



Av. Carlos Chagas Filho, 791  
Pólo Bio-Rio // Laboratório 4  
Cidade Universitária // Ilha do Fundão  
CEP 21941-904 // Rio de Janeiro // RJ  
55 (21) 3867 5651 // 55 (21) 3525 2466  
Email: labtox@labtox.com.br  
http://www.labtox.com.br

<b>Boletim de Determinação do Coeficiente de Partição N - Octanol/Água (Log Kow)</b>	<b>Código:</b> L 372/16 BOW	<b>Revisão:</b> 00
	<b>Data de emissão:</b> 30/03/2016	<b>Página:</b> 1/3

Empresa solicitante: GRUPO MARES  
Endereço: Rua Barão do Triunfo, 550 – 10º andar – São Paulo – SP  
CEP: 04.602-002  
Tel: (11) 3016-1598 / (21) 9634-8369

A/C: André Verdant  
e-mail: [averdant@grupomares.com.br](mailto:averdant@grupomares.com.br)

Identificação da amostra: 003 – 140002901-018

Código da amostra no Labtox: 372/16

Data de entrada no Labtox: 30/03/2016

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

Composição da amostra:

Hidrocarbonetos	Teor (%)
C16+	64,73
C18	35,45

Obs: Informações fornecidas pelo cliente (Laudo em anexo).

## 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 EPI SUITE v4.11.

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.

<b>Boletim de Determinação do Coeficiente de Partição N - Octanol/Água (Log Kow)</b>	<b>Código:</b> L 372/16 BOW	<b>Revisão:</b> 00
	<b>Data de emissão:</b> 30/03/2016	<b>Página:</b> 2/3

## RESULTADOS

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

Tabela I: Percentual dos principais componentes da amostra, seus respectivos valores de log Kow, estimados com auxílio do programa EPI SUITE v4.11, e o valor de log Kow da amostra, calculado a partir destes.

Componentes	Log Kow	Kow	%	Peso Kow
C16+	8,20	158489319,2461	0,6473	102590136,35
C18	9,18	1513561248,4362	0,3545	536557462,57
		Total	100,2%	639147598,9186
			Log Kow	8,806

O valor de log Kow estimado para a amostra foi de 8,806. 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.

Segundo GESAMP (2002), substâncias que apresentam valores de log Kow maiores que 7,0, não apresentam potencial para bioacumulação.

## CÁLCULO DE LOG KOW

### C16

SMILES : CCCCCCCCCCCCCCCC

MOL FOR: C16 H34

MOL WT : 226.45

----- EPI SUMMARY (v4.10) -----

Log Octanol-Water Partition Coef (SRC):

Log Kow (KOWWIN v1.68 estimate) = 8.20

### C18

SMILES : CCCCCCCCCCCCCCCC

MOL FOR: C18 H38

MOL WT : 254.50

----- EPI SUMMARY (v4.10) -----

Log Octanol-Water Partition Coef (SRC):

Log Kow (KOWWIN v1.68 estimate) = 9.18

<b>Boletim de Determinação do Coeficiente de Partição N - Octanol/Água (Log Kow)</b>	<b>Código:</b> L 372/16 BOW	<b>Revisão:</b> 00
	<b>Data de emissão:</b> 30/03/2016	<b>Página:</b> 3/3

## HISTÓRICO DE REVISÕES

Nº da revisão	Responsável	Data	Alterações realizadas
-	-	-	-

## REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

EPI SUITE – Estimation Program Interface v4.11. [www.epa.gov/tsca-screening-tools/download-epi-suite](http://www.epa.gov/tsca-screening-tools/download-epi-suite)

GESAMP – (IMO/FAO/UNESCO-IOC/WHO/IAEA/UN/UNEP) Joint Group of Experts on the Scientific Aspects of Marine Environmental Protection. 2002. The Revised GESAMP Hazard Evaluation Procedure for Chemical Substances Carried by Ships. International Maritime Organization, Reports and Studies No. 64. London, 2002.

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*