

Boletim de Determinação do Coeficiente de Partição N - Octanol/Água (Log Kow)	Código: L 490/14 BOW	Revisão: 01
	Data de emissão: 24/03/2016	Página: 1/4

Solicitante: NEWPARK DRILLING FLUIDS DO BRASIL

Endereço: Rua S 5 (José Candido Marcilio), n° 323

Vale Encantado, Macaé – RJ, CEP: 27.933-400

Técnico solicitante: Laerte Gomes Neto

e-mail: lneto@newpark.com

Identificação da amostra: CYBERBASE LE – LOTE: 008/14

Data de coleta ou preparo: 11/03/2014

Código da amostra no Labtox: 490/14

Data de entrada no Labtox: 12/03/2014

Avaliação solicitada: Determinação do Coeficiente de partição nas fases octanol/água (log Kow)

Composição da amostra por categoria de hidrocarbonetos alifáticos:

COMPOSTOS	TEOR (%)
Hidrocarbonetos ramificados, cíclicos e olefínicos (C ₁₁)	1,6
n- Undecano (C ₁₁ H ₂₄)	1,7*
Hidrocarbonetos ramificados, cíclicos e olefínicos (C ₁₂)	8,5
n- Dodecano (C ₁₂ H ₂₆)	5,6*
Hidrocarbonetos ramificados, cíclicos e olefínicos (C ₁₃)	8,4
n- Tridecano (C ₁₃ H ₂₈)	5,6*
Hidrocarbonetos ramificados, cíclicos e olefínicos (C ₁₄)	3,2
n- Tetradecano (C ₁₄ H ₃₀)	43,1*
Hidrocarbonetos ramificados, cíclicos e olefínicos (C ₁₅)	0,29
n- Pentadecano (C ₁₅ H ₃₂)	17,6*
Hidrocarbonetos ramificados, cíclicos e olefínicos (C ₁₆)	<0,01
n- Hexadecano (C ₁₆ H ₃₄)	3,5*
Hidrocarbonetos ramificados, cíclicos e olefínicos (C ₁₇)	<0,01
n- Heptadecano (C ₁₇ H ₃₆)	0,66*

Boletim de Determinação do Coeficiente de Partição N - Octanol/Água (Log Kow)	Código: L 490/14 BOW	Revisão: 01
	Data de emissão: 24/03/2016	Página: 2/4

Hidrocarbonetos ramificados, cíclicos e olefínicos (C ₁₈)	<0,01
n- Octadecano (C ₁₈ H ₃₈)	0,13*
Hidrocarbonetos ramificados, cíclicos e olefínicos (C ₁₉)	<0,01
n- Nonadecano (C ₁₉ H ₄₀)	0,03*
% Total de Hidrocarbonetos	99,9

Obs: Análise fornecida pelo solicitante. *Teores utilizados no cálculo de log Kow.

OBJETIVO

Este relatório apresenta o valor do coeficiente de partição nas fases octanol/água do produto (expresso como log Kow), estimado com o auxílio do programa ALOGPS 2.1.

O coeficiente de partição de uma substância química nas fases octanol / água (Kow) é um importante parâmetro em estudos de efeitos desta substância nos ambientes aquáticos, devido à alta correlação apresentada entre este e a bioacumulação em peixes (OECD 117).

O cálculo do log Kow pode ser uma alternativa à determinação experimental, quando esta não é possível, em função das características da amostra. O programa calcula os valores de log Kow com base na soma das contribuições dos fragmentos que compõem o composto, a partir da fórmula estrutural da molécula, conforme o anexo da norma OECD 117.

RESULTADOS

A tabela I apresenta o percentual dos compostos lineares presentes na amostra, os seus respectivos valores de log Kow e o valor de log Kow da amostra calculado a partir destes.

Para o cálculo foi considerado apenas o percentual dos compostos lineares. Os componentes cíclicos possuem coeficientes muito próximos aos seus isômeros lineares e representam apenas 22% da composição da amostra.

Boletim de Determinação do Coeficiente de Partição N - Octanol/Água (Log Kow)	Código: L 490/14 BOW	Revisão: 01
	Data de emissão: 24/03/2016	Página: 3/4

Tabela I: Percentual dos compostos lineares presentes na amostra, seus respectivos valores de log Kow, estimados com auxílio do programa ALOGPS 2.1, e o valor de log Kow da amostra, calculado a partir destes.

Hidrocarboneto	LogKow	Kow	%	Peso Kow
C11	5,60	398107,17	0,017000	6767,82
C12	6,10	1258925,41	0,056000	70499,82
C13	6,52	3311311,21	0,056000	185433,43
C14	7,06	11481536,21	0,431000	4948542,11
C15	7,51	32359365,69	0,176000	5695248,36
C16	7,94	87096359,00	0,035000	3048372,56
C17	8,35	223872113,86	0,006600	1477555,95
C18	8,73	537031796,37	0,001300	698141,34
C19	9,11	1288249551,69	0,000300	386474,87
Total			78%	16517036,26
			log Kow	7,218

Obs: Foi considerado apenas o percentual dos compostos lineares.

Os valores estimados para os hidrocarbonetos presentes na amostra variaram de 5,60 a 9,11 com predominância de valores maiores que 6. Como o método OECD 107 se aplica a valores de log Kow entre -2 a 4, e o método OECD 117 se aplica a valores de log Kow de 0 a 6, o cálculo experimental utilizando as duas metodologias, provavelmente não seria possível.

O valor de log Kow da amostra, calculado a partir dos valores de log Kow dos hidrocarbonetos presentes na amostra, foi de 7,218.

HISTÓRICO DE REVISÕES

Nº da revisão	Responsável	Data	Alterações realizadas
01	Maria Cristina Maurat	24/03/2016	- Foi acrescentado o número do Lote na identificação da amostra.

Boletim de Determinação do Coeficiente de Partição N - Octanol/Água (Log Kow)	Código: L 490/14 BOW	Revisão: 01
	Data de emissão: 24/03/2016	Página: 4/4

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

ALOGPS 2.1. www.vcclab.org/lab/alogps/start.html

OECD 107. 2006. GUIDELINE FOR THE TESTING OF CHEMICALS. Partition Coefficient (n-octanol/water): Shake Flask Method.

OECD 117. 2006. GUIDELINE FOR THE TESTING OF CHEMICALS. Partition Coefficient (n-octanol/water), High Performance Liquid Chromatography (HPLC) Method.

OBSERVAÇÕES

- 1) O Labtox não é o responsável pela amostragem. A(s) amostra(s) foi (ram) coletada(s) e enviada(s) pelo solicitante.
- 2) Os dados apresentados neste boletim são confidenciais e referem-se unicamente aos resultados obtidos no(s) ensaio(s) com a(s) amostra(s) acima citada(s). Os dados brutos encontram-se à disposição da Empresa solicitante no Labtox.
- 3) Este boletim só pode ser reproduzido por completo. A reprodução de partes deste, só pode ser realizada com autorização escrita do Labtox.

Signatário autorizado:

MSc Leila A. Silva Kraus
CRBio-2 - 12156/02
Diretora

Leila Aparecida da Silva Kraus