
Octane	000111-65-9	6,77E+05
Octane, 2,6-dimethyl-	002051-30-1	2,89E+05
Octane, 2-methyl-	003221-61-2	4,30E+05
Phenanthrene	000085-01-8	1,99E+05
p-Xylene	000106-42-3	3,81E+06
Silicic acid, diethyl bis(trimethylsilyl) ester	3555-45-1	1,62E+05
Sulfuric acid, 5,8,11-heptadecatrienyl methyl ester	056554-67-7	1,49E+05
Toluene	000108-88-3	5,70E+05
Tricyclo[4.1.1.0(2,5)]octane	70970-60-4	3,52E+05
Tricyclo[5.2.1.0(2,6)]dec-3-ene, 4-ethyl-	1000153-23-4	8,99E+05
Tricyclo[5.2.1.0(2,6)]dec-4-ene, 4-methyl-		5,18E+05

Tabela A.36. Compostos detetados no replicado E2 após ensaio de respirometria (Nome, CAS e área)

Nome	CAS	Área
(1H)-3a,4,5,6,7,7a-Hexahydroindene		2,18E+05
(1-Methylbuta-1,3-dienyl)benzene	054758-36-0	2,48E+05
.alpha.,.beta.,.beta.-Trimethylstyrene	000769-57-3	8,08E+04
1,1'-Biphenyl, 2-methyl-	000643-58-3	1,55E+05
1,1'-Biphenyl, 4-methyl-	000644-08-6	5,34E+05
1,3-Cyclopentadiene	000542-92-7	1,13E+05
1,4-Dihydronaphthalene	000612-17-9	2,37E+06
1-Buten-3-yne, 2-methyl-	000078-80-8	2,41E+05
1H-Indene, 1,3-dimethyl-	002177-48-2	8,47E+05
1H-Indene, 2,3-dihydro-1,2-dimethyl-	17057-82-8	8,56E+05
1H-Indene, 2,3-dihydro-5-methyl-	000874-35-1	1,31E+06
1H-Indene, 2,3-dimethyl-	004773-82-4	1,32E+06
2,4-Dimethylstyrene	002234-20-0	3,00E+05
2,5-Norbornadiene	000121-46-0	1,10E+05
2-Methylindene	002177-47-1	6,82E+06
3a,4,5,6,7,7a-Hexahydro-4,7-methanoindene	004488-57-7	4,53E+06
3-Ethyl-6-trifluoroacetooctane		7,07E+04
4,7-Methano-1H-indene, 3a,4,7,7a-tetrahydro-	77-73-6	1,01E+06
6-[(1E)-1,3-Butadienyl]-1,4-cycloheptadiene	84984-82-7	1,44E+05
Acenaphthene	000083-32-9	4,74E+05
Benzene, (1-ethyl-1-propenyl)-	004701-36-4	2,92E+05
Benzene, (1-methylethyl)-	000098-82-8	1,17E+05
Benzene, 1,1'-(1-methyl-1,3-propanediyl)bis-	001520-44-1	8,13E+04
Benzene, 1,2,4,5-tetramethyl-	000095-93-2	3,82E+05
Benzene, 1,3,5-trimethyl-	000108-67-8	1,13E+06
Benzene, 1,3-diethenyl-	000108-57-6	4,36E+05
Benzene, 1,4-bis(1-methylethenyl)-	001605-18-1	7,19E+04
Benzene, 1-ethenyl-2-methyl-	611-15-4	7,78E+06
Benzene, 1-ethenyl-3-ethyl-	007525-62-4	1,30E+06
Benzene, 1-ethenyl-3-methyl-	000100-80-1	2,30E+06
Benzene, 1-ethyl-2-methyl-	000611-14-3	1,32E+06
Benzene, 1-ethyl-3-methyl-	000620-14-4	2,55E+06
Benzene, 1-methyl-3-(1-methylethyl)-	535-77-3	1,23E+06
Benzene, 1-methyl-4-propyl-	001074-55-1	3,02E+05
Benzene, 2,4-dimethyl-1-(1-methylpropyl)-	001483-60-9	5,48E+05
Benzene, 2-ethenyl-1,4-dimethyl-	002039-89-6	3,95E+05
Benzene, 2-propenyl-	300-57-2	2,21E+06
Benzene, 4-ethenyl-1,2-dimethyl-	027831-13-6	1,37E+06
Benzene, 4-ethyl-1,2-dimethyl-	000934-80-5	2,11E+05
Benzene, cyclopropyl-	000873-49-4	2,44E+06
Benzene, propyl-	000103-65-1	5,65E+05
Bicyclo[2.2.1]hept-2-ene, 2-methyl-	000694-92-8	1,56E+05
Bicyclo[3.2.1]octa-2,6-diene, 2-phenyl-	101166-08-9	1,69E+05
Bicyclo[4.3.0]non-3-ene, 3,4-dimethyl-7-exo-methylene-	1000155-78-6	1,58E+05
Biphenyl	000092-52-4	1,43E+06
Cyclohexane, 1,1,3-trimethyl-	003073-66-3	1,01E+05
Cyclohexane, propyl-	001678-92-8	1,00E+05
Cyclohexene, 4-ethenyl-	000100-40-3	2,07E+05
Cyclooctene, 3-methyl-	13152-05-1	8,35E+04
Eicosane	000112-95-8	8,55E+04

Nome	CAS	Area
Ethylbenzene	000100-41-4	3,50E+06
Fluorene	000086-73-7	4,39E+05
Indene	000095-13-6	5,87E+06
Naphthalene	000091-20-3	2,07E+07
Naphthalene, 1,2,3,4-tetrahydro-	000119-64-2	4,60E+05
Naphthalene, 1,2-dihydro-6-methyl-	002717-47-7	5,38E+05
Naphthalene, 1,4,5-trimethyl-	002131-41-1	6,56E+04
Naphthalene, 1,4-dimethyl-	000571-58-4	1,93E+05
Naphthalene, 1-ethyl-	001127-76-0	1,66E+05
Naphthalene, 1-methyl-	000090-12-0	2,12E+05
Naphthalene, 2,3,6-trimethyl-	000829-26-5	7,56E+04
Naphthalene, 2,3-dimethyl-	000581-40-8	1,01E+06
Naphthalene, 2,7-dimethyl-	000582-16-1	4,27E+05
Naphthalene, 2-ethyl-	000939-27-5	4,27E+05
Naphthalene, 2-methyl-	000091-57-6	7,54E+06
Nonane	000111-84-2	8,83E+05
Octane	000111-65-9	2,33E+05
Octane, 2,6-dimethyl-	002051-30-1	1,51E+05
Octane, 2-methyl-	003221-61-2	1,70E+05
o-Xylene	000095-47-6	2,80E+06
Pentamethylbenzenesulphonamide	208173-25-5	2,98E+05
Phenanthrene	000085-01-8	2,52E+05
p-Xylene	000106-42-3	3,53E+06
Tetracyclo[3.3.1.0(2,8).0(4,6)]-non-2-ene	1000191-13-7	6,12E+05
Toluene	000108-88-3	6,69E+05
Tricyclo[5.2.1.0(2,6)]dec-3-ene, 4-ethyl-		1,98E+05
Tricyclo[5.2.1.0(2,6)]dec-4-ene, 4-methyl-		2,21E+05

Tabela A.37. Compostos detetados na amostra F inicial (Nome, CAS e área)

Nome	CAS	Área
(1-Methylbuta-1,3-dienyl)benzene	054758-36-0	5,55E+05
.alpha.,.beta.,.beta.-Trimethylstyrene	000769-57-3	1,06E+05
1,1'-Biphenyl, 2-methyl-	000643-58-3	1,10E+05
1,1'-Biphenyl, 3-methyl-	000643-93-6	1,88E+05
1,1'-Biphenyl, 4-methyl-	000644-08-6	1,95E+05
1,3-Cyclopentadiene	000542-92-7	5,02E+05
1,4-Dihydronaphthalene	000612-17-9	6,22E+06
1H-Indene, 1,3-dimethyl-	002177-48-2	7,81E+05
1H-Indene, 2,3-dihydro-1,2-dimethyl-	17057-82-8	4,22E+05
1H-Indene, 2,3-dihydro-4-methyl-	000824-22-6	1,69E+06
1H-Indene, 2,3-dimethyl-	004773-82-4	1,09E+06
1H-Indene, 4,7-dimethyl-	006974-97-6	2,62E+05
1-Octanol, 2-butyl-	003913-02-8	1,50E+05
1-Undecene, 7-methyl-	74630-42-5	1,73E+05
2,5-Norbornadiene	000121-46-0	2,39E+05
2-Ethyl-1-H-indene	017059-50-6	5,74E+04
2-Indanol	4254-29-9	2,23E+05
3a,4,5,6,7,7a-Hexahydro-4,7-methanoindene	004488-57-7	7,89E+06
3-Ethylidenecycloheptene		6,19E+05
4,7-Methano-1H-indene, 3a,4,7,7a-tetrahydro-	000077-73-6	1,87E+06
4,7-Methano-1H-indene, octahydro-	006004-38-2	2,30E+06
Acenaphthene	000083-32-9	3,14E+05
Benzene, (1-ethyl-1-propenyl)-	004701-36-4	5,13E+05
Benzene, (1-methylethyl)-	000098-82-8	2,75E+05
Benzene, 1,2,3-trimethyl-	000526-73-8	2,60E+06
Benzene, 1,2,4,5-tetramethyl-	000095-93-2	5,63E+05
Benzene, 1,3-diethenyl-	000108-57-6	7,14E+05
Benzene, 1,3-dimethyl-	000108-38-3	8,20E+06
Benzene, 1-ethenyl-3-methyl-	000100-80-1	2,62E+06
Benzene, 1-ethyl-2-methyl-	000611-14-3	3,14E+06
Benzene, 1-ethyl-3-methyl-	000620-14-4	5,80E+06
Benzene, 1-methyl-2-(1-methylethyl)-	000527-84-4	3,68E+05
Benzene, 1-methyl-4-(2-propenyl)-	003333-13-9	6,20E+05
Benzene, 2,4-dimethyl-1-(1-methylpropyl)-	001483-60-9	8,97E+05
Benzene, 2-butenyl-	001560-06-1	4,21E+05
Benzene, 2-ethyl-1,3-dimethyl-	002870-04-4	2,19E+06
Benzene, 2-ethyl-1,4-dimethyl-	002648-61-5	1,11E+06
Benzene, 2-propenyl-	000098-86-2	1,52E+07
Benzene, cyclopropyl-	000873-49-4	4,70E+06
Benzene, propyl-	000103-65-1	1,48E+06
Benzene,1-methyl-1,2-propadienyl-	022433-39-2	9,28E+06
Bicyclo[2.2.1]heptane, 2-ethenyl-	056851-51-5	2,98E+05
Bicyclo[2.2.2]oct-2-ene	000931-64-6	3,35E+05
Bicyclo[3.2.1]octa-2,6-diene, 2-phenyl-	101166-08-9	1,13E+05
Biphenyl	000092-52-4	1,10E+06
Cycloheptane, 1,3,5-tris(methylene)-	000637-50-3	5,97E+05
Cyclohexane, 1,1,3-trimethyl-	003073-66-3	2,32E+05
Cyclohexane, 1,3-dimethyl-, cis-	000638-04-0	5,27E+04

Nome	CAS	Área
Cyclohexane, propyl-	001678-92-8	3,00E+05
Cyclohexene, 4-ethenyl-	000100-40-3	4,59E+05
Cyclopentane, propyl-	002040-96-2	9,73E+04
Ethylbenzene	000100-41-4	9,69E+06
Fluorene	000086-73-7	2,35E+05
Heptane, 2,4-dimethyl-	002213-23-2	5,60E+04
Heptane, 3,5-dimethyl-	000926-82-9	1,16E+05
Heptane, 3-methyl-	000589-81-1	5,66E+04
Indene	000095-13-6	1,08E+07
Naphthalene	000091-20-3	2,48E+07
Naphthalene, 1,2,3,4-tetrahydro-	000119-64-2	5,84E+05
Naphthalene, 1,2-dihydro-6-methyl-	002717-47-7	5,57E+04
Naphthalene, 1,2-dimethyl-	000573-98-8	1,77E+05
Naphthalene, 1,7-dimethyl-	000575-37-1	2,82E+05
Naphthalene, 1,8-dimethyl-	000569-41-5	1,23E+05
Naphthalene, 1-ethyl-	001127-76-0	1,30E+05
Naphthalene, 1-methyl-	000090-12-0	4,80E+06
Naphthalene, 2,3-dimethyl-	000581-40-8	7,35E+05
Naphthalene, 2,6-dimethyl-	000581-42-0	3,11E+05
Naphthalene, 2-ethyl-	000939-27-5	3,07E+05
Naphthalene, 2-methyl-	000091-57-6	7,16E+06
Nonane	000111-84-2	2,75E+06
Nonane, 3-methyl-	005911-04-6	4,87E+05
Octane	000111-65-9	5,09E+05
Octane, 2-methyl-	003221-61-2	1,19E+05
Octane, 2-methyl-	003221-61-2	5,54E+05
p-Xylene	000106-42-3	1,00E+07
Tetracyclo[3.3.1.0(2,8).0(4,6)]-non-2-ene	1000191-13-7	1,75E+06
Tetracyclo[5.4.0(4,10).0(5,9)]undec-2-ene	94400-09-6	1,20E+06
Toluene	000108-88-3	1,87E+06
Tricyclo[5.2.1.0(2,6)]dec-3-ene, 4-ethyl-		1,16E+06
Tricyclo[5.2.1.0(2,6)]dec-4-ene, 4-methyl-		4,13E+05

Tabela A.38. Compostos detetados no replicado F1 após ensaio de respirometria (Nome, CAS e área)

Nome	CAS	Área
Dodecane, 3-methyl-	17312-57-1	8,22E+04
(1-Methylbuta-1,3-dienyl)benzene	054758-36-0	3,40E+05
1,1'-Biphenyl, 2-ethyl-	1812-51-7	3,49E+04
1,1'-Biphenyl, 2-methyl-	000643-58-3	1,64E+05
1,1'-Biphenyl, 4-methyl-	000644-08-6	4,24E+05
1,2,3-Trimethylindene	4773-83-5	4,45E+04
1,3-Cyclopentadiene	000542-92-7	2,30E+05
1,4-Dihydronaphthalene	000612-17-9	1,36E+06
1-Buten-3-yne, 2-methyl-	000078-80-8	9,39E+04
1H-Indene, 1,1-dimethyl-	018636-55-0	8,55E+04
1H-Indene, 1,3-dimethyl-	002177-48-2	8,26E+05
1H-Indene, 2,3-dihydro-1,2-dimethyl-	17057-82-8	1,98E+05
1H-Indene, 2,3-dihydro-5-methyl-	000874-35-1	6,20E+05
1H-Indene, 2,3-dimethyl-	004773-82-4	1,50E+05
2-Indanol	4254-29-9	1,11E+05
2-Methylindene	002177-47-1	3,93E+06
3-(2-Methyl-propenyl)-1H-indene	1000187-78-5	7,67E+04
3a,4,5,6,7,7a-Hexahydro-4,7-methanoindene	004488-57-7	2,57E+06
3-Ethylidenecycloheptene		9,10E+04
4,7-Methano-1H-indene, 3a,4,7,7a-tetrahydro-	000077-73-6	6,97E+05
4,7-Methano-1H-indene, octahydro-	006004-38-2	8,75E+05
4,7-Methano-1H-indene, octahydro-2-methylene-	068284-23-1	2,61E+05
5,7-Dodecadiyn-1,12-bis(carbamic acid, butyloxymethyl ester)		3,16E+04
Acenaphthene	000083-32-9	3,80E+05
Adamantane-1-(3,3-dichloropropyn-1-yl)	139185-48-1	4,59E+04
Benzene, (1-ethyl-1-propenyl)-	004701-36-4	1,24E+05
Benzene, (1-methylethyl)-	000098-82-8	6,24E+04
Benzene, (3-methyl-2-butenyl)-	004489-84-3	4,11E+04
Benzene, 1,1'-(1-methyl-1,2-ethanediyl)bis-	5814-85-7	3,74E+04
Benzene, 1,1'-(1-methyl-1,3-propanediyl)bis-	001520-44-1	5,89E+04
Benzene, 1,2,3-trimethyl-	000526-73-8	4,35E+05
Benzene, 1,2,4,5-tetramethyl-	000095-93-2	2,01E+05
Benzene, 1,3-diethenyl-	000108-57-6	2,32E+05
Benzene, 1-ethenyl-2-methyl-	000611-15-4	5,25E+05
Benzene, 1-ethenyl-3-ethyl-	007525-62-4	8,00E+05
Benzene, 1-ethenyl-4-methyl-	000622-97-9	1,13E+06
Benzene, 1-ethyl-2-methyl-	000611-14-3	9,60E+05
Benzene, 1-ethyl-3-methyl-	000620-14-4	8,27E+05
Benzene, 1-methyl-2-(1-methylethyl)-	000527-84-4	1,21E+05
Benzene, 1-methyl-4-(1-methylethyl)-	000099-87-6	8,19E+05
Benzene, 1-methyl-4-(2-propenyl)-	003333-13-9	2,02E+05
Benzene, 2,4-dimethyl-1-(1-methylpropyl)-	001483-60-9	4,27E+05
Benzene, 2-butenyl-	001560-06-1	1,31E+05
Benzene, 2-ethenyl-1,4-dimethyl-	002039-89-6	1,70E+05
Benzene, 2-propenyl-	000098-86-2	3,01E+06
Benzene, cyclopropyl-	000873-49-4	1,17E+06
Benzene, propyl-	000103-65-1	2,14E+05
Benzenethiol, 4-(1,1-dimethylethyl)-2-methyl-	015570-10-2	4,47E+04
Bicyclo[2.2.2]oct-5-en-2-ol	055320-40-6	5,04E+04

Nome	CAS	Área
Bicyclo[3.2.1]octa-2,6-diene, 2-phenyl-	101166-08-9	1,67E+05
Biphenyl	000092-52-4	1,05E+06
Cycloheptane, 1,3,5-tris(methylene)-	000637-50-3	2,08E+05
Cyclohexane, propyl-	001678-92-8	4,72E+04
Cyclopentanespiro-2'-bicyclo[1.1.0]butane-4'- spirocyclopentane	114310-66-6	1,39E+05
Cyclopentanol, 1-methyl-	001462-03-9	1,06E+05
Diphenylmethane	000101-81-5	4,08E+04
Ethylbenzene	000100-41-4	4,09E+05
Fluorene	000086-73-7	3,61E+05
Indene	000095-13-6	2,82E+06
Naphthalene	000091-20-3	1,37E+07
Naphthalene, 1,2,3,4-tetrahydro-	000119-64-2	2,36E+05
Naphthalene, 1,2-dihydro-6-methyl-	002717-47-7	3,49E+04
Naphthalene, 1,3-dimethyl-	000575-41-7	1,42E+05
Naphthalene, 1,6,7-trimethyl-	002245-38-7	4,57E+04
Naphthalene, 1-ethyl-	001127-76-0	1,65E+05
Naphthalene, 1-methyl-	000090-12-0	3,62E+06
Naphthalene, 2,3-dimethyl-	000581-40-8	8,48E+05
Naphthalene, 2,6-dimethyl-	000581-42-0	2,37E+05
Naphthalene, 2,7-dimethyl-	000582-16-1	3,46E+05
Naphthalene, 2-ethyl-	000939-27-5	3,41E+05
Naphthalene, 2-methyl-	000091-57-6	5,12E+06
Nonane	000111-84-2	3,40E+05
Octane, 2,6-dimethyl-	002051-30-1	8,06E+04
Octane, 2-methyl-	003221-61-2	5,87E+04
o-Xylene	000095-47-6	4,55E+05
p-Xylene	000106-42-3	4,48E+05
Tetracyclo[5.4.0(4,10).0(5,9)]undec-2-ene	94400-09-6	2,25E+05
Tricyclo[5.2.1.0(2,6)]dec-3-ene, 4-ethyl-		6,42E+05

Tabela A.39. Compostos detetados no replicado F2 após ensaio de respirometria (Nome, CAS e área)

Nome	CAS	Área
.alpha.,.beta.,.beta.-Trimethylstyrene	000769-57-3	6,80E+04
1,1'-Biphenyl, 2-ethyl-	1812-51-7	4,01E+04
1,1'-Biphenyl, 2-methyl-	000643-58-3	1,47E+05
1,1'-Biphenyl, 4-methyl-	000644-08-6	2,71E+05
1,3-Cyclopentadiene	000542-92-7	7,37E+04
1,4-Dihydronaphthalene	000612-17-9	2,06E+06
1H-Indene, 1,1-dimethyl-	018636-55-0	1,38E+05
1H-Indene, 1,3-dimethyl-	002177-48-2	1,20E+06
1H-Indene, 2,3-dihydro-1,2-dimethyl-	17057-82-8	2,44E+05
1H-Indene, 2,3-dihydro-4-methyl-	000824-22-6	1,11E+06
1H-Indene, 2,3-dimethyl-	004773-82-4	2,24E+05
1-Penten-3-yne	000646-05-9	1,73E+05
1-Penten-3-yne, 2-methyl-	000926-55-6	6,01E+04
2,5-Norbornadiene	000121-46-0	8,32E+04
2-Indanol	4254-29-9	1,10E+05
3-(2-Methyl-propenyl)-1H-indene	1000187-78-5	7,66E+04
3a,4,5,6,7,7a-Hexahydro-4,7-methanoindene	004488-57-7	3,58E+06
3-Ethylidenecycloheptene		1,11E+05
4,7-Methano-1H-indene, 3a,4,7,7a-tetrahydro-	000077-73-6	7,60E+05
4,7-Methano-1H-indene, octahydro-2-methylene-	068284-23-1	1,78E+05
Acenaphthene	000083-32-9	4,39E+05
Adamantane-1-(3,3-dichloropropyn-1-yl)	139185-48-1	6,41E+04
Benzene, (1-ethyl-1-propenyl)-	004701-36-4	2,59E+05
Benzene, (1-methylethyl)-	000098-82-8	6,14E+04
Benzene, 1,1'-(1-methyl-1,2-ethanediyl)bis-	5814-85-7	4,41E+04
Benzene, 1,1'-(1-methyl-1,3-propanediyl)bis-	001520-44-1	6,59E+04
Benzene, 1,1'-(diazomethylene)bis-	883-40-9	3,53E+04
Benzene, 1,2,4,5-tetramethyl-	000095-93-2	3,25E+05
Benzene, 1,3,5-trimethyl-	000108-67-8	7,90E+05
Benzene, 1,3-diethenyl-	000108-57-6	3,53E+05
Benzene, 1,3-dimethyl-	000108-38-3	1,24E+06
Benzene, 1-ethenyl-3-ethyl-	007525-62-4	1,09E+06
Benzene, 1-ethenyl-3-methyl-	000100-80-1	8,83E+05
Benzene, 1-ethenyl-4-methyl-	000622-97-9	1,81E+06
Benzene, 1-ethyl-2-methyl-	000611-14-3	1,65E+06
Benzene, 1-methyl-4-(1-methylethyl)-	000099-87-6	1,01E+06
Benzene, 1-methyl-4-(2-propenyl)-	003333-13-9	2,22E+05
Benzene, 2,4-dimethyl-1-(1-methylpropyl)-	001483-60-9	4,77E+05
Benzene, 2-ethenyl-1,4-dimethyl-	002039-89-6	3,36E+05
Benzene, 2-propenyl-	000098-86-2	5,74E+06
Benzene, 4-ethenyl-1,2-dimethyl-	027831-13-6	1,16E+06
Benzene, 4-ethyl-1,2-dimethyl-	000934-80-5	1,83E+05
Benzene, propyl-	000103-65-1	3,36E+05
Benzene,1-methyl-1,2-propadienyl-	022433-39-2	5,94E+06
Benzenethiol, 4-(1,1-dimethylethyl)-2-methyl-	015570-10-2	5,09E+04
Bicyclo[3.2.1]octa-2,6-diene, 2-phenyl-	101166-08-9	2,03E+05
Biphenyl	000092-52-4	1,33E+06
Cycloheptane, 1,3,5-tris(methylene)-	000637-50-3	2,34E+05
Cyclohexane, propyl-	001678-92-8	4,56E+04

Nome	CAS	Área
Cyclopentanespiro-2'-bicyclo[1.1.0]butane-4'-spirocyclopentane	114310-66-6	1,72E+05
Cyclopentanol, 1-methyl-	001462-03-9	4,05E+04
Dodecane, 3-methyl-	17312-57-1	6,90E+04
Ethylbenzene	000100-41-4	1,03E+06
Fluorene	000086-73-7	4,05E+05
Indane	000496-11-7	1,87E+06
Indene	000095-13-6	4,55E+06
Naphthalene	000091-20-3	1,91E+07
Naphthalene, 1,2,3,4-tetrahydro-	000119-64-2	4,01E+05
Naphthalene, 1,2-dihydro-6-methyl-	002717-47-7	4,90E+05
Naphthalene, 1,3-dimethyl-	000575-41-7	1,73E+05
Naphthalene, 1,4,6-trimethyl-	2131-42-2	5,73E+04
Naphthalene, 1,6,7-trimethyl-	002245-38-7	4,28E+04
Naphthalene, 1-ethyl-	001127-76-0	3,88E+05
Naphthalene, 1-methyl-	000090-12-0	7,02E+06
Naphthalene, 2,3-dimethyl-	000581-40-8	9,65E+05
Naphthalene, 2,6-dimethyl-	000581-42-0	4,01E+05
Naphthalene, 2-methyl-	000091-57-6	4,77E+06
Nonane	000111-84-2	2,94E+05
Nonane, 3-methyl-	005911-04-6	6,51E+04
Octane, 2-methyl-	003221-61-2	3,39E+04
o-Xylene	000095-47-6	1,19E+06
Tetracyclo[3.3.1.0(2,8).0(4,6)]-non-2-ene	1000191-13-7	3,33E+05
Tetracyclo[5.4.0(4,10).0(5,9)]undec-2-ene	94400-09-6	1,94E+05
Tricyclo[5.2.1.0(2,6)]dec-3-ene, 4-ethyl-		7,44E+05

Tabela A.40. Compostos detetados na amostra T inicial (Nome, CAS e área)

Nome	CAS	Área
1,1'-Biphenyl, 2-methyl-	000095-47-6	5,34E+04
1,1'-Biphenyl, 4-methyl-	000931-64-6	2,82E+04
1,2,3-Trimethylindene	002146-41-0	1,77E+04
1,2-Bis(trimethylsilyl)benzene	057223-18-4	4,92E+04
1,3-Cyclohexadien-5-ol, 1-phenyl-		6,07E+04
1,3-Cyclopentadiene	000620-14-4	2,25E+05
1,4-Cyclohexadiene	000611-14-3	2,33E+05
1,4-Dihydronaphthalene	55162-55-5	1,19E+05
1-Hexen-3-yne	000611-15-4	2,57E+05
1H-Inden-1-one, 2,3-dihydro-	019398-83-5	1,34E+05
1H-Indene, 2,3-dihydro-1,2-dimethyl-	000542-92-7	3,04E+04
1H-Indene, 2,3-dihydro-4,7-dimethyl-	000542-92-7	1,27E+05
1H-Indene, 2,3-dihydro-5-methyl-	000542-92-7	3,11E+05
1H-Indene, 2,3-dimethyl-	000542-92-7	9,72E+04
1-Nonen-3-yne	000077-73-6	4,61E+05
2-Cyclohexen-1-ol, 4-ethyl-1,4-dimethyl-	000496-11-7	5,00E+05
2-Methyl-5,5-diphenyl-4-(methylthio)imidazole	141-93-5	5,88E+04
2-Methyl-7-phenylindole	000095-13-6	3,38E+05
2-Propenal, 3-(4-methylphenyl)-	93-53-8	5,56E+04
3a,4,5,6,7,7a-Hexahydro-4,7-methanoindene	013721-54-5	1,93E+05
3-Ethylidenecycloheptene	000933-98-2	3,39E+05
4,7,10,13,16,19-Docosahexaenoic acid, methyl ester, (all-Z)-	004488-57-7	3,17E+06
4,7-Methano-1H-indene, 2,3,3a,4,7,7a-hexahydro-	000628-41-1	1,01E+05
4,7-Methano-1H-indene, 3a,4,7,7a-tetrahydro-	68284-23-1	2,33E+05
4,7-Methano-1H-indene, octahydro-	006004-38-2	1,62E+06
4,7-Methano-1H-indene, octahydro-2-methylene-	73992-48-0	1,32E+05
4,7-Methano-5H-inden-5-one, octahydro-	025134-21-8	1,46E+05
4,7-Methanoisobenzofuran-1,3-dione, 3a,4,7,7a-tetrahydromethyl-	13380-94-4	1,87E+05
4-Oxatetracyclo[6.2.1.0(2,7).0(3,5)]undec-9-ene (endo)-	000874-35-1	3,56E+05
7-Methoxymethyl-2,7-dimethylcyclohepta-1,3,5-triene	002958-76-1	3,61E+05
9H-Fluorene, 1-methyl-	2749-93-1	3,18E+06
9H-Fluorene-9-thiol	000119-64-2	2,12E+05
Acenaphthene	000612-17-9	5,17E+05
Acenaphthylene	006682-71-9	8,51E+04
Benzene, 1,1'-(1-methyl-1,3-propanediyl)bis-	000091-20-3	4,50E+06
Benzene, 1,2,3-trimethyl-	001483-60-9	5,46E+05
Benzene, 1,3-diethyl-	1504-75-2	1,97E+05
Benzene, 1-ethenyl-2-methyl-		4,83E+05
Benzene, 1-ethyl-2,3-dimethyl-	1000191-87-9	3,11E+05
Benzene, 1-ethyl-2-methyl-	004773-82-4	3,89E+05
Benzene, 1-methyl-4-(1-propynyl)-	000083-33-0	2,76E+05
Benzene, 2,4-dimethyl-1-(1-methylpropyl)-	000091-57-6	2,52E+06
Benzeneacetaldehyde, à-methyl-	003048-64-4	8,22E+04
Bicyclo[2.2.1]hept-2-ene, 5-ethenyl-	000090-12-0	2,19E+06
Bicyclo[2.2.1]heptane, 2-ethyl-	2566-90-7	5,77E+04
Bicyclo[2.2.2]oct-2-ene	14905-56-7	8,80E+04
Bicyclo[2.2.2]oct-5-en-2-one	001127-76-0	2,01E+05
Bicyclo[4.1.0]heptan-2-ol, 1-phenyl-, endo-	001127-76-0	1,03E+05

Nome	CAS	Área
Cyclobuta[1,2:3,4]dicyclopentene, 1,3a,3b,6,6a,6b-hexahydro-	000575-37-1	2,38E+05
Cyclotrisiloxane, hexamethyl-	000112-95-8	1,06E+05
Eicosane	000581-40-8	3,33E+05
Fluorene		1,49E+05
Fluorene-9-methanol	000569-41-5	1,04E+05
Indane	208-96-8	9,46E+04
Indene	000083-32-9	2,97E+05
Naphthalene	000112-95-8	6,60E+04
Naphthalene, 1,2,3,4-tetrahydro-		1,27E+05
Naphthalene, 1,2-dihydro-6-methyl-	829-26-5	6,44E+04
Naphthalene, 1,4,5-trimethyl-	19552-08-0	5,79E+04
Naphthalene, 1,7-dimethyl-	000086-73-7	3,13E+05
Naphthalene, 1,8-dimethyl-	000644-08-6	6,98E+04
Naphthalene, 1-ethyl-	001520-44-1	1,01E+05
Naphthalene, 1-methyl-	001140-08-5	6,44E+04
Naphthalene, 2,3,6-trimethyl-	012636-68-9	4,68E+04
Naphthalene, 2,3-dimethyl-	000612-09-9	5,79E+04
Naphthalene, 2-methyl-	000086-73-7	3,13E+05
Naphthalene, decahydro-2-methyl-	001730-37-6	3,79E+04
o-Xylene	000644-08-6	6,98E+04
Tetradecane, 2,6,10-trimethyl-	017151-09-6	1,99E+04
Tricyclo[5.2.1.0(2,6)]dec-3-ene, 4-ethyl-	024133-96-8	3,09E+04
Vanadium, (.eta.7-cycloheptatrienylium)(.eta.5-2,4-cyclopentadien-1-yl)-	001520-44-1	1,01E+05

Tabela A.41. Compostos detetados no replicado T1 após ensaio de respirometria (Nome, CAS e área)

Nome	CAS	Área
.alpha.,.beta.,.beta.-Trimethylstyrene	000769-57-3	5,74E+04
1,1'-Biphenyl, 2-methyl-	000643-58-3	8,58E+04
1,1'-Biphenyl, 3,4'-dimethyl-	7383-90-6	2,44E+04
1,2-Bis(trimethylsilyl)benzene	017151-09-6	3,34E+04
1,3-Cyclohexadien-5-ol, 1-phenyl-		1,69E+05
1,3-Cyclopentadiene	000542-92-7	1,56E+05
1,4-Dihydronaphthalene	000612-17-9	2,94E+05
1-Buten-3-yne, 2-methyl-	000078-80-8	3,73E+04
1-Hexen-3-yne	013721-54-5	7,99E+04
1H-Inden-1-one, 2,3-dihydro-	000083-33-0	1,53E+05
1H-Indene, 1,3-dimethyl-	002177-48-2	3,65E+05
1H-Indene, 2,3-dihydro-1,2-dimethyl-	017057-82-8	1,85E+05
1-Penten-3-yne, 2-methyl-	000926-55-6	7,73E+04
2-Cyclohexen-1-ol, 4-ethyl-1,4-dimethyl-	55162-55-5	2,73E+04
2-Methyl-5,5-diphenyl-4-(methylthio)imidazole	024133-96-8	4,13E+04
3a,4,5,6,7,7a-Hexahydro-4,7-methanoindene	004488-57-7	1,40E+06
3a,6-Methano-3aH-inden-5(4H)-one, hexahydro-	016489-26-2	8,84E+04
4,7,10,13,16,19-Docosahexaenoic acid, methyl ester, (all-Z)-	2566-90-7	1,44E+05
4,7-Methano-1H-indene, 2,3,3a,4,7,7a-hexahydro-2-methylene-	068284-25-3	6,09E+04
4,7-Methano-1H-indene, 3a,4,7,7a-tetrahydro-	000077-73-6	1,63E+05
4,7-Methano-1H-indene, octahydro-	006004-38-2	7,43E+05
4,7-Methano-1H-indene, octahydro-2-methylene-	068284-23-1	1,66E+05
4-Oxatetracyclo[6.2.1.0(2,7).0(3,5)]undec-9-ene (endo)-	1000191-87-9	2,46E+05
5-Allyl-2-norbornene	031663-53-3	3,46E+04
7-Methoxymethyl-2,7-dimethylcyclohepta-1,3,5-triene	73992-48-0	8,25E+04
9H-Fluorene, 1-methyl-	001730-37-6	4,80E+04
Acenaphthene	000083-32-9	3,53E+05
Acenaphthylene	208-96-8	1,25E+05
Benzene, (1-methylhexadecyl)-	55125-25-2	2,67E+04
Benzene, 1,1'-(1-methyl-1,3-propanediyl)bis-	001520-44-1	9,76E+04
Benzene, 1,2,3-trimethyl-	000526-73-8	3,54E+04
Benzene, 1,2,4,5-tetramethyl-	000095-93-2	3,95E+04
Benzene, 1,3-diethyl-	141-93-5	2,71E+04
Benzene, 1-ethenyl-2-methyl-	000611-15-4	9,82E+04
Benzene, 1-ethyl-2-methyl-	000611-14-3	7,00E+04
Benzene, 1-ethyl-3-methyl-	000620-14-4	5,00E+04
Benzene, 1-methyl-2-(2-propenyl)-	001587-04-8	2,11E+05
Benzene, 2,4-dimethyl-1-(1-methylpropyl)-	001483-60-9	3,39E+05
Benzene, 2-ethyl-1,4-dimethyl-	001758-88-9	5,81E+04
Benzene, 4-ethyl-1,2-dimethyl-	000934-80-5	1,33E+05
Benzene, 1-methyl-1,2-propadienyl-	022433-39-2	5,55E+05
Benzeneacetaldehyde, à-methyl-	93-53-8	3,20E+04
Bicyclo[3.2.1]octa-2,6-diene, 2-phenyl-	101166-08-9	4,00E+04
Bicyclo[4.1.0]heptan-2-ol, 1-phenyl-, endo-		1,35E+05
Cyclobuta[1,2:3,4]dicyclopentene, 1,3a,3b,6,6a,6b-hexahydro-	000612-09-9	5,28E+04
Cyclotrisiloxane, hexamethyl-	000541-05-9	4,31E+04
Dicyclopropa[cd,gh]pentalene, octahydro-1-(2-methyl-2-propenylidene)-	062025-04-1	4,68E+04

Nome	CAS	Area
Eicosane	000112-95-8	1,15E+05
Fluorene	000086-73-7	4,23E+05
Indane	000496-11-7	1,97E+05
Indene	000095-13-6	8,61E+04
Naphthalene	000091-20-3	1,31E+06
Naphthalene, 1,2,3,4-tetrahydro-	000119-64-2	1,30E+05
Naphthalene, 1,2-dihydro-6-methyl-	002717-47-7	1,64E+05
Naphthalene, 1,6,7-trimethyl-	002245-38-7	3,61E+04
Naphthalene, 1,6-dimethyl-	000575-43-9	1,50E+05
Naphthalene, 1,8-dimethyl-	000569-41-5	1,43E+05
Naphthalene, 1-ethyl-	001127-76-0	1,98E+05
Naphthalene, 1-methyl-	000090-12-0	2,04E+06
Naphthalene, 2,3,6-trimethyl-	829-26-5	8,74E+04
Naphthalene, 2,3-dimethyl-	000581-40-8	3,73E+05
Naphthalene, 2,7-dimethyl-	000582-16-1	2,51E+05
Naphthalene, 2-methyl-	000091-57-6	1,78E+06
Tetradecane, 2,6,10-trimethyl-	14905-56-7	9,23E+04
Tricyclo[5.2.1.0(2,6)]dec-3-ene, 4-ethyl-		3,58E+05
Tricyclo[5.2.1.0(2,6)]dec-4-ene, 4-methyl-	1000150-03-0	1,26E+06

Tabela A.42. Compostos detetados no replicado T2 após ensaio de respirometria (Nome, CAS e área)

Nome	CAS	Área
1,1'-Biphenyl, 2-methyl-	000643-58-3	7,81E+04
1,1'-Biphenyl, 3,4'-dimethyl-	7383-90-6	3,59E+04
1,1'-Biphenyl, 4-methyl-	000644-08-6	3,48E+04
1,2-Bis(trimethylsilyl)benzene	017151-09-6	2,79E+04
1,3-Cyclohexadien-5-ol, 1-phenyl-		1,49E+05
1,3-Cyclopentadiene	000542-92-7	1,10E+05
1-Hexen-3-yne	013721-54-5	5,68E+04
1H-Inden-1-one, 2,3-dihydro-	000083-33-0	1,04E+05
1H-Indene, 2,3-dihydro-1,2-dimethyl-	017057-82-8	1,94E+05
1H-Indene, 2,3-dihydro-1,6-dimethyl-	017059-48-2	5,98E+04
1-Penten-3-yne, 2-methyl-	000926-55-6	7,35E+04
2-Cyclohexen-1-ol, 4-ethyl-1,4-dimethyl-	55162-55-5	2,32E+04
2-Methyl-5,5-diphenyl-4-(methylthio)imidazole	024133-96-8	4,22E+04
2-Propenal, 3-(4-methylphenyl)-	1504-75-2	1,28E+05
3a,4,5,6,7,7a-Hexahydro-4,7-methanoindene	004488-57-7	1,25E+06
3a,6-Methano-3aH-inden-5(4H)-one, hexahydro-	016489-26-2	8,41E+04
3-Phenylbut-1-ene	000934-10-1	2,41E+05
4,7,10,13,16,19-Docosahexaenoic acid, methyl ester, (all-Z)-	2566-90-7	1,18E+05
4,7-Methano-1H-indene, 2,3,3a,4,7,7a-hexahydro-2-methylene-	068284-25-3	5,71E+04
4,7-Methano-1H-indene, 3a,4,7,7a-tetrahydro-	000077-73-6	1,44E+05
4,7-Methano-1H-indene, octahydro-	006004-38-2	6,94E+05
4,7-Methano-1H-indene, octahydro-2-methylene-	068284-23-1	1,54E+05
4-Oxatetracyclo[6.2.1.0(2,7).0(3,5)]undec-9-ene (endo)-	1000191-87-9	2,49E+05
5-Allyl-2-norbornene	031663-53-3	2,79E+04
7-Methoxymethyl-2,7-dimethylcyclohepta-1,3,5-triene	73992-48-0	7,51E+04
9H-Fluorene, 1-methyl-	001730-37-6	5,06E+04
Acenaphthene	000083-32-9	3,39E+05
Acenaphthylene	208-96-8	1,18E+05
Benzene, (1-methylhexadecyl)-	55125-25-2	3,35E+04
Benzene, 1,1'-(1-methyl-1,3-propanediyl)bis-	001520-44-1	1,06E+05
Benzene, 1,2,3-trimethyl-	000526-73-8	3,52E+04
Benzene, 1,3-diethyl-	141-93-5	2,23E+04
Benzene, 1-ethenyl-2-methyl-	000611-15-4	1,24E+05
Benzene, 1-ethenyl-3-methyl-	000100-80-1	5,88E+04
Benzene, 1-ethyl-2-methyl-	000611-14-3	5,56E+04
Benzene, 1-methyl-2-(1-methylethyl)-	000527-84-4	1,22E+05
Benzene, 2,4-dimethyl-1-(1-methylpropyl)-	001483-60-9	3,39E+05
Benzene, 2-ethenyl-1,4-dimethyl-	002039-89-6	1,66E+05
Benzene, 4-ethyl-1,2-dimethyl-	000934-80-5	5,02E+04
Benzeneacetaldehyde, à-methyl-	93-53-8	3,12E+04
Bicyclo[2.2.1]hept-2-ene, 5-ethenyl-	003048-64-4	1,52E+04
Bicyclo[4.1.0]heptan-2-ol, 1-phenyl-, endo-		1,81E+05
Cyclobuta[1,2:3,4]dicyclopentene, 1,3a,3b,6,6a,6b-hexahydro-	000612-09-9	5,52E+04
Cycloprop[a]indene, 1,1a,6,6a-tetrahydro-	015677-15-3	1,54E+05
Cyclotrisiloxane, hexamethyl-	000541-05-9	4,15E+04
Dicyclopropa[cd,gh]pentalene, octahydro-1-(2-methyl-2-propenylidene)-	062025-04-1	1,44E+04

Nome	CAS	Area
Eicosane	000112-95-8	1,02E+05
Fluorene	000086-73-7	3,84E+05
Indene	000095-13-6	3,07E+04
Naphthalene	000091-20-3	3,52E+05
Naphthalene, 1,2,3,4-tetrahydro-	000119-64-2	1,16E+05
Naphthalene, 1,2-dihydro-3-methyl-	002717-44-4	3,57E+05
Naphthalene, 1,2-dihydro-6-methyl-	002717-47-7	1,40E+05
Naphthalene, 1,4,6-trimethyl-	002131-42-2	3,83E+04
Naphthalene, 1,4-dimethyl-	000571-58-4	1,32E+05
Naphthalene, 1,6-dimethyl-	000575-43-9	1,55E+05
Naphthalene, 1,8-dimethyl-	000569-41-5	2,27E+04
Naphthalene, 1-ethyl-	001127-76-0	1,28E+05
Naphthalene, 2,3,6-trimethyl-	829-26-5	8,47E+04
Naphthalene, 2,3-dimethyl-	000581-40-8	3,63E+05
Naphthalene, 2,6-dimethyl-	000581-42-0	2,43E+05
Naphthalene, 2,7-dimethyl-	582-16-1	1,15E+05
Naphthalene, 2-methyl-	000091-57-6	1,76E+06
Tetradecane, 2,6,10-trimethyl-	14905-56-7	7,85E+04
Tricyclo[5.2.1.0(2,6)]dec-3-ene, 4-ethyl-		3,57E+05
Tricyclo[5.2.1.0(2,6)]dec-4-ene, 4-methyl-	1000150-03-0	1,22E+06