



# **Ecotoxicidade do plástico em ambiente marinho – contributos para um modelo de impacte ambiental**

Mestrado em Engenharia da Energia e do Ambiente

Iasmin Ferreira da Cruz Godinho

Leiria, dezembro de 2020



# **Ecotoxicidade do plástico em ambiente marinho – contributos para um modelo de impacte ambiental**

Mestrado em Engenharia da Energia e do Ambiente

Iasmin Ferreira da Cruz Godinho

Dissertação realizada sob a orientação do Professor Doutor Nelson Simões Oliveira.

Leiria, dezembro de 2020

# **Originalidade e Direitos de Autor**

A presente dissertação é original, elaborada unicamente para este fim, tendo sido devidamente citados todos os autores cujos estudos e publicações contribuíram para a elaborar.

Reproduções parciais deste documento serão autorizadas na condição de que seja mencionada a Autora e feita referência ao ciclo de estudos no âmbito do qual a mesma foi realizada, a saber, Curso de Mestrado em Engenharia da Energia e do Ambiente, no ano letivo 2019/2020, da Escola Superior de Tecnologia e Gestão do Politécnico de Leiria, Portugal, e, bem assim, à data das provas públicas que visaram a avaliação destes trabalhos.

# Agradecimentos

Agradeço ao Politécnico de Leiria pela oportunidade de obtenção do grau de Mestre.

Ao meu orientador Prof. Doutor Nelson Simões Oliveira por disponibilizar todo seu conhecimento, tempo e orientação.

Agradeço, principalmente, aos meus pais, Jorge Godinho e Silvana Godinho, por todo esforço para que eu tivesse as melhores oportunidades e condições de ir a Portugal cursar o mestrado e concluir esta etapa de minha formação pessoal e profissional.

À minha irmã, Natália Godinho, por todo apoio oferecido durante minha vida.

Ao meu melhor amigo e companheiro, Gustavo Mendes, que dividiu comigo angústias e alegrias e me deu o equilíbrio para que não desistisse dessa etapa de crescimento.

A todos os meus familiares que participaram de minha formação pessoal até aqui.

Aos meus avós Jordelina Ferreira, Elza Godinho, Sebastião Godinho e Nelson Lourenço que estão em meu coração em cada passo de minha caminhada.

A todos os amigos que sempre estiveram comigo, pelos bons momentos vividos e por partilharem do meu desenvolvimento.

Aos amigos Marcela Ribeiro e Lúcio, por todo apoio durante o Mestrado, sendo os companheiros de estudos e parceiros de bons momentos.

A todos os professores do Mestrado, sendo peças fundamentais para meu crescimento acadêmico.

Aos Técnicos Dra. Maria Carlos Rodrigues e Eng. André Fonseca que me acolheram no laboratório, dividindo experiências enriquecedoras.

Aos membros da Banca Examinadora, pela disponibilidade de compartilhar seus conhecimentos.

Finalizo agradecendo a Deus, pois sem Ele e sua força não estaria vivendo esse momento tão importante.

# Resumo

A poluição provocada pelo plástico é um desafio social e ambiental com consequências ainda incompreendidas e imensuráveis. Entende-se que o uso do plástico está concentrado em externalidades relacionadas a três áreas: degradação de sistemas naturais como resultado de vazamentos, especialmente no oceano; emissões de gases de efeito estufa; e impactos na saúde e no meio ambiente. Relativamente à poluição do ambiente marinho, verifica-se que as concentrações de produtos químicos em detritos plásticos afetam a saúde da vida aquática e são pouco compreendidos devido à complexidade do fenômeno dos microplásticos. Assim, optou-se pela Avaliação do Ciclo de Vida (ACV): ferramenta com metodologia norteada por 4 fases e utilizada para analisar quantitativamente o ciclo de vida de um produto ou serviço. Considerando que o resultado de uma ACV está associado ao método científico norteador da fase de Avaliação dos Impactes de Ciclo de Vida (AICV), esta dissertação tem como objetivo contribuir para o desenvolvimento de uma metodologia de AICV do plástico, corroborar com o entendimento do efeito do plástico no mar, contribuir tecnicamente para a inclusão deste impacto ambiental na metodologia ACV e comparar diante da metodologia proposta dois tipos de materiais plásticos: Polietileno (PE) e Polidimetilsiloxano (PMDS). A avaliação consistiu na aplicação do método USEtox 2.0 versão 1.1, reformulado para avaliação da ecotoxicidade causada pelo material plástico. Os resultados apontaram que a Fração Potencialmente Afetada de espécies integrada ao longo do tempo e volume por unidade de massa de PE emitido é 15% superior que a Fração de PMDS. Além disso, demonstram a resistência do método para alterações importantes relativas aos dados das substâncias. Por fim, confirma-se as conclusões evidenciadas por outros autores de que existe uma lacuna quanto a existência de modelos científicos que quantifiquem os impactos associados a descarte inadequado de resíduos plásticos destinados ao mar.

**Palavras-chave:** plástico, avaliação de impactos, ciclo de vida, toxicidade, ambiente marinho, modelo de avaliação.

# Abstract

The pollution provoked by plastic materials is a social and environmental challenge whose consequences are yet to be understood and measured. It is known that the use of plastic is concentrated in externalities related to 3 areas: the degradation of environmental systems as a result of spills, especially in the sea; emission of greenhouse gases; and effects on the health e in the environment. Regarding the pollution of the marine environment, one can notice that the concentration of chemicals in plastic debris affects the general health of the aquatic ecosystem and are not well understood due to the complexity of the microplastic phenomenon. Therefore, chosed the Life Cycle Assessment (LCA): a tool whose methodology is guided by 4 phases and is used to analyse quantitatively the life cycle of a product or service. Knowing that the result of a LCA is related to the scientific method employed on the phase of Life Cycle Impact Assessment (LCIA), this dissertation aims to contribute to the development of a methodology of LCIA of plastic, to corroborate the understanding of the effect of plastic in the sea, to contribute technically to the inclusion of such environmental impact within the LCA methodology and to compare, on the terms of the proposed methodology, two types of plastic material: Polyethylene (PE) and Polydimethylsiloxane (PMDS). The evaluation consisted on the application of the method USEtox 2.0 version 1.1., redesigned for the evaluation of the ecotoxicity caused by plastic materials. The results showed that Potentially Affected Fraction of species integrated throughout the time and the volume by unity of mass of PE emitted in 15% superior to the fraction of PMDS. Furthermore, they showed the resistance of the method to the relevant alterations relative to the substances data. Finally, confirms the conclusions reached by other authors who affirms the existence of a gap when it comes to the existence of scientific models that quantify the impacts related to the inadequate disposal of plastic waste destined for the sea.

**Keywords:** plastic, impact assessment, life cycle, toxicity, marine environment, assessment models.

# Índice

<b>Originalidade e Direitos de Autor</b> .....	<b>iii</b>
<b>Agradecimentos</b> .....	<b>iv</b>
<b>Lista de Figuras</b> .....	<b>viii</b>
<b>Lista de Tabelas</b> .....	<b>ix</b>
<b>Lista de siglas e acrónimos</b> .....	<b>x</b>
<b>1. Introdução</b> .....	<b>1</b>
<b>2. Revisão Bibliográfica</b> .....	<b>5</b>
<b>2.1. Plástico</b> .....	<b>5</b>
2.1.1. Plástico no oceano .....	9
2.1.2. Resíduos plásticos marinhos e produtos químicos .....	12
<b>2.2. Avaliação do Ciclo de Vida</b> .....	<b>13</b>
<b>3. Métodos de Avaliação de Impacte de Ciclo de Vida</b> .....	<b>16</b>
<b>3.1. Fatores do modelo</b> .....	<b>19</b>
<b>3.2. Principais parâmetros do modelo</b> .....	<b>21</b>
3.2.1. Coeficientes de partição .....	21
3.2.2. EC <sub>50</sub> e HC <sub>50</sub> .....	23
3.2.3. Fatores de Bioacumulação e de Bioconcentração .....	24
3.2.4. Taxas de degradação.....	25
<b>4. O modelo no contexto dos plásticos</b> .....	<b>27</b>
<b>4.1. Fator de Exposição (XF)</b> .....	<b>27</b>
<b>4.2. Fator de Efeito</b> .....	<b>31</b>
<b>4.3. Fator de Destino</b> .....	<b>31</b>
<b>4.4. Resultados e discussões</b> .....	<b>32</b>
<b>5. Conclusões</b> .....	<b>36</b>
<b>Referências Bibliográficas</b> .....	<b>38</b>
<b>Apêndices</b> .....	<b>46</b>
<b>Apêndice A – Dados da substância</b> .....	<b>47</b>
<b>Apêndice B – Dados para Fator de Destino</b> .....	<b>50</b>

# Lista de Figuras

Figura 1: Fontes de matéria prima do plástico. Fonte: Adaptado de ABIPLAST (2018).....	8
Figura 2: Input anual de plástico no oceano a partir de 4 fontes. Fonte: Adaptado de Lachmann (2016).....	9
Figura 3: Fontes e caminhos do macroplástico baseadas em atividades terrestres. Fonte: Adaptado de (UNEP, 2016).....	10
Figura 4: Origens terrestres e aquáticas da geração dos microplásticos. Fonte: Adaptado de Galafassi, Nizzetto, & Volta (2019).....	11
Figura 5: Principais aditivos utilizados na fabricação do plástico e suas funções. Fonte: Piatti & Rodrigues (2005).....	12
Figura 6: Caracterização geral da ACV de um produto. Fonte: Karaski, Ribeiro, Pereira, & Arteaga (2016).	14
Figura 7: Escalas e compartimentos considerados pelo modelo USEtox. Fonte: Fantke et al. (2017).....	18
Figura 8: Fatores que afetam as interações entre microplásticos e compostos orgânicos. Fonte: Adaptado de Mei et al. (2020).....	28

# Lista de Tabelas

Tabela 1: Modelos de avaliação de aspetos ambientais de um produto.....	3
Tabela 2: Materiais plásticos convencionais, características e aplicações.....	5
Tabela 3: Comparação dos principais métodos de avaliação em abordagem <i>midpoint</i> .....	17
Tabela 4: Parâmetros obrigatórios para substâncias orgânicas.....	20
Tabela 5: Classificação de testes de toxicidade de acordo com a duração e tipo de organismo.....	23
Tabela 6: Relação entre o output do Biowin3 e o default das constantes de biodegradação.....	26
Tabela 7: Coeficiente de Partição polímero-água marinha de substâncias orgânicas hidrofóbicas.....	29
Tabela 8: Coeficiente de Partição polímero-água marinha de substâncias orgânicas hidrofóbicas para 4 tipos de polímeros.....	30
Tabela 9: Dados de Toxicidade para PE e PMDS.....	31
Tabela 10: Resultados dos processos de degradação e balanço de massas PMDS e PE.....	32
Tabela 11: Resultado da Ecotoxicidade para PE e PMDS.....	32
Tabela 12: Dados da substância.....	33
Tabela A1: Informação auxiliar para determinação do KOC.....	47
Tabela A2: Dados auxiliares.....	47
Tabela A3: Cálculos auxiliares.....	48
Tabela A4: Fator de Bioconcentração – cálculos auxiliares e parâmetros <i>default</i> .....	49
Tabela A5: Escala Continental.....	50
Tabela A6: Escala Global.....	50
Tabela A7: Escala Urbana.....	51
Tabela A8: População Humana.....	51
Tabela A9: Exposição.....	51
Tabela A10: Descrição.....	51
Tabela A11: Resultados das variáveis da Matriz K utilizados no cálculo do Fator de Destino para os polímeros PMDS e PE.....	52

# Lista de siglas e acrónimos

ACV	Avaliação do Ciclo de Vida
ABS	Copolímero de Acrilonitrila-Butadieno-Estireno
AICV	Avaliação de Impacte do Ciclo de Vida
BAF	Bioacumulação
BCF	Bioconcentração
BPA	Bisfenol A
CBs	Clorobenzenos
CF	Fator de Caracterização
CTU	Unidades Tóxicas Comparativas
EF	Fator de efeito
EPS	Poliestireno Expandido
ESTG	Escola Superior de Tecnologia e Gestão
FF	Fator de Destino
HCHs	Hexaclorociclohexanos
ILCD	<i>International Reference Life Cycle Data</i>
IS	Índice de impacte
PAF	Fração Potencialmente Afetada
PAHs	Hidrocarboneto Aromáticos Policíclicos
PBDE	Éteres Difenílicos Polibromados
PCBs	Bifenilos Policlorado
PCCPs	Produtos cosméticos de cuidados pessoais
PE	Polietileno

PEAD	Polietileno de alta densidade
PEBD	Polietileno de baixa densidade
PEBDL	Polietileno de baixa densidade linear
PET	Polietileno Tereftalato
PMDS	Polidimetilsiloxano
PP Copo	Polipropileno Copolímero
PP Homo	Polipropileno Homopolímero
PS	Poliestireno
PVC	Policloreto de Vinilo
UNEP	<i>United Nations Environment Programme</i>
XF	Fator de exposição

# 1. Introdução

A poluição provocada pelo plástico é um desafio social e ambiental com consequências ainda incompreendidas e imensuráveis. Conforme evidenciam Villarrubia-Gómez, Cornell, & Fabres (2018), as escolhas de consumo das pessoas e suas prioridades determinarão se essa poluição ultrapassará algum limite do sistema Terra ou se será interrompida e mitigada. Assim, a iminência da alteração dos padrões socioeconómicos e ambientais propiciou o aumento na discussão acerca da circularidade do plástico, pois a sua funcionalidade no mundo moderno é uma realidade.

O plástico, material composto, principalmente, por substâncias obtidas a partir do petróleo (Piatti & Rodrigues, 2005), possui características que permitem uma variedade de formas e diferentes aplicações (Association of Plastics Manufacturers, 2019) na produção desde embalagens plásticas até peças automotivas (Venkatachalam, Spierling, Endres, & Siebert-Raths, 2018). Tornando utópico imaginar uma vida sem o plástico.

No intuito de substituir o plástico convencional, novas alternativas vêm sendo aplicadas, a utilização de compostos biodegradáveis, por exemplo. Porém, ainda não são claros os efeitos que esses compostos podem trazer ao meio ambiente. Segundo identificou Gironi & Piemonte (2011) o plástico produzido a partir de compostos biodegradáveis apresenta maiores índices de impacte relacionados à acidificação e eutrofização, comparativamente ao plástico convencional. Ou seja, é evidente a dificuldade de substituir o plástico comum, tendo em conta os potenciais impactes ambientais que estes substitutos também podem ocasionar.

Contudo, é preciso entender de que maneira é possível tornar o ciclo de vida do plástico mais sustentável. É evidente que inicialmente, na fase da produção, são envolvidos aspetos e impactes ambientais, já que depende da extração de matérias primas finitas, do consumo de energia e gera emissões de gases de efeito estufa. Apesar disso, já em 2011, estimava-se que a produção de plástico derivado do petróleo era de 200 milhões de toneladas (US) por ano, com tendência de crescimento (Gironi & Piemonte, 2011). Assim, a cultura de consumir

desenfreadamente e descartar os produtos de modo irresponsável incentiva o ciclo produtivo do plástico, que não é sustentável.

Além dos entraves associados ao consumo excessivo e à fabricação, identifica-se o gerenciamento ineficiente do resíduo plástico como um entrave vivenciado em cidades do mundo todo. Diante disto, observam-se severas consequências ligadas ao descarte inadequado desse resíduo. Um exemplo bastante discutido é a poluição do ambiente marinho provocada pelo plástico, uma vez que o resíduo mal administrado pode eventualmente entrar no oceano por vias navegáveis, escoamento de águas residuais e transporte pelo vento ou marés (Jambeck et al., 2015). Desta forma, um problema local torna-se um impacte global irreversível, já que é inviável a remoção por completo dos detritos plásticos no ambiente marinho (Villarrubia-Gómez et al., 2018), tendo em conta a estimativa de que há mais de 5 trilhões (US) de peças plásticas flutuando no mar (Eriksen et al., 2014).

O uso do plástico, portanto, está concentrado em externalidades relacionadas a três áreas: degradação de sistemas naturais como resultado de vazamentos, especialmente no oceano; emissões de gases de efeito estufa resultantes da produção e incineração pós-uso; e impactes na saúde e no meio ambiente proveniente de substâncias potencialmente tóxicas (Ellen MacArthur Foundation, 2016).

Esta situação é ainda mais agravada quando se verifica uma lacuna na legislação quanto a deposição de resíduos plásticos no oceano (Vince & Hardesty, 2017). Ou seja, a penalização do direcionamento desses resíduos ao mar não é regulamentada mundialmente, tornando-se difícil controlar este descarte inadequado. Outro fator crítico está relacionado à carência de informação relativa ao real impacte destes detritos para o ecossistema marinho (Villarrubia-Gómez et al., 2018), já que até o momento, as pesquisas se concentraram no relato de encontros entre organismos individuais e detritos plásticos (Woods, Veltman, Huijbregts, Verones, & Hertwich, 2016).

Neste contexto, entende-se que as concentrações de produtos químicos em detritos plásticos afetam a saúde da vida aquática e são pouco compreendidos (Teuten et al., 2009; Wagner & Lambert, 2018) devido à complexidade do fenômeno dos microplásticos. Por isso, compreender como o plástico e suas variações interagem com contaminantes, por exemplo, é essencial para avaliar o impacte causado ao meio ambiente (Hüffer, Weniger, & Hofmann, 2018), possibilitando uma tomada de decisão que favorece a preservação da vida aquática.

Diante disto, é preciso determinar o estado atual dos processos, assim como avaliar os aspetos e impactes ambientais envolvidos na produção do plástico e no seu descarte para que se possa ter referência na adaptação e no acompanhamento das melhorias (Saidani, Yannou, Leroy, Cluzel, & Kendall, 2019). Para isso, existem várias ferramentas que permitem a avaliação aprofundada de um produto, tais como os exemplos apresentados pela Tabela 1.

**Tabela 1: Modelos de avaliação de aspetos ambientais de um produto.**

Técnicas Qualitativas	Técnicas quantitativas
<i>Cheklists</i>	Indicadores Ambientais
Ferramenta <i>The Ten Golden Rules</i>	Avaliação do Ciclo de Vida (ACV)
Matriz MET	Ferramentas Pré ACV
-	Desenvolvimento integrado de processo e produto
-	Fases do ciclo de vida

Fonte: Adaptado de Bovea & Pérez-Belis (2012).

Dentre as metodologias destacadas pela Tabela 1, a Avaliação do Ciclo de Vida (ACV) é a mais utilizada devido às suas características. Possui a particularidade de identificar potenciais *trade-offs*<sup>1</sup> que ocorrem nos estágios do ciclo de vida e, conseqüentemente, oferece a possibilidade de otimizar o desempenho ambiental geral de um produto ou processo/serviço (Woods et al., 2016). Assim, a ACV é uma metodologia padronizada com etapas pré-estabelecidas que possibilitam quantificar e analisar os impactes ambientais ao longo da cadeia de produção, utilização e fim-de-vida (Venkatachalam, Spierling, Endres, & Siebert-Raths, 2018).

O resultado de uma ACV está associado a escolha do método científico que norteará a etapa de Avaliação dos Impactes de Ciclo de Vida (AICV). Isso porque cada um dos métodos segue uma modelação com premissas, características e banco de dados ambientais distintos. Como referido por Verones et al. (2020), nenhum método de AICV está completo em termos de cobertura ou nível de detalhe dentro das categorias de impacte, já que impactes e aspetos relativos a espécies invasivas, salinização, plásticos e acidificação dos oceanos, por exemplo, requerem mais pesquisas.

<sup>1</sup>“A expressão *trade-off* é largamente utilizada para designar situações de escolha entre opções conflitantes” (Parron, Lucilia Maria; Garcia, 2015), ou seja, a ACV contribui para a identificação de impactes e possibilita a tomada de decisão que corrobora para a redução ou compensação deles.

Assim, no processo de avaliação do efeito do plástico no ambiente marinho, é preciso de métodos que estejam apropriados para essa avaliação. Porém, conforme destaca Casagrande (2018), existe uma lacuna no que diz respeito a existência de modelos que quantifiquem os impactos associados a descarte inadequado de resíduos plásticos que acabam por serem destinados ao mar, ou seja, que não tiveram uma gestão adequada.

Neste contexto, esta dissertação tem como objetivo geral contribuir para o desenvolvimento de uma metodologia de AICV do plástico, tendo em vista os aspetos e impactos ambientais envolvidos principalmente no processo de desenvolvimento e descarte deste produto. Como objetivos específicos, corroborar com o entendimento do efeito do plástico no mar, contribuir tecnicamente para a inclusão deste impacto ambiental na metodologia ACV e comparar diante da metodologia proposta dois tipos de materiais plásticos: Polietileno (PE) e Polidimetilsiloxano (PMDS).

Após a presente introdução (capítulo 1), a estrutura do trabalho possui como continuidade o capítulo 2, que conta com a apresentação do estado da arte. Posteriormente no capítulo 3 serão expostas as características dos principais métodos de AICV. Já no capítulo 4 serão apresentadas as sugestões para aplicação do método USEtox na avaliação dos plásticos e, posteriormente, apresentados os resultados obtidos. Enquanto o capítulo 5 reunirá as conclusões do trabalho.

## 2. Revisão Bibliográfica

### 2.1. Plástico

O plástico é formado, principalmente, a partir da transformação de uma fração do petróleo em moléculas menores, os monómeros (Piatti & Rodrigues, 2005). Estes, por sua vez, passam pelo processo de polimerização até que sejam obtidos os polímeros. O plástico, portanto, é um polímero capaz de ser moldado em sua fase fluida e sólido em temperatura ambiente, por isso sua ampla aplicabilidade (Canevarolo Jr., 2006).

Assim, em 1900, surgiu a primeira forma comercial de plástico totalmente sintético (Abiplast, 2016), desde então o material tornou-se alvo de pesquisas até que foram constatadas diferentes possibilidades de aplicação devido a variação de suas características. Conforme ressalta Serviço Social da Indústria (2012), “a expansão do uso do material plástico se deve, principalmente, as suas características de baixo custo, peso reduzido, elevada resistência, várias propriedades conferidas por aditivos e variação de formas e cores”. A Tabela 2 apresenta as características e aplicações mais comuns dos principais plásticos convencionais.

**Tabela 2: Materiais plásticos convencionais, características e aplicações**

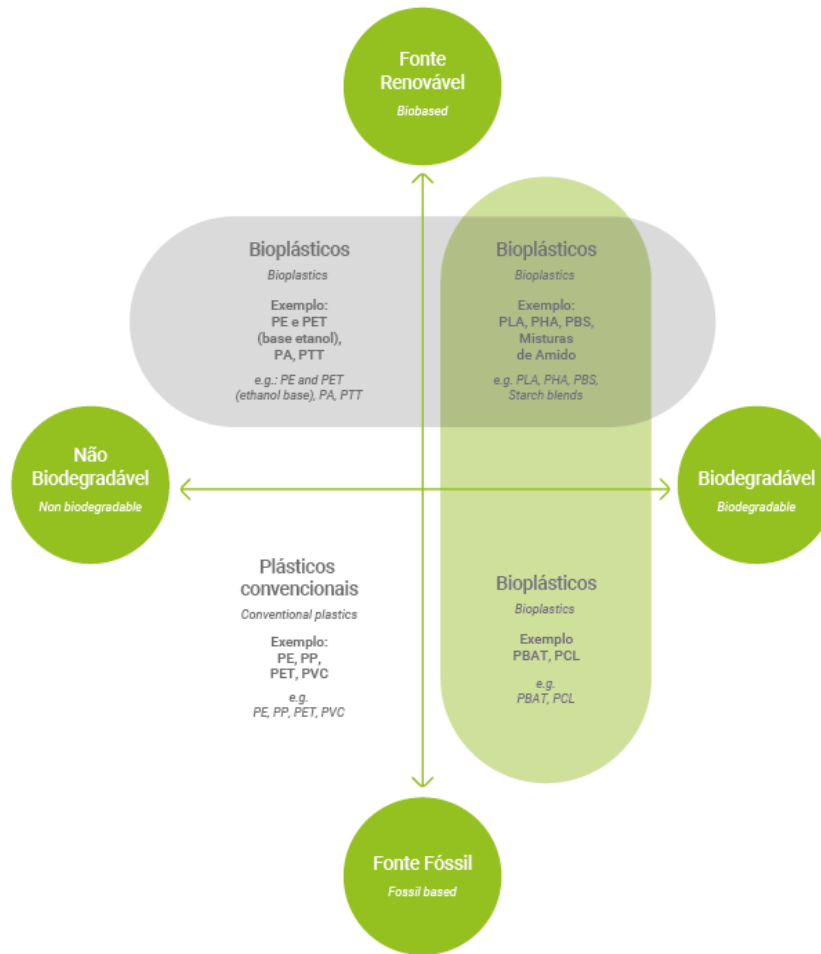
Material plástico	Característica	Aplicação
Polietileno Tereftalato – PET	Material rígido e transparente sofre lenta cristalização, é amorfo, absorve muita umidade (por ser um éster) funde sob temperaturas próximas a 265 °C. Possui excelente resistência ao impacto, baixa permeabilidade aos gases (CO <sub>2</sub> ).	Filamentos (tecelagem), fitas magnéticas, filmes para radiografias, laminados para impressão, embalagens para cozimento de alimentos, garrafas para bebidas, frascos para alimentos, cosméticos e produtos de limpeza.
Polietileno de alta densidade – PEAD	Material opaco devido à sua maior densidade e alto grau de cristalinidade. Possui melhores propriedades mecânicas que o PEBD e PEBDL. É resistente às baixas temperaturas, leve, impermeável, rígido, com ótimas resistências química e mecânica.	Embalagens de produtos de limpeza, produtos químicos e utilizado também na fabricação de autopeças

<b>Material plástico</b>	<b>Característica</b>	<b>Aplicação</b>
Policloreto de Vinilo - PVC	Este material plástico possui grande importância devido à sua grande versatilidade, ou seja, com a adição de aditivos como plastificantes, lubrificantes, estabilizantes, pigmentos e corantes, cargas entre outros aditivos, é possível obter uma infinidade de “grades” com propriedades muito diferentes para diversas aplicações.	Embalagens de alimentos, cosméticos e medicamentos; em mangueiras em geral; diversas aplicações na construção civil; “couro sintético” para indústria de calçados, bolsas e estofados; acessórios hospitalares, dentre outras diversas aplicações.
Polietileno de baixa densidade e Polietileno de baixa densidade linear – PEBD e PEBDL	Material com baixa condutividade elétrica e térmica. É resistente ao ataque de produtos químicos, atóxico, flexível, leve e transparente (quando em baixas espessuras).	Embalagens para alimentos e produtos de higiene pessoal, tubos para irrigação, isolamento de fios, etc. O PEBDL é principalmente utilizado na produção de embalagens flexíveis para alimentos.
Polipropileno Homopolímero – PP Homo	Material resistente a altas temperaturas podendo ser esterilizado. Boa resistência química e poucos solventes orgânicos podem solubilizá-lo à temperatura ambiente. Em comparação ao PEAD possui menor densidade, maior ponto de amolecimento, maior dureza superficial, maior rigidez, menor resistência ao impacto, maior sensibilidade à oxidação, melhor resistência ao stress cracking e maior fragilidade a baixas temperaturas.	Fabricação de peças com dobradiças, autopeças, embalagens para alimentos, fibras e monofilamentos, entre outros.
Polipropileno Copolímero – PP Copo	Material transparente, mais flexível e resistente (exceto resistência química) que o homopolímero. Quando modificado com elastômeros, torna-se mais resistente ao impacto. Possui alta resistência mecânica a baixas temperaturas.	Utilizado em utilidades domésticas, frascos e embalagens em geral.
Poliestireno - PS	Material rígido, leve, transparente e brilhante. Possui baixas resistências química, térmica e às intempéries. Possui baixa resistência mecânica (rígido e quebradiço).	Utilizado em copos, pratos e talheres descartáveis, brinquedos, produtos para escritório, entre outros.
Poliestireno Expandido – EPS	Consiste na incorporação de um agente de expansão ao PS (geralmente o pentano) o que torna o material uma espuma com excelentes propriedades acústica e térmica e dependendo da espessura e densidade, boa resistência mecânica. Possui baixa absorção de água.	Embalagens para alimentos, lajes e isolamento acústico/térmico para construção civil, boias, entre outros.

<b>Material plástico</b>	<b>Característica</b>	<b>Aplicação</b>
Copolímero de Acrilonitrila-Butadieno-Estireno – ABS	Possui boa resistência ao impacto devido ao butadieno, sua dureza depende das quantidades de butadieno e acrilonitrila, possui boa resistência à tração (menor que poliamida (PA) e Polióxido de metileno (POM)), pode ser usado sob temperaturas até 80 °C, possui baixa resistência às intempéries e maior resistência química que o PS (devido à acrilonitrila). Misturas com Policarbonato (PC) resultam em materiais com excelentes resistências ao impacto e à oxidação.	Autopeças, eletrodomésticos e eletroeletrônicos
Poli(dimetilsiloxano) – PDMS	Material de baixo custo com resistência térmica, de fácil manuseio em temperaturas ambientes, alta flexibilidade e biocompatibilidade.	Principalmente na indústria biomédica.

Fonte: Moreira (2013); SINDIPLAST - Sindicato da Indústria de Material Plástico do Estado de São Paulo (2020).

Contudo, o plástico está associado a questões ambientais, por ser um material principalmente proveniente de fonte fóssil, recurso natural finito, e por não ser facilmente degradado no ambiente (Zheng, Yanful, & Bassi, 2005). Diante disto, surgem técnicas de obtenção do plástico a partir de fontes renováveis ou ainda que via fonte fóssil, sejam biodegradáveis. A Figura 1, apresenta as principais fontes de obtenção do material plástico.



**Figura 1: Fontes de matéria prima do plástico. Fonte: Adaptado de ABIPLAST (2018).**

Relativamente a Figura 1, é importante destacar a distinção entre o plástico biodegradável e o bioplástico. Como é possível verificar, todo plástico biodegradável é considerado bioplástico, porém, o contrário não é válido. Já que um material de origem renovável, pode não ser biodegradável – ou seja, degradável por ação de organismos vivos. Como o PET (caracterizado na Tabela 2), que pode ser constituído pelo etanol (fonte renovável), porém não inicia sua decomposição apenas por processos biológicos. Quanto ao bioplástico ou biopolímero, entende-se que é o material constituído por fonte renovável e/ou biodegradável (Mohanty, Misra, & Drzal, 2005).

Por fim, ressalta-se que o benefício do uso do plástico biodegradável ainda gera dúvidas, pois ao misturá-lo com o plástico comum no processo de reciclagem, é possível comprometer as propriedades do novo produto. Além disso, o uso de produtos biodegradáveis não está associado à diminuição da quantidade de plástico que entra no

oceano ou a redução do risco de contaminação física ou química pelo ambiente marinho (UNEP, 2016).

### 2.1.1. Plástico no oceano

Uma das consequências da má gestão de resíduos é o direcionamento do resíduo plástico para o oceano. Segundo GESAMP (2015) a proporção de plástico produzido que chega ao oceano, depende da eficácia da cadeia de reutilização, reciclagem e gerenciamento de resíduos. Desta forma, a Figura 2 representa o *input* anual de plástico no oceano, possibilitando verificar que do total de plástico produzido, em 2014, entre 6,4 e 31 milhões de toneladas (US) foi encaminhado para o oceano (Lachmann 2016). Ressalta-se que a esse valor anual soma-se a massa plástico total já existente no oceano, tornando a presença do plástico no mar ainda mais preocupante.

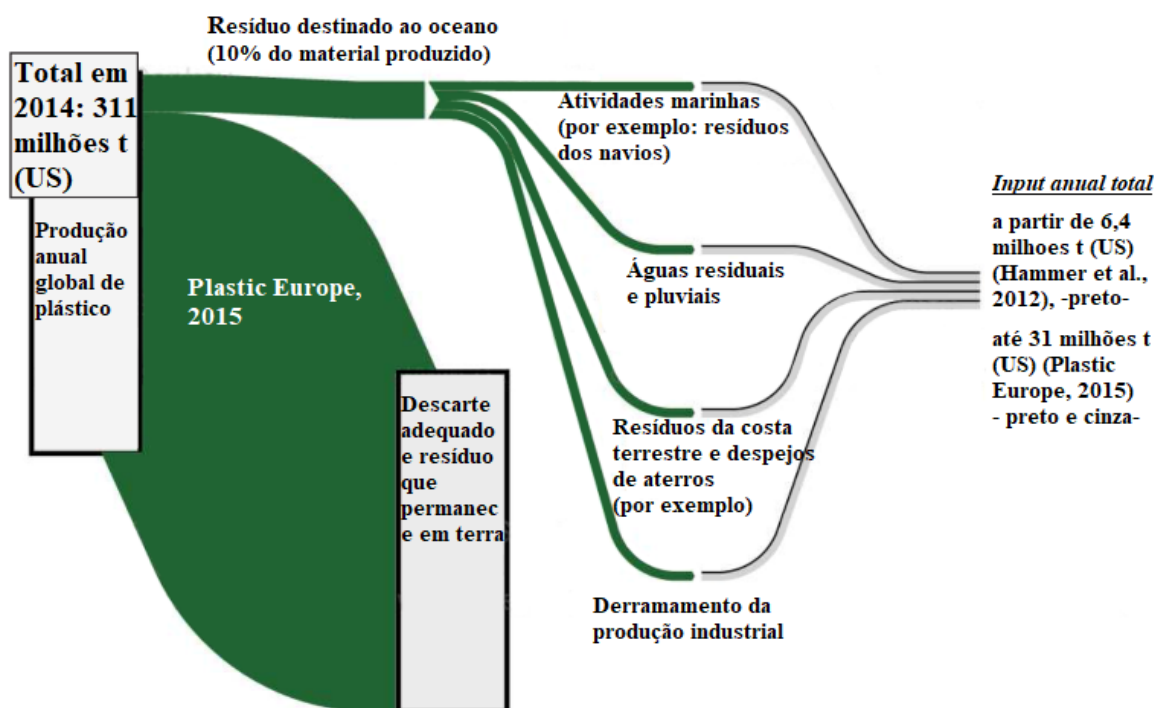
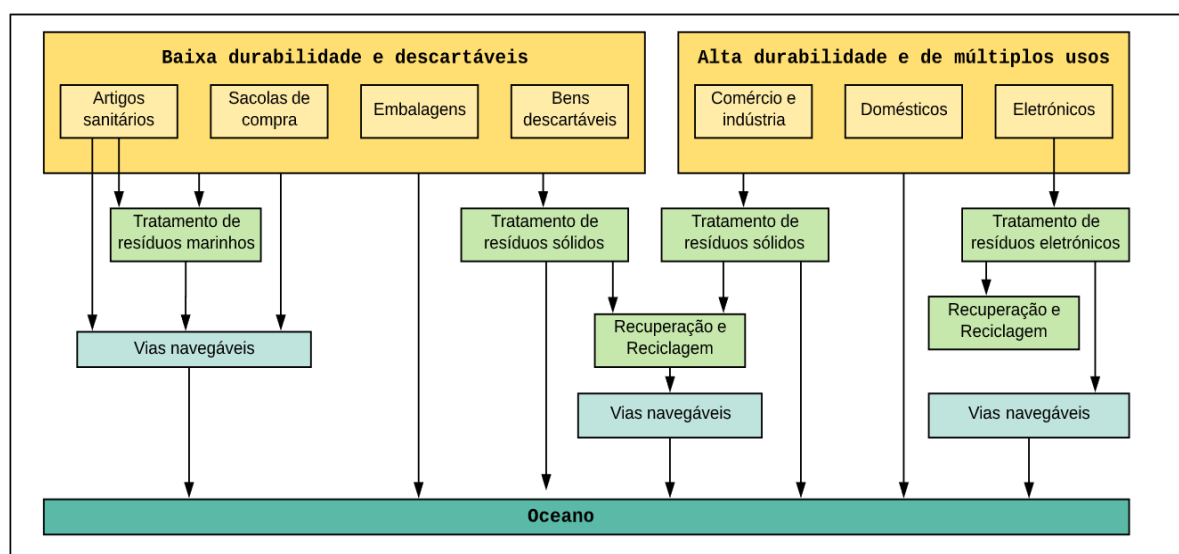


Figura 2: Input anual de plástico no oceano a partir de 4 fontes. Fonte: Adaptado de Lachmann (2016).

Diante da Figura 2, identifica-se que as fontes e caminhos do plástico são provenientes tanto das atividades desenvolvidas na terra, quanto no próprio oceano. Percebe-se ainda, as mesmas proporções destas fontes, devido a lacuna de dados confiáveis em escala global, conforme justifica Lachmann (2016).

No que se refere a classificação do plástico, apesar da variedade de tamanhos em que pode ser encontrado no oceano, as principais classificações são macroplástico, microplástico e nanoplástico. Os macroplásticos possuem tamanho acima de 5 mm, enquanto microplástico é o termo utilizado genericamente para caracterizar pequenos fragmentos de plástico menores que 5 mm (GESAMP, 2015). Os microplásticos, conforme apontam Koelmans, Besseling, & Shim, (2015), estão suscetíveis a fragmentação devido às interações fracas de suas cadeias poliméricas. Assim, formam-se pequenas partículas em ordens de grandeza do nanómetro, micrómetro e milímetro, sendo os nanoplásticos partículas menores que 100 nm (Koelmans et al., 2015).

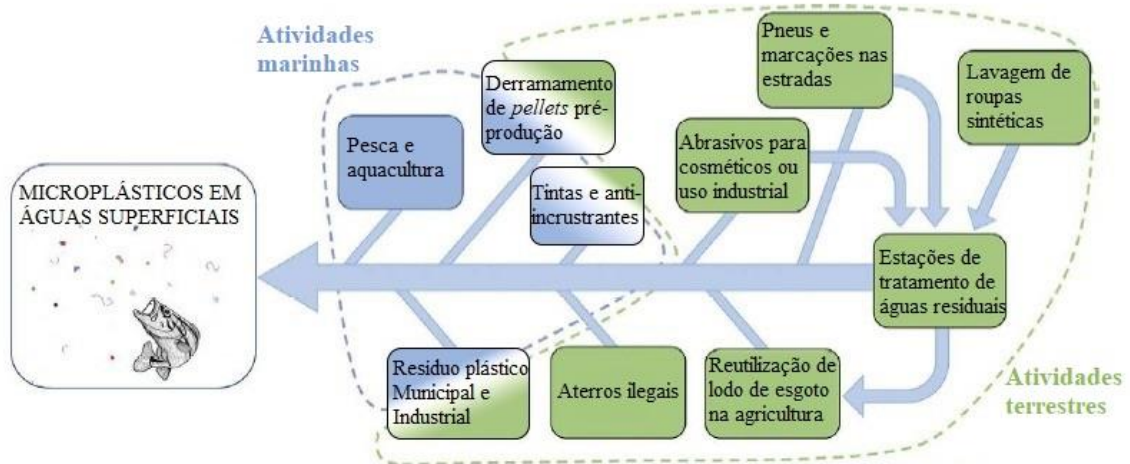
Os macroplásticos são grandes pedaços de resíduo, como redes de pesca, bóias e embalagens que afundam nas linhas costeiras ou rodopiam em torno dos enormes sistemas de correntes circulares dos oceanos Pacífico, Atlântico e Índico (Katsnelson, 2015). A Figura 3 caracteriza as fontes e os caminhos dos macroplásticos provenientes de atividades terrestres. Enquanto por vias aquáticas a aquacultura e a disposição ilegal dos navios comerciantes são alguns exemplos (UNEP, 2016).



**Figura 3: Fontes e caminhos do macroplástico baseadas em atividades terrestres. Fonte: Adaptado de (UNEP, 2016).**

Relativamente à origem dos microplásticos, entende-se que existem duas fontes, também associadas a atividades aquáticas ou terrestres – conforme apresenta a Figura 4. Como fonte primária tem-se as partículas que foram fabricadas de um tamanho específico para realizar uma variedade de funções (Vinet & Zhedanov, 2010). Essas partículas podem ser utilizadas para fabricação desde abrasivos para limpar as superfícies de edifícios/cascos de

navios até de produtos cosméticos de cuidados pessoais – PCCPs (como a pasta de dente) (Casagrande, 2018; Vinet & Zhedanov, 2010).



**Figura 4: Origens terrestres e aquáticas da geração dos microplásticos. Fonte: Adaptado de Galafassi, Nizzetto, & Volta (2019).**

A fonte secundária de formação dos microplásticos é provocada pela degradação dos plásticos, uma vez que o plástico possui a tendência de se degradar e perder suas propriedades iniciais ao longo do tempo dependendo das condições físicas, químicas e biológicas às quais está exposto (Vinet & Zhedanov, 2010). Segundo Thompson (2015), os principais tipos de degradação são:

- (a) Biodegradação – ação de organismos vivos geralmente micróbios;
- (b) Fotodegradação – ação da luz (normalmente luz solar em exposições no exterior);
- (c) Degradação termo-oxidativa – decomposição oxidativa lenta a temperaturas moderadas;
- (d) Degradação térmica – ação em altas temperaturas (não é um mecanismo de degradação ambiental);
- (e) Hidrólise – reação com a água.

Assim, diante da degradação, ocorre a quebra parcial ou completa do polímero implicando na sua fragmentação. Ressalta-se que a taxa de degradação pode variar de acordo com a tipologia do polímero, presença de aditivos químicos, disponibilidade de oxigênio ao sistema e temperatura ambiental (Avio, Gorbi, & Regoli, 2016).

No que se refere aos impactes ao ambiente marinho, verifica-se que são tanto físicos, emaranhamento, sufocamento e ingestão, por exemplo (Gregory, 2009; Casagrande, 2018), quanto químicos, como a bioacumulação dos componentes químicos do plástico ou produtos químicos adsorvidos pelo plástico a partir de água do mar (Teuten et al., 2009). É de ressaltar a fragmentação do plástico provoca o aumento da área da superfície exposta aos poluentes químicos (Royer, Ferrón, Wilson, & Karl, 2018). Assim, esses poluentes são adsorvidos principalmente aos microplásticos até que são ingeridos pelos animais ou acumulados ao sedimento marinho, caracterizando impacte ambiental que necessita de mais pesquisas, uma vez que não são claras as dinâmicas químicas de bioacumulação, por exemplo (Horton, Walton, Spurgeon, Lahive, & Svendsen, 2017).

### 2.1.2. Resíduos plásticos marinhos e produtos químicos

As substâncias que estão presentes nos resíduos plásticos marinhos podem ser de dois tipos: aditivos químicos acrescentados aos plásticos na sua produção e as substâncias hidrofóbicas adsorvidas pelas superfícies dos fragmentos devido à baixa polaridade das superfícies de plástico (Mato et al., 2001; Teuten et al., 2009).

Os aditivos são compostos químicos adicionados aos polímeros para melhoria de desempenho durante a sua modelagem, da funcionalidade e/ou das propriedades de degradação (Hahladakis, Velis, Weber, Iacovidou, & Purnell, 2018). A Figura 5 apresenta os principais tipos de aditivos químicos e suas funções.

Aditivo	Função
Plastificante	Aumentar a flexibilidade
Estabilizante térmico	Evitar a decomposição por aquecimento
Estabilizante UV	Evitar a decomposição causada por raios UV solares
Retardador de chamas	Reduzir a inflamabilidade
Lubrificante	Reduzir a viscosidade
Carga	Aumentar a resistência ao desgaste por abrasão e reduzir o custo do material
Antioxidante	Minimizar a oxidação provocada por oxigênio e ozônio atmosféricos
Pigmentos	Conferir a cor desejada
Anti estático	Evitar eletrização por atrito
Aromatizante	Conferir odores desejados. Mascaram odores indesejados
Biocida	Inibir a degradação por microorganismos

**Figura 5: Principais aditivos utilizados na fabricação do plástico e suas funções. Fonte: Piatti & Rodrigues (2005).**

Assim, diante da “característica de aceitarem uma grande variedade de aditivos” (Canevarolo Jr., 2006), os plásticos tornam-se mecanismos de contaminação química, principalmente nos oceanos. Já que o estado em que um material plástico permanece ao longo do tempo pode afetar a forma como interage com o meio ambiente e, portanto, afetar a liberação potencial de substâncias nele contidas (Hahladakis et al., 2018). Os aditivos comumente usados, incluindo Bisfenol A (BPA), Alquilfenóis, Éteres Difenílicos Polibromados (PBDE) representam risco à biota, atuando como substâncias químicas desreguladoras do sistema endócrino, por exemplo (Talsness, Andrade, Kuriyama, Taylor, & Saal, 2009). Ressalta-se que outro entrave ambiental associado aos aditivos é justamente serem os principais responsáveis por conferir ao plástico a característica de resistência, o que permite sua persistência no oceano.

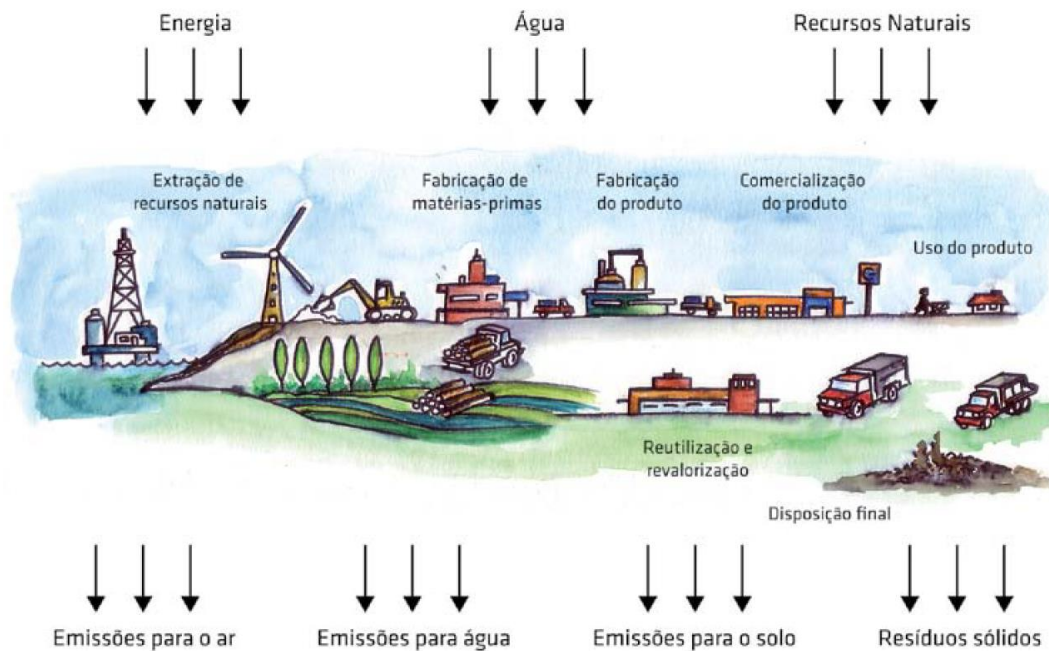
Em relação a adsorção de produtos químicos hidrofóbicos, cada polímero, que possui estruturas de superfície distintas, possui afinidades diferentes para poluentes e assim, podem servir como transportadores de produtos tóxicos ao ambiente (Mato et al., 2001). Como exemplo desses produtos hidrofóbicos, identificados como potenciais impactes ambientais, tem-se Pesticidas Organoclorados, Bifenilos Policlorado (PCBs), Hexaclorociclohexanos (HCHs) e Hidrocarbonetos Aromáticos Policíclicos (PAHs) (Teuten et al., 2009; Ziccardi, Edgington, Hentz, Kulacki, & Kane Driscoll, 2016).

## **2.2.Avaliação do Ciclo de Vida**

A Avaliação do Ciclo de Vida (ACV) é uma metodologia utilizada para analisar quantitativamente os potenciais aspetos e impactes ambientais de um produto/serviço (Goedkoop, 1995; Goedkoop et al., 2008). Assim, é uma ferramenta que analisa as cargas ambientais de um produto em todos os estágios e processos do seu ciclo de vida, caracterizando-o como um sistema de produto (Guinée et al., 2001).

Desta forma, segundo Goedkoop (1995), a ACV pode ser utilizada a partir de dois objetivos: determinar os impactes ambientais de produtos e *designs* alternativos, no intuito de compará-los, ou determinar as causas dos impactes ambientais de um único produto a fim de aperfeiçoá-lo. É de ressaltar que “a informação desenvolvida em um estudo ACV deve ser utilizada como uma componente de um processo de decisão que conta com outras

componentes, como sejam, o custo e a performance” (Ferreira, 2004). Ou seja, a ACV é uma ferramenta metodológica que avalia os impactes ambientais desde a extração de matérias primas, até sua produção, uso e destino final dos resíduos gerados (conforme apresenta a Figura 6), e não tem o intuito de considerar os aspetos financeiros ou outros que não sejam o efeito de determinado produto para o meio ambiente.



**Figura 6: Caracterização geral da ACV de um produto. Fonte: Karaski, Ribeiro, Pereira, & Arteaga (2016).**

A metodologia de ACV é constituída por 4 fases, conforme determina a norma NBR ISO 14044:2009 (ABNT, 2009a):

1. Definição de objetivo e âmbito do estudo;
2. Análise de inventário;
3. Avaliação dos Impactes de Ciclo de Vida (AICV);
4. Interpretação.

Na primeira fase ocorre a determinação dos objetivos do estudo e o entendimento do contexto em que o produto/serviço se enquadra. Desta forma, entre outras definições, são esclarecidas desde as funções do produto e suas limitações até as fronteiras, nas quais ocorrem os fluxos de entradas e saídas, e categorias de impactes envolvidas. Ainda nesta fase, determina-se a unidade funcional da ACV, que é uma medida de desempenho capaz de

fornecer uma referência, assegurando a comparabilidade de resultados, em uma mesma base (ABNT, 2009b).

Já na segunda fase, ocorre a compilação de dados a serem coletados no intuito de quantificar as entradas e as saídas do sistema de produto.

No que se refere à AICV, terceira fase, ressalta-se a “avaliação de impacte dos resultados do inventário, visando ao melhor entendimento de sua significância ambiental” (Mendes, Bueno, & Ometto, 2015). Na avaliação ocorre a correlação dos dados obtidos no inventário com associação a categorias de impacte, permitindo a identificação e cálculo de indicadores. Para conduzir a Análise dos impactes, há a possibilidade de utilização de diferentes métodos científicos que serão responsáveis por nortear os resultados da ACV. Esses métodos utilizam diferentes modelos de cálculo que determinarão os impactes do sistema de produto.

Os métodos científicos podem ser comparados de acordo com o tipo de abordagem de avaliação de impacte. Assim, há dois níveis de avaliação: *midpoint* e *endpoint*. No primeiro, ocorre a modelação dos impactes em um ponto intermediário do mecanismo ambiental, entre as emissões e os danos (Dreyer, Niemann, & Hauschild, 2003). Como exemplo tem-se: toxicidade humana, ecotoxicidade aquática e mudanças climáticas. Já a abordagem a nível *endpoint*, procura representar os danos ambientais causados a uma das seguintes áreas de proteção: Saúde Humana, Recursos Naturais e Qualidade do Ecossistema (Benoît et al., 2013; Goedkoop & Spriensma, 2000).

Apesar da importante aplicabilidade de uma ACV, é possível associá-la a limitações, uma vez que abrange diferentes ferramentas e modelos que possuem características e propósitos particulares (Furtado, 2014). Sendo assim, ao realizar a avaliação de um mesmo produto por meio de mais de um método, é provável, por exemplo, que cada método indique resultados distintos.

### 3. Métodos de Avaliação de Impacte de Ciclo de Vida

A AICV apresenta a conversão dos dados numéricos do inventário, orientada por métodos de avaliação, baseados em fatores previamente definidos e banco de dados ambientais acerca de inúmeras substâncias (Saade, Silva, & Gomes, 2014). Assim, ao determinar o método de avaliação a ser utilizado é preciso considerar a categoria de impacte que se pretende avaliar, além de verificar as características individuais de cada modelo. A Tabela 3, compara as características de cinco dos métodos de avaliação mais utilizados na literatura, em uma abordagem *midpoint*.

É de ressaltar que ainda que a ACV seja uma metodologia de avaliação reconhecida, os modelos científicos disponíveis ainda possuem lacunas importantes a serem exploradas. Ao considerar o tópico “aplicação” da Tabela 3, por exemplo, verifica-se a desproporção entre os Fatores de Caracterização (CFs) disponíveis em cada um dos bancos de dados. Considerando este tópico, os modelos USEtox e Recipe possuem uma aplicação mais abrangente – com 2000 CFs – porém, o USEtox não possui dados para ecotoxicidade marinha e terrestre.

Apesar disso, o USEtox é considerado modelo específico para avaliação de toxicidade e foi desenvolvido para comparar via ACV o impacte de substâncias químicas nos ecossistemas e na saúde humana (Rosenbaum et al., 2008).

Por conseguinte, entre os dois métodos citados anteriormente, verifica-se que o USEtox é incentivado pela UNEP - *United Nations Environment Programme*<sup>2</sup> para aplicação por empresas e governos (Tabela 3) e é o modelo recomendado pelo *International Reference Life Cycle Data (ILCD)* (European Commission Joint Research Center (Ed.), 2010). Enquanto o método Recipe não é oficialmente assegurado por autoridade internacional.

---

<sup>2</sup> Programa das Nações Unidas para o Meio Ambiente

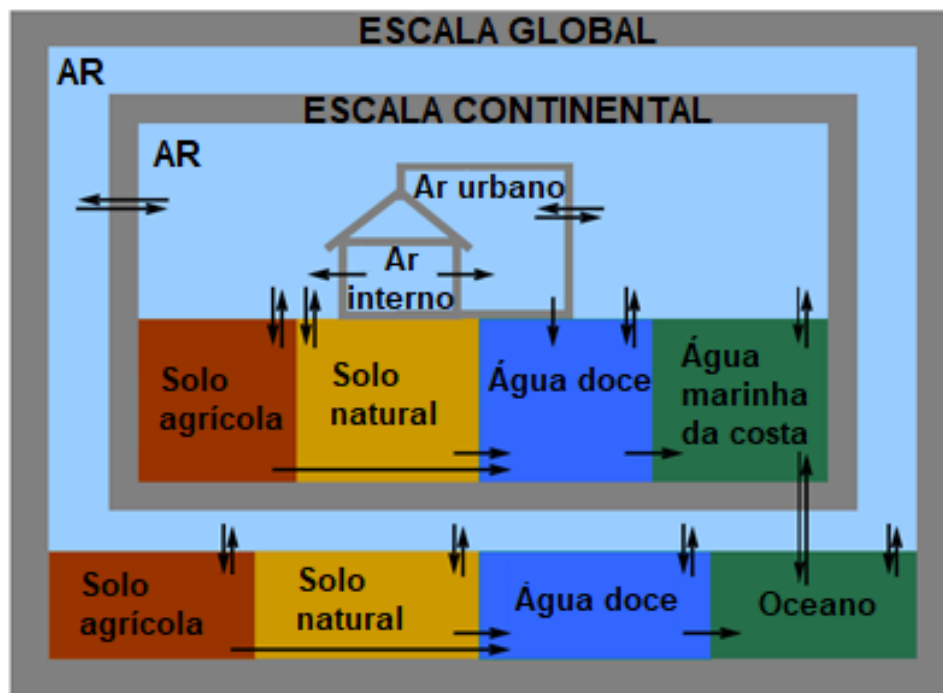
**Tabela 3: Comparação dos principais métodos de avaliação em abordagem *midpoint***

	<b>USEtox</b>	<b>Recipe</b>	<b>IMPACT2002+</b>	<b>TRACI</b>	<b>EDIP2003</b>
<b>Complemento do âmbito</b>	O âmbito do modelo para avaliação genérica de produtos químicos é totalmente aplicável	O âmbito do modelo para avaliação genérica de produtos químicos é totalmente aplicável, exceto que o modelo é parametrizado para circunstâncias europeias	O âmbito do modelo para avaliação genérica de produtos químicos é totalmente aplicável, exceto que o modelo é parametrizado para circunstâncias europeias	O âmbito do modelo para avaliação genérica de produtos químicos é totalmente aplicável, exceto que o modelo é parametrizado para circunstâncias dos EUA	O âmbito do modelo para avaliação genérica de produtos químicos é totalmente aplicável, mas não adaptável a uma avaliação explícita espacial e temporal
<b>Relevância ambiental</b>	A relevância ambiental é alta para ecotoxicidade em água doce, exceto pela exclusão da ecotoxicidade marinha e terrestre	A relevância ambiental é alta, embora os dados de ecotoxicidade sejam baseados em EC <sub>50</sub> agudo e ecotoxicidade terrestre é baseada em dados aquáticos	A relevância ambiental é alta. A ecotoxicidade terrestre é, no entanto, com base em dados aquáticos	A relevância ambiental é alta. Os fatores de efeito de ecotoxicidade são, no entanto, baseados no NOEC em vez de dados EC <sub>50</sub>	A relevância ambiental é alta, mas o compartimento marinho e os processos de destino, como transporte de produtos químicos, são excluídos
<b>Robustez e segurança científica</b>	Dados químicos de <i>input</i> e componentes do modelo são revisados extensivamente por um grande grupo de desenvolvedores de modelos, mas nenhuma estimativa de incerteza disponível	Componentes do modelo são extensivamente revisados e estimativas de incertezas disponíveis, mas dados químicos nem sempre revisados	Componentes do modelo são extensivamente revisados e estimativas de incerteza disponíveis, mas os dados químicos nem sempre são revisados	Componentes do modelo são extensivamente revisados e estimativas de incerteza disponíveis, mas os dados químicos nem sempre são revisados	A avaliação de efeitos é cientificamente robusta, mas o transporte intermediário não inclui de forma abrangente nem a verificação dos resultados do modelo e estimativas de incerteza
<b>Aplicação</b>	Banco de dados com > 2000 CFs para ecotoxicidade em água doce, pode ser facilmente aplicado e atualizado. Dados em falta para ecotoxicidade marinha e terrestre.	Banco de dados com > 2000 CFs ecotoxicológicos disponível e pode ser facilmente aplicado e atualizado	Banco de dados com > 400 CFs ecotoxicológicos é disponível e pode ser facilmente aplicado e atualizado	Banco de dados com > 100 CFs ecotoxicológicos é disponível e pode ser facilmente aplicado e atualizado	Banco de dados com > 100 CFs ecotoxicológicos é disponível e pode ser facilmente aplicado e atualizado
<b>Avaliação geral dos critérios científicos</b>	O modelo aborda o ambiente de água doce, inclui todos os elementos vitais do modelo de maneira cientificamente sólida, exceto metais, e está suficientemente documentado	O modelo aborda os ambientes de água doce, marinha e terrestre, inclui todos os elementos vitais do modelo de maneira cientificamente sólida, exceto metais, e está bem documentado	O modelo aborda os ambientes de água doce, marinha e terrestre, inclui todos os elementos vitais do modelo de maneira cientificamente sólida, exceto metais, e está bem documentado	O modelo aborda os ambientes de água doce e terrestre, inclui todos os elementos vitais do modelo de destino de maneira cientificamente sólida, exceto para metais e está bem documentado. A avaliação do efeito ecotoxicológico pode ser mais aprimorada usando dados EC <sub>50</sub>	O modelo aborda os ambientes de água doce e terrestre, inclui a parte do efeito de uma maneira cientificamente sólida, exceto metais, e está bem documentada. A avaliação do destino é, no entanto, muito simplificada e não há informações disponíveis sobre as incertezas envolvidas nos resultados do modelo
<b>Avaliação geral da aceitação das partes interessadas</b>	Os princípios do modelo são fáceis de entender e a UNEP incentiva seu uso por empresas e governos	Princípios do modelo são fáceis de entender, baseados no Sistema EUSES aplicado na UE para avaliar químicos novos e existentes, mas a versão ACV não é oficialmente assegurada por autoridade internacional	Os princípios do modelo são fáceis de entender, mas o modelo não é assegurado por um órgão competente	Os princípios do modelo são fáceis de entender e assegurado pela USEPA	Os princípios do modelo são fáceis de entender, mas o modelo não é assegurado por um órgão competente

Fonte: Adaptado de JRC *European commission* (2011).

Desta forma, verifica-se que no contexto do plástico, que é reconhecido pela comunidade científica como material com potencial de gerar impacte em diferentes fluxos (ou compartimentos) – como exemplificado pela Figura 4 – o USEtox pode ser o modelo científico com potenciais características para avaliação da contaminação química associada ao plástico.

O USEtox é uma ferramenta de modelagem ambiental, à nível *midpoint*, capaz de determinar os fatores de caracterização (CF) que representam o dano potencial cuja substância em análise pode causar em um compartimento (ar, solo ou água) (Ectoc, 2016). Diante disto, o modelo considera tanto os compartimentos de emissão de determinada substância, quanto os de destino dessa substância, assim como as possíveis trocas entre eles, conforme apresenta a Figura 7.



**Figura 7: Escalas e compartimentos considerados pelo modelo USEtox. Fonte: Fantke et al. (2017).**

Relativamente a ecotoxicidade, que quantifica os fatores de caracterização de um contaminante, realiza-se um cálculo em três etapas: determinação do fator destino (FF), da exposição (XF) e dos efeitos (EF) de produtos químicos emitidos para o meio ambiente (Fantke et al., 2015). Assim, a combinação destes fatores é realizada a partir da Equação 1:

$$CF = FF \times XF \times EF \quad (1)$$

CF, fator de caracterização (em CTUe – ecotoxicidade aquática ou CTUh – toxicidade humana)

FF, fator destino (em dias)

XF, fator de exposição (adimensional)

EF, fator de efeito (em PAF m<sup>3</sup>.kg<sup>-1</sup>)

Ressalta-se que o fator de caracterização é expresso em unidades tóxicas comparativas (CTU), sendo CTUe utilizada para impactes da ecotoxicidade aquática. CTUe fornece uma estimativa da Fração Potencialmente Afetada de espécies (PAF) integrada ao longo do tempo e volume por unidade de massa de um produto químico emitido (Rosenbaum et al., 2008).

Ao associar os fatores de caracterização a massa do contaminante emitido, determina-se o Índice de Impacte (IS), que aborda toda a mistura de produtos químicos resultante de todas as emissões químicas relacionadas a um produto ou serviço, ao longo de todo o ciclo de vida (Ecetoc, 2016).

### 3.1.Fatores do modelo

#### Fator de Destino

O Fator de Destino (FF) descreve a distribuição de uma substância química entre os diferentes compartimentos, após sua emissão ao ambiente. Assim, representa a persistência, em dias, da substância em determinado compartimento. O cálculo do FF possui a interferência de parâmetros associados a uma matriz *K* de taxas de transferência e processos de perda, que dependem do número de compartimentos ambientais envolvidos, inclusive dados relativos às condições ambientais – como velocidade do vento, temperatura, taxa de chuva, profundidade, entre outros. Assim, a Equação 2 apresenta a fórmula final para cálculo do FF.

$$FF = - \frac{1}{K} \quad (2)$$

FF, fator destino (em dias)

*K*, matriz de taxas de transferência (1/d)

Para o cálculo de *K*, o modelo possui alguns *inputs* obrigatórios relacionados com a substância em estudo, sendo parâmetros que precisam ser conhecidos para que os demais

sejam calculados. A Tabela 4 apresenta os parâmetros obrigatórios para substâncias orgânicas.

**Tabela 4: Parâmetros obrigatórios para substâncias orgânicas**

Parâmetro	Símbolo	Unidade
Massa molecular	MW	g/mol
Coefficiente de partição octanol-água	$K_{ow}$	L/L
Pressão de vapor (25 °C)	$P_{vap25}$	Pa
Solubilidade (25 °C)	Sol25	mg/L
Taxa de degradação na água	$K_{degW}$	1/s
Taxa de degradação no sedimento	$K_{degSd}$	1/s
Taxa de degradação no solo	$K_{degSl}$	1/s

Fonte: Adaptado de Tabela 3 de Fantke et al. (2017).

Assim, diante da interpretação de cada um dos parâmetros envolvidos pela matriz  $K$ , verifica-se que dependem de dados regionais, dados de substância, processos de degradação e balanços de massa entre diversos compartimentos referidos na Figura 7.

#### Fator de Exposição

O fator de exposição (XF) corresponde à fração da substância química “real” dissolvida na coluna de água. Assim, descreve a fração dos produtos químicos em água doce biodisponíveis para absorção em espécies de ecossistemas de água doce e, portanto, potencialmente causadora de impactes e danos.

Desta forma, o XF é calculado a partir das constantes de concentração de sólidos suspensos e carbono dissolvido, associado ao Fator de Bioacumulação (BAF) das substâncias. O cálculo do XF, conforme apresenta a Equação 3 (adaptada da Equação 190 de Fantke et al. (2017)), considera a fração adsorvida na matéria em suspensão em água água ( $K_{susp} \times C_{susp}$ ), no carbono orgânico dissolvido ( $K_{doc} \times C_{doc}$ ) e a fração que é bioacumulada na biota aquática ( $BAF_{fish} \times C_{biota}$ ) (Saouter, Aschberger, Fantke, Hauschild, Kienzler, et al., 2017).

$$XF, x = \frac{1}{1 + K_{susp,x} \times \frac{C_{susp,w}}{1000} + K_{doc,x} \times \frac{C_{doc,w}}{1000} + BAF_{fish,w,x} \times \frac{C_{biota,w}}{1000}} \quad (3)$$

Sendo,

$XF,x$ : fator de exposição ecológica de substância química  $x$  em água;

$Ksusp,x$ : coeficiente de partição de uma substância química  $x$  entre sólidos em suspensão em água (L/kg);

$Csusp,w$ : concentração de sólidos suspensos em água (0,015 kg/m<sup>3</sup> para água doce (European Chemicals Agency, 2012) e 0,005 kg/m<sup>3</sup> para água marinha – Tabela 10 de Fantke et al. (2017))

$Kdoc,x$ : coeficiente de partição de uma substância entre carbono orgânico dissolvido (coloidal) e água (L/kg);

$Cdoc,w$ : concentração de carbono orgânico dissolvido (coloidal) em água (0,005 kg/m<sup>3</sup> para água doce (Gandhi et al., 2010) e 0,001 kg/m<sup>3</sup> para água marinha – Tabela 10 de Fantke et al. (2017))

$BAFfish$ : fator de bioacumulação de uma substância em água (L/kg);

$Cbiota,w$ : concentração de substância associada a biota (0,001 kg/m<sup>3</sup>)

$x$ : substância química.

### Fator de Efeito

O Fator de Efeito (EF) ecotoxicológico representa o potencial de toxicidade de substâncias químicas individuais para os ecossistemas aquáticos (Saouter, Aschberger, Fantke, Hauschild, Bopp, et al., 2017). EF é calculado com a determinação do declive linear ao longo da relação concentração-resposta do HC50 até o ponto em que a fração de espécies afetadas é de 0,5 (Fantke et al., 2017). Assim, a Equação 4 representa o cálculo do EF.

$$EF = \frac{feco}{HC50} \quad (4)$$

Sendo,

EF, fator de efeito (em PAF m<sup>3</sup>.kg<sup>-1</sup>)

$feco$ , multiplicador de ecossistemas (0,5)

HC50, média geométrica dos EC50 para espécies [kg m<sup>-3</sup>]

## **3.2.Principais parâmetros do modelo**

### **3.2.1. Coeficientes de partição**

O coeficiente de partição octanol-água ( $K_{ow}$ ) permite a determinação da medida da hidrofobicidade de um composto químico e seu potencial de bioacumulação (Paschke, Popp, & Schüürmann, 1998). É calculado por meio da “razão das concentrações de equilíbrio de uma substância, na sua forma neutra, dissolvida num sistema de duas fases” (Pando, 2019). Desta forma, o octanol caracteriza a fase orgânica e representa um organismo, como o peixe.

Assim, diante de uma substância química que tenha maior concentração na fase orgânica, verifica-se a hidrofobicidade do organismo a essa substância.

O  $K_{ow}$  é uma propriedade físico-química bastante importante para a determinação do CF, estando associado aos cálculos dos parâmetros de FF e EF. Permite ainda a determinação do coeficiente de partição entre carbono dissolvido e orgânico ( $K_{DOC}$ ), na situação de não existirem dados experimentais (Fantke et al., 2017) e está diretamente associado ao comportamento das substâncias hidrofóbicas em ecossistemas aquáticos (Burkhard, 2000).

Diante disto, quando conhecidos, o  $K_{ow}$  e  $K_{DOC}$  são dados relevantes da substância no banco de dados. Na ausência de dados experimentais para  $K_{DOC}$ , determina-se por meio da Equação 5, conforme orienta Burkhard (2000).

$$K_{DOC} = 0,08 \times K_{ow} \quad (5)$$

Relativamente a relação entre a concentração da substância química entre sólidos suspensos e a água, calcula-se o coeficiente de partição  $K_{susp}$  a partir da Equação 6.

$$K_{susp,x} = (fr_{m_w} \times K_d + (1 - fr_{m_w}) \times K_{d,alt}) \times \frac{1000}{\rho_{sd,sl}} \times \frac{fr_{m_{Corg,susp,w[S]}}}{fr_{m_{Corg,std,sl|sd}}} \quad (6)$$

Sendo,

$fr_{m_w}$  : fração de espécies originais em água doce e salgada (Informações disponíveis na Tabela A3);

$K_d$  : coeficiente de partição sólidos adimensionais/água de espécies originais;

$K_{d,alt}$  : coeficiente de partição sólidos adimensionais/água de forma alternativa;

$\rho_{sd,sl}$  : densidade mineral de sedimentos e solo ( $\text{kg}\cdot\text{m}^{-3}$ ) (Informações disponíveis na Tabela A2);

$fr_{m_{Corg,susp,w[S]}}$  : fração de massa de carbono orgânico de matéria suspensa em água doce e no mar continental e global (Informações disponíveis na Tabela A2);

$fr_{m_{Corg,std,sl|sd}}$  : fração de massa padrão de carbono orgânico em sedimentos e solo (Informações disponíveis na Tabela A2);

1000: fator de conversão ( $\text{dm}^3\cdot\text{m}^{-3}$ ).

Se o coeficiente de partição carbono orgânico/água ( $K_{OC}$ ) for definido nos dados da substância, o coeficiente de partição sólidos/água de espécies originais ( $K_d$ ) pode ser obtido a partir de:

$$K_d = (K_{OC}) \times fr\_m_{Corg, std, sl|sd} \times \frac{\rho_{sd, sl}}{1000} \quad (7)$$

Com,

$K_d$ : coeficiente de partição sólidos adimensionais/água de espécies originais;

$K_{OC}$ : coeficiente de partição carbono orgânico/água de espécies originais (L·kg<sup>-1</sup>)

$fr\_m_{Corg, std, sl|sd}$ : fração de massa padrão de carbono orgânico em sedimentos e solo (Informações disponíveis na Tabela A2);

$\rho_{sd, sl}$ : densidade mineral de sedimentos e solo (kg·m<sup>-3</sup>) (Informações disponíveis na Tabela A2);

1000: fator de conversão (dm<sup>3</sup>·m<sup>-3</sup>).

Porém, se  $K_{OC}$  não estiver definido, o  $K_d$  para substâncias<sup>3</sup> neutras pode ser calculado a partir da Equação 8. Sendo o  $K_{d, alt}$  para substâncias neutras também calculado a partir da Equação 8, conforme orienta Fantke et al. (2017).

$$K_d = K_{d, alt} = (1,26 \times K_{ow}^{0,81}) \times fr\_m_{Corg, std, sl|sd} \times \frac{\rho_{sd, sl}}{1000} \quad (8)$$

### 3.2.2. EC<sub>50</sub> e HC<sub>50</sub>

O USEtox fundamenta a modelagem da ecotoxicidade com dados relativos à concentração efetiva de uma substância que afeta (reduz) 50% de uma população exposta ( $EC_{50}$ ) (Fantke et al., 2017). A partir da média do logaritmo de  $EC_{50}$ , determina-se a concentração perigosa afetante (HC<sub>50</sub>) a 50% das espécies (Payet, 2005). Para que a ecotoxicidade de uma substância seja avaliada por meio do cálculo de HC<sub>50</sub> é preciso que esteja disponível pelo menos três valores de  $EC_{50}$  (espécies) de pelo menos três níveis tróficos diferentes – algas, invertebrados (crustáceos) e peixes (Larsen & Hauschild, 2007).

A avaliação de risco ambiental está associada a dados de toxicidade aguda, sub-crônica e crônica, sendo a preferência do modelo o uso de uma das duas últimas. A Tabela 5 apresenta a classificação da toxicidade relativa a duração do teste por tipo de organismo.

**Tabela 5: Classificação de testes de toxicidade de acordo com a duração e tipo de organismo**

Organismo	Toxicidade Aguda	Toxicidade Sub-Crônica	Toxicidade Crônica
Vertebrados	< 7 dias	≥ 7; < 32	≥ 32 dias
Invertebrados	< 7 dias	≥ 7; < 21	≥ 21 dias
Plantas	< 7 dias	-	≥ 7 dias
Algas	< 3 dias	-	≥ 3 dias

Fonte: Adaptado de Tabela 21 Fantke et al. (2017).

<sup>3</sup> Para as demais substâncias, ver seção 5.4.3 de Fantke et al. (2017).

Assim, em situações que não se conhece os dados de  $EC_{50}$  crônicos de determinada substância orgânica, deve-se utilizar os dados  $EC_{50}$  agudos (Fantke et al., 2017; Länge, Hutchinson, Scholz, & Solbé, 1998). O  $EC_{50}$  crônico é calculado, por espécie, dividindo por 2 os dados de toxicidade agudo disponíveis, conforme *acute-to-chronic ratio*<sup>4</sup> (ACR) determinado por (Rosenbaum et al., 2008), ou de acordo com outras orientações que sejam disponíveis (Fantke et al., 2017). Para os metais, por exemplo, o USEtox indica outros valores de ACR.

Em casos que existem mais de um valor de  $EC_{50}$  por espécie, calcula-se a média geométrica desses valores (Equação 9) e posteriormente com o log da média geométrica por espécie, calcula-se a média dos valores de log, obtendo-se  $\log_{10} HC_{50}$  em  $\log_{10} \text{kg/m}^3$ .

$$EC_{50,i} = 10^{\left[ \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \log_{10} \frac{EC_{50,i}}{1000} \right]} \quad (9)$$

Sendo,

$EC_{50,i}$  :  $EC_{50}$  representativo para espécies i, com  $j \in \{1, \dots, n\}$  (mg/L).

De forme direta, o  $\log_{10} HC_{50}$  (ou *avlog* $EC_{50}$ , conforme denominação do USEtox) pode ser calculado a partir da Equação 10.

$$avlogEC_{50} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \frac{1}{m} \sum_{j=1}^m \log_{10}(EC_{50,i,j}) \quad (10)$$

Ou seja, a partir da Equação 10 tem-se  $\log_{10} HC_{50}$  em  $\log_{10} \text{kg/m}^3$ .

Após a definição do HC50, é possível que seja calculado o Fator de Efeito, já que as concentrações permitem identificar como as espécies estão sendo afetadas pela toxicidade do químico.

### 3.2.3. Fatores de Bioacumulação e de Bioconcentração

Bioacumulação e bioconcentração são processos em que organismos são expostos a um ambiente contaminado por determinada substância química. Por meio da Bioconcentração considera-se que o organismo absorve essa substância somente através de superfícies

---

<sup>4</sup> Ou seja, razão de conversão para estimar valor crônico a partir do teste agudo.

respiratórias e dérmicas, enquanto a bioacumulação está associada a todas as vias de exposição que um organismo pode absorver uma substância química, inclusive pela ingestão (Arnot & Gobas, 2006). Diante da determinação do grau em que esses processos ocorrem, determinam-se os fatores de bioacumulação (BAF) e de bioconcentração (BCF).

Diante disto, o modelo do USEtox requer o valor de BAF associado a concentração dissolvida em água ( $BAF_{dissolved.fish}$ ), calculado a partir da Equação 11, que é baseada no modelo de Arnot & Gobas (2003). Ressalta-se que o cálculo depende do valor  $BAF_{total.fish}$  disponível pelo Programa BCFWIN<sup>TM</sup> - do EPISuite.

$$BAF_{dissolved.fish} = \frac{BAF_{total.fish}}{1+0,08 \times DOC \times K_{ow} + 0,35 \times POC \times K_{ow}} \quad (11)$$

Sendo,

$BAF_{dissolved.fish}$  : fator de bioacumulação com concentração dissolvida em água (L.kgfish<sup>-1</sup>);

$BAF_{total.fish}$ : fator de bioacumulação total.

$DOC$  : concentração de carbono orgânico dissolvido (kg/l) (Informações disponíveis na Tabela A2);

$POC$  : concentração de carbono orgânico particulado (kg/l) (Informações disponíveis na Tabela A2);

$K_{ow}$  : coeficiente de partição octanol/água de espécies originais.

Para o cálculo de BCF, utilizam-se os dados referidos na Tabela A4 e orientações de Arnot & Gobas (2003).

### 3.2.4. Taxas de degradação

Conforme já referido, os cálculos do modelo dependem das taxas de degradação em ar, água, solo e sedimento. Diante disto, quando não há dados experimentais para as substâncias orgânicas, algumas orientações, baseadas nos dados fornecidos pelo EPISuite<sup>5</sup>, são apresentadas por Fantke et al. (2017).

As degradações em água, solo e sedimento estão associadas aos *outputs* do BIOWIN3, um dos modelos do programa BIOWIN que estima a biodegradabilidade aeróbia e anaeróbia de produtos químicos orgânicos usando 7 modelos diferentes (USEPA, 2020). A Tabela 6 apresenta a relação entre o *output* do BIOWIN3 e o *default* das constantes de biodegradação.

---

<sup>5</sup> Programa que permite ao usuário estimar parâmetros e propriedade químicos por meio de outros 13 programas embutidos.

**Tabela 6: Relação entre o output do Biowin3 e o default das constantes de biodegradação.**

<b>BIOWIN3 Output</b>	<b>Constante (1/s)</b>
Horas	$4,7 \times 10^{-5}$
Horas para dias	$6,4 \times 10^{-6}$
Dias	$3,4 \times 10^{-6}$
Dias para semanas	$9,3 \times 10^{-7}$
Semanas	$5,3 \times 10^{-7}$
Semanas para meses	$2,1 \times 10^{-7}$
Meses	$1,3 \times 10^{-7}$
Resistente	$4,5 \times 10^{-8}$

Fonte: Adaptado de Tabela 14 de Fantke et al. (2017).

Além disso, para extrapolar a constante de biodegradação em taxas de degradação nos compartimentos: água ( $k_{degW}$ ), solo ( $k_{degSl}$ ) e sedimento ( $k_{degSd}$ ) o valor da constante deve ser dividido pelos fatores 1:2:9. Ou seja,

$$K_{degSd} = \frac{k_{degW}}{9} \quad (12)$$

$$K_{degSl} = \frac{k_{degW}}{2} \quad (13)$$

Considerando o potencial do USEtox para a avaliação da ecotoxicidade de substâncias químicas orgânicas, após a interpretação e detalhamento do modelo aplicado pelo método USEtox 2.0 versão 1.1, decidiu-se por entender como este modelo pode ser aplicado na avaliação do efeito do plástico no ambiente marinho. Ou seja, no intuito de perceber de que maneira a ACV pode ser aplicada na identificação dos aspetos e impactes associados ao plástico.

## 4. O modelo no contexto dos plásticos

A interpretação do modelo utilizado pelo USEtox possibilitou o entendimento de que a ferramenta pode ser adequada para avaliação do impacte do microplástico relativamente aos potenciais danos ambientais à ecotoxicidade, principalmente devido a capacidade de avaliação das transferências de massa entre vários compartimentos e a sua relação com a biota. Além disso, o USEtox possui transparência quanto a divulgação do seu modelo científico, o que também influenciou na decisão por utilizá-lo. Porém, verificou-se que sua aplicação no contexto do plástico depende de adaptações e pressupostos a serem sugeridos nos tópicos seguintes.

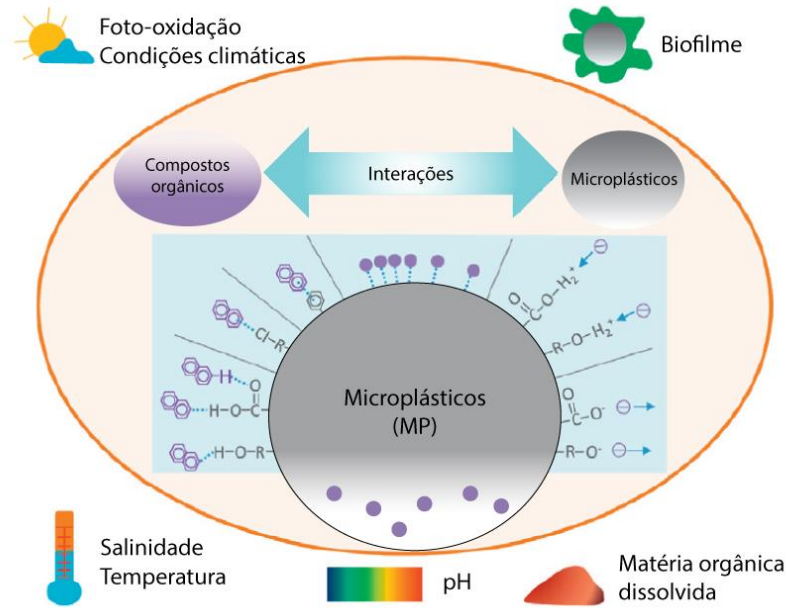
### 4.1. Fator de Exposição (XF)

No que diz respeito ao cálculo do XF, verifica-se que é fundamentado principalmente em mecanismos de sorção-difusão, interações intermoleculares da substância entre a água, fase orgânica e sólidos suspensos dissolvidos. Em um mecanismo de sorção que teremos sempre adsorção e absorção, e a adsorção à superfície vai depender muito da relação entre a área superficial específica e o tamanho da partícula.

Os nanoplásticos podem ter um impacto maior do que os microplásticos devido às suas dimensões e propriedades coloidais, uma vez que podem cruzar barreiras biológicas e se tornar potencialmente perigoso para os organismos vivos (El Hadri, Gigault, Maxit, Grassl, & Reynaud, 2020). Ou seja, têm um tamanho muito inferior aos microplásticos, mas com capacidade de sorção que pode ser muito superior em relação aos microplásticos. Mei et al. (2020), por exemplo, referem que a sorção de PAHs em nanoplástico de PS pode ser 10 vezes superior que em microplástico de PS devido à relação entre o tamanho da partícula e da área superficial específica.

Considerando os diferentes tamanhos em que se pode encontrar o plástico no ambiente marinho, é preciso ter em conta os próprios resíduos plásticos contaminados que podem funcionar como sólidos suspensos que sorvem substâncias e libertam outras. Além disso, dão origem a biofilmes por adsorção superficial no plástico, que ao serem ingeridos pela biota, também provocam transferência de substâncias, para além dos problemas causados

pelo próprio plástico. A Figura 8, representa os fatores que afetam as interações entre os microplásticos e os compostos orgânicos.



**Figura 8: Fatores que afetam as interações entre microplásticos e compostos orgânicos.**  
**Fonte: Adaptado de Mei et al. (2020).**

Conforme já citado, a transferência de contaminantes para os organismos, pode ocorrer de diferentes maneiras, sendo que para a maioria das espécies, predomina-se a contaminação via ingestão (Teuten et al., 2009). Neste contexto, Moore, Moore, Leecaster, & Weisberg (2001) verificaram que a grande proporção de plástico por plâncton, identificada em sua pesquisa, tende a afetar muitos tipos de biota, como as aves marinhas e os epibiontes (ou alimentadores de filtro), que se alimentam na porção superior da coluna de água. Além disso, Hidalgo-Ruz, Gutow, Thompson, & Thiel (2012) destaca que as aves e epibiontes podem interferir na transferência, acumulação e quebra adicional de microplásticos, potencializando o efeito negativo da ingestão do plástico pelos organismos marinhos.

Diante do exposto, sugere-se que o cálculo do XF no contexto do plástico seja realizado de acordo com a Equação 14.

$$XF, x = \frac{1}{1 + K_{susp,x} \times \frac{C_{susp,x}}{1000} + K_{doc,x} \times \frac{C_{doc,x}}{1000} + BAF_{fish,fw,x} \times \frac{C_{biota}}{1000}} \quad (14)$$

Sendo,

XF,*x*: fator de exposição ecológica do microplástico *x* em água;

$K_{doc,x}$ : coeficiente de partição de substâncias contaminantes entre nanoplástico (coloidal, até 1000 nm) e água (L/kg);

$K_{susp,x}$ : coeficiente de partição de substâncias contaminantes entre microplástico em suspensão (acima de 1000 nm e inferior a 5 mm) em água (L/kg);

$C_{susp}$ : concentração de microplásticos em água ( $2,71 \times 10^{-07}$  kg/m<sup>3</sup> para água marinha<sup>6</sup>)

$C_{doc}$ : concentração de nanoplástico (coloidal) em água ( $9,03 \times 10^{-8}$  kg/m<sup>3</sup> para água marinha<sup>7</sup>)

$C_{biota}$ : concentração de substância associada a biota (0,001 kg/m<sup>3</sup>)

$BAF_{fish}$ : fator de bioacumulação do plástico em água (L/kg);

$x$ : plástico.

As variáveis  $K_{DOC}$ ,  $K_{susp}$  e  $BAF_{fish}$  no modelo USEtox podem ser determinadas a partir do valor de  $K_{ow}$ , pelo que no intuito de comparar os tipos de materiais plástico com a capacidade de adsorver substâncias orgânicas hidrofóbicas, sugere-se que estas variáveis tenham em consideração o coeficiente de partição polímero-água marinha (ou  $\log K_{plástico}$ ) para cada substância orgânicas hidrofóbica, já disponível para alguns tipos de polímeros. Ou seja, a ideia de utilizar o  $K_{plástico}$  se justifica por considerar que o plástico representa um potencial risco de contaminação ao ambiente marinho, já que pode ser portador de substâncias tóxicas hidrofóbicas. Além de ser uma substância tóxica por si só que será avaliada posteriormente por meio do cálculo do fator EF.

Conforme apresenta a Tabela 7, realizou-se a média dos coeficientes de partição de 4 polímeros (PMDS, PE, PP e PS) considerando 3 famílias de substâncias orgânicas hidrofóbicas – PAHs, Hexaclorociclohexanos (HCHs) e Clorobenzenos (CBs).

**Tabela 7: Coeficiente de Partição polímero-água marinha de substâncias orgânicas hidrofóbicas**

CBs	log KPDMSsw	log KPEsw	log KPPsw	log KPSsw
Pentachlorobenzene - PeCB	4,510	4,630	4,500	5,100
Hexachlorobenzene - HeCB	4,900	5,220	5,010	5,280
<b>Média</b>	<b>4,701</b>	<b>4,916</b>	<b>4,748</b>	<b>5,189</b>

<sup>6</sup> Considerando que em 2010 foi calculado uma massa total global de 4,9.105 toneladas de microplástico flutuante e que o volume do oceano em que o microplástico é encontrado representa 1,81.1015 m<sup>3</sup> (Everaert et al., 2018).

<sup>7</sup> Valor estimado na mesma proporção  $C_{susp}/C_{doc}$  do USEtox, sendo o  $C_{susp}$  3 vezes superior que  $C_{doc}$ . Isso se justifica porque não foi encontrada na literatura a concentração de nanoplástico coloidal. Segundo (Gigault et al., 2018), é preciso desenvolver métodos de identificação e principalmente quantificação de nanoplástico, inclusive em solução coloidal.

PAHs	log KPDMS <sub>sw</sub>	log KPE <sub>sw</sub>	log KPP <sub>sw</sub>	log KPS <sub>sw</sub>
Phenanthrene - PHE	3,870	4,440	4,000	5,390
Fluoranthene - FLU	4,370	5,520	4,790	5,910
Anthracene - ANT	4,040	4,770	4,290	5,610
Pyrene - PYR	4,370	5,570	4,800	5,840
Chrysene - CHR	4,830	6,390	5,510	6,630
Benzo[a]pyrene - BaP	5,290	7,170	6,100	6,920
Dibenz[a,h] anthracene - DBahA	5,840	7,870	7,000	7,520
Benzo[ghi]perylene - BghiP	5,790	7,610	6,690	7,150
<b>Média</b>	<b>4,747</b>	<b>6,047</b>	<b>5,298</b>	<b>6,329</b>
HCHs	log KPDMS <sub>sw</sub>	log KPE <sub>sw</sub>	log KPP <sub>sw</sub>	log KPS <sub>sw</sub>
α-Hexachlorohexane	2,770	2,410	2,690	3,190
β- Hexachlorohexane	1,810	2,040	2,180	2,630
γ- Hexachlorohexane	2,620	2,330	2,580	3,010
δ- Hexachlorohexane	2,170	2,080	2,230	2,800
<b>Média</b>	<b>2,311</b>	<b>2,209</b>	<b>2,410</b>	<b>2,900</b>

Fonte: Adaptado de Lee, Byun, Kim, & Kwon (2018b, 2018a); Lee, Shim, & Kwon (2014).

Diante dos valores encontrados, sugere-se que o coeficiente aplicado no contexto do plástico seja calculado conforme Equação 15. Ou seja,  $\log K_{plástico}$  é igual à média geométrica dos  $\log K_{plástico,n}$  por família de compostos (PAH, HCH e CB, por exemplo).

$$\log K_{plástico} = \sqrt[n]{\prod_n \log K_{plástico,n}} \quad (15)$$

Onde  $\log K_{plástico,n}$  por família de compostos = média geométrica de  $\log K_{plástico}$  de cada substância  $i$  dentro da família de compostos.

$$\log K_{plástico,n} = \sqrt[i]{\prod_i \log K_{plástico,i}} \quad (16)$$

A Tabela 8 apresenta os resultados obtidos para o coeficiente de partição polímero-água marinha com base nos dados da Tabela 7.

**Tabela 8: Coeficiente de Partição polímero-água marinha de substâncias orgânicas hidrofóbicas para 4 tipos de polímeros**

Substância	log KPDMS <sub>sw</sub>	log KPE <sub>sw</sub>	log KPP <sub>sw</sub>	log KPS <sub>sw</sub>
PAHs	4,747	6,047	5,298	6,329
HCHs	2,311	2,209	2,410	2,900
CBs	4,701	4,916	4,748	5,189
<b>Média geométrica</b>	<b>3,722</b>	<b>4,035</b>	<b>3,929</b>	<b>4,567</b>

Ressalta-se que em relação às substâncias hidrofílicas, assume-se o modelo USEtox e considera-se que não será relevante nos plásticos. Considera-se ainda que plásticos hidrofílicos terão uma degradação elevada em ambiente marinho, pelo que se teria de ter em conta os seus metabolitos e mecanismos reativos, pelo que não serão considerados neste estudo.

É de referir que a revisão apresentada por Mei et al. (2020) conclui que os aditivos não afetam significativamente a capacidade de sorção de compostos orgânicos pelos microplásticos, pelo que não será necessário considerar o efeito dos aditivos neste estudo.

## 4.2.Fator de Efeito

Conforme já citado, o cálculo do EF baseia-se essencialmente em  $EC_{50}$  e  $HC_{50}$  de pelo menos 3 espécies de 3 níveis tróficos distintos. Porém, apenas dados experimentais para espécies de crustáceos (invertebrados) foram encontrados. Assim, considerando os dados apresentados pela Tabela 9, calculou-se o  $avlogEC_{50}$  e com a média geométrica desse resultado obteve-se o HC50 necessário ao cálculo do EF.

**Tabela 9: Dados de Toxicidade para PE e PMDS**

Material Plástico	Organismo	Duração <sup>1</sup>	$EC_{50}$	$EC_{50}$ Sub-crônico ou Crônico
PMDS	<i>Acartia tonsa</i>	10 dias	88900 mg/L, considerando densidade 1 (Stevens, Powell, Mäkelä, & Karman, 2001)	88900 mg/L
	<i>Corophium sp</i>	10 dias	30700 mg/L (Stevens et al., 2001)	30700 mg/L
	<i>Ampelisca abdita</i>	10 dias	2300 mg/L (Stevens et al., 2001)	2300 mg/L
PE	<i>Daphnia magna</i>	48 horas	65 mg/L (Frydkjær, Iversen, & Roslev, 2017)	32,5 mg/L <sup>2</sup>

Obs.: <sup>1</sup>De acordo com as durações, os testes foram classificados conforme Tabela 5; <sup>2</sup>Conversão de teste agudo para crônico utilizando ACR 2;

## 4.3.Fator de Destino

A determinação do FF está associada ao cálculo dos parâmetros da matriz  $K$  que tem em consideração principalmente os dados da substância em estudo, processos de degradação, balanços de massa entre compartimentos e os dados de *default* para o cenário do estudo, disponíveis no Apêndice B. Na Tabela A11, é possível visualizar os resultados obtidos para cada um dos parâmetros da matriz.

**Tabela 10: Resultados dos processos de degradação e balanço de massas PMDS e PE**

Parâmetros	Fatores	Unidades	Resultados	
			PMDS	PE
Processos de degradação	Degradação, $k_{deg}.w1C$	1/d	1,81E-02	1,81E-02
	Remoção, $k_{sed}.w1C$	1/d	1,00616E-06	2,41E-07
Balanço de massas entre compartimentos	$k_{fr.waterC} \rightarrow airC$	1/d	1,50E-04	1,38E-04
	$k_{fr.waterC} \rightarrow sea.waterC$	1/d	6,968E-03	6,968E-03
	$k_{fr.waterC} \rightarrow agr.soilC$	1/d	6,546E-05	6,546E-05

A Tabela 10 apresenta os valores dos processos de degradação e balanço de massa obtidos para os dois polímeros em estudo, utilizados para o cálculo do FF.

#### 4.4. Resultados e discussões

A partir dos cálculos realizados, a Tabela 11 apresenta os resultados obtidos para ecotoxicidade de PE e PMDS, por meio da aplicação do modelo USEtox e alterações sugeridas pelo presente estudo.

**Tabela 11: Resultado da Ecotoxicidade para PE e PMDS**

Fatores	Unidades	Resultados	
		PMDS	PE
XF	-	1,00E+00	1,14E-02
FF	$kg.kg^{-1}.day^{-1}$	3,95E+01	3,95E+01
EF	$PAF.m^3.kg^{-1}$	2,71E-02	1,54E+01
CF	<b><math>PAF.m^3.day/kgemitted</math></b>	<b>1,07E+00</b>	<b>6,93E+00</b>

Diante dos resultados apresentados pela Tabela 11, verifica-se que a Fração Potencialmente Afetada de espécies integrada ao longo do tempo e volume por unidade de massa de PE emitido é 15% superior que a Fração de PMDS. Resultado este que era esperado, uma vez que o PMDS se trata de um material biocompatível.

Além disso, a Tabela 12 apresenta os dados das substâncias que nortearam os cálculos de cada um dos fatores (XF e FF) para os dois polímeros.

**Tabela 12: Dados da substância**

Parâmetro	Valor		Unidade	Descrição do parâmetro
Nome	Polietileno	Polidimetilsiloxano	-	-
Número CAS	9002-88-4	63148-62-9	-	Número do registo no banco de dados do <i>Chemical Abstracts Service</i>
Massa Molecular	478,94	310,69	g.mol <sup>-1</sup>	Massa molecular
pKaChemClass	Neutro	Neutro	-	Classificação pKa, sendo pKa o logaritmo de base 10 negativa da constante de dissociação de ácido (Ka) de uma solução.
$K_{plástico}$	4,035	3,72E+00	L.L <sup>-1</sup>	Coefficiente de partição polímero/água
$K_H$ 25C	1,15E+10	5,97E+06	Pa.m <sup>3</sup> .mol <sup>-1</sup>	Coefficiente de <i>Henry</i>
$P_{vap}$ 25	1,03E-05	64,8	Pa	Pressão de vapor (25 °C)
Sol25	4,298E-13	0,003374	mg.L <sup>-1</sup>	Solubilidade (25 °C)
$K_{deg}W$	2,10E-07	2,10E-07	s <sup>-1</sup>	Taxa de degradação na água
$K_{deg}Sd$	2,33E-08	1,05E-07	s <sup>-1</sup>	Taxa de degradação no sedimento
$K_{deg}Sl$	1,05E-07	2,33E-08	s <sup>-1</sup>	Taxa de degradação no solo
$BAF_{dissolved.fish}$	8,68E+07	8,00E+07	L.kgfish <sup>-1</sup>	Fator de Bioacumulação com concentração dissolvida em água

Contudo, ao analisar a Tabela 12, relativamente à massa molecular dos dois polímeros, verifica-se que são valores baixos para polímeros típicos que possuem massa molecular variando entre 14000 a 7000000 g/mol. Enquanto a pressão de vapor do PMDS é caracterizada por um valor muito alto, considerando que segundo Jensen (1956), a pressão de vapor a 25° dos polímeros varia entre  $3 \times 10^{-8}$  e  $1 \times 10^{-5}$  Pa – sendo materiais caracterizados por pressões muito baixas ou quase nulas. Constata-se que o EPISuite, sendo uma ferramenta que se baseia na contribuição de grupo, possui alguma resistência quanto à adequação mais realista das características dos polímeros em relação à massa molecular e à pressão de vapor.

Resistência essa que se estende ao modelo aplicado pelo USEtox. Analisando o efeito da massa molecular do PE para 1000 Carbonos, valor mais realista, obtém-se cerca de 14 mil g/mol (29,2 vezes mais que o valor sugerido pelo EPISuite - 478,94 g/mol). O resultado de FF aumenta apenas 3% em relação ao FF exposto pela Tabela 11. Ou seja, o método é robusto em relação a alterações de massa molecular, já que uma elevada variação da massa molecular tem um efeito muito pouco significativo. Analisando e adequando os dados da

pressão de vapor para valores na ordem de  $10^{-5}$  Pa, verifica-se igualmente uma alteração do resultado de FF muito pouco significativa, cerca de 2% no PDMS e sem alteração no PE.

Relativamente às taxas de degradação em água, percebe-se mediante a Tabela 12 que são equivalentes para os dois polímeros, uma vez que na ausência de dados experimentais, foram utilizados os dados estimados a partir do *default* do USEtox. Porém, verifica-se uma possível incerteza quantos aos dados, uma vez que cada polímero possui características de durabilidade e capacidade de fragmentação distintas. Assim, evidencia-se o referido por (JRC European commission, 2011; Rosenbaum et al., 2008), quanto a incerteza nos fatores de destino dos produtos químicos orgânicos causada principalmente pela incerteza nas taxas de degradação.

Quanto ao EF, por exemplo, verificou-se que são necessários dados experimentais de *EC50* para diferentes níveis tróficos, uma vez que foram utilizados dados relativos apenas aos invertebrados. Apesar disso, foi verificado que o potencial de toxicidade do PE foi 568 vezes superior do que o do PMDS, resultado que precisa ser explorado mediante dados experimentais representativos, porém, demonstra que o PE possui um potencial de toxicidade alto relativamente ao PMDS. Porém, possuem BAF – e conseqüentemente XF, com valores próximos, representando que a capacidade dos dois polímeros serem absorvidos pelos organismos, inclusive pela ingestão, são correlatas, mas o potencial de serem contaminados pelo PE é muito superior (de acordo com *EC50*).

Neste contexto, os resultados obtidos evidenciam que o USEtox possui potencial para ser reformulado de maneira que seja possível avaliar a ecotoxicidade marinha, inclusive no contexto do plástico. Ressalta-se ainda que já é previsto o desenvolvimento da incorporação dos impactes ecotoxicológicos sobre a água do mar na estrutura do USEtox, mas que antes disso é preciso que os dados de exposição e efeito sejam explorados (Fantke et al., 2018). Assim como o desenvolvimento de fatores de efeito que quantifiquem o efeito dos resíduos plásticos para a biodiversidade marinha (Woods et al., 2016).

Desta forma, os resultados reforçam a necessidade da existência de um método próprio para avaliação da ecotoxicidade marinha. Já que conforme referido em JRC *European commission* (2011), nenhum método disponível é recomendado para tratar a ecotoxicidade marinha e terrestre. Porém, constata-se que já está sendo testada a inclusão da avaliação da

ecotoxicidade nesses compartimentos no método LCIA *global* recentemente desenvolvido pelo LC-*Impact*, conforme descrito em Verones et al. (2020).

## 5. Conclusões

Os danos ambientais associados ao sistema produção-consumo-descarte de produtos são frutos de um modelo económico linear que é insustentável. Verifica-se a importância da mudança de paradigma no intuito de reduzir o custo anual das externalidades negativas associadas ao consumo do plástico, enquanto valoriza-se a compreensão da maneira em que este material e suas variações interagem com contaminantes. Assim, possibilita-se que o real impacto causado ao meio ambiente seja avaliado, corroborando com a tomada de decisão que favorece a preservação e mitigação de danos.

Neste contexto, a ACV é uma metodologia capaz de contribuir com a análise quantitativa dos potenciais aspetos e impactos ambientais de um produto/serviço, permitindo inclusive a comparação de dois ou mais produtos a fim de influenciar no processo de decisão.

O presente trabalho contribuiu na comparação de dois tipos de plásticos usualmente utilizados na indústria devido às suas características e aplicabilidades. A avaliação consistiu na aplicação do método USEtox 2.0 versão 1.1, considerando também as suas orientações metodológicas, aos dados das substâncias Polietileno e Polidimetilsiloxano. Contudo, verificou-se a necessidade de adaptar a sua metodologia, principalmente no que se refere ao coeficiente de partição de octanol-água. Já que o plástico é um material com baixa polaridade de suas superfícies, baixa solubilidade em água, favorecendo a capacidade de adsorverem substâncias orgânicas hidrofóbicas. Assim, optou-se pelo uso do coeficiente de partição polímero água.

Os resultados obtidos caracterizam que a Fração Potencialmente Afetada de espécies integrada ao longo do tempo e volume por unidade de massa de PE emitido é 15% superior que a Fração de PMDS. Ou seja, o PE é representado por potencial de ecotoxicidade superior relativamente ao PMDS. Porém, os resultados evidenciam a demanda por dados experimentais principalmente ao que se refere a exposição e efeito, além de taxas de degradação mais representativas.

Ressalta-se que o maior desafio encontrado ao longo deste estudo esteve relacionado à obtenção de dados experimentais para os polímeros de um modo geral e pesquisas relativas ao efeito do plástico no mar. Verificou-se a limitação de disponibilidade de dados na

literatura, no que diz respeito principalmente aos plásticos biodegradáveis (como poliláctico e polietilenoglicol), que ainda geram dúvidas quanto ao processo de degradação. Entende-se que diante da característica de alta durabilidade do plástico, associada à comum fragmentação desse material (em micro e nanoplástico, por exemplo), verifica-se a importância de se considerar a degradação. Já que se possibilita a avaliação da influência do tempo de resistência do plástico ao compartimento marinho e compreender os produtos de degradação, de forma a reduzir ou gerenciar potencial impacto ambiental.

Sugere-se como trabalho futuro a elaboração de base de dados experimentais relativos a toxicidade dos polímeros, coeficientes de partição, constantes de degradação e demais parâmetros que permitam comparar o potencial de ecotoxicidade entre os diferentes tipos de plástico.

## Referências Bibliográficas

- Abiplast. (2016). Perfil 2016. *Indústria Brasileira de Transformação de Material Plástico*, 43. Retrieved from [http://file.abiplast.org.br/file/download/2017/Perfil\\_2016\\_Abiplast\\_web.pdf](http://file.abiplast.org.br/file/download/2017/Perfil_2016_Abiplast_web.pdf)
- Abiplast. (2018). Indústria Brasileira de Transformação e Reciclagem de Material Plástico - Perfil 2018. *Abiplast*.
- ABNT. (2009a). *ABNT NBR ISO 14044: Gestão ambiental-avaliação do ciclo de vida-requisitos e orientações*. ABNT.
- ABNT. (2009b). *NBR ISO 14040. Gestão Ambiental - Avaliação Do Ciclo de Vida - Princípios e Estrutura*.
- Arnot, J. A., & Gobas, F. A. P. C. (2003). A generic QSAR for assessing the bioaccumulation potential of organic chemicals in aquatic food webs. *QSAR and Combinatorial Science*. <https://doi.org/10.1002/qsar.200390023>
- Arnot, J. A., & Gobas, F. A. P. C. (2006). A review of bioconcentration factor (BCF) and bioaccumulation factor (BAF) assessments for organic chemicals in aquatic organisms. *Environmental Reviews*. <https://doi.org/10.1139/A06-005>
- Association of Plastics Manufacturers. (2020). *PlasticsEurope*. Retrieved November 20, 2019, from WHAT ARE PLASTICS website: <https://www.plasticseurope.org/en/about-plastics/what-are-plastics>
- Avio, C. G., Gorbi, S., & Regoli, F. (2016). Plastics and microplastics in the oceans: From emerging pollutants to emerged threat. *Marine Environmental Research*. <https://doi.org/10.1016/j.marenvres.2016.05.012>
- Benoît, C., Mazijn, B., United Nations Environment Programme., CIRAIQ., Interuniversity Research Centre for the Life Cycle of Products, P. and S., & Canadian Electronic Library. (2013). *Guidelines for social life cycle assessment of products*.
- Bovea, M. D., & Pérez-Belis, V. (2012). A taxonomy of ecodesign tools for integrating environmental requirements into the product design process. *Journal of Cleaner Production*. <https://doi.org/10.1016/j.jclepro.2011.07.012>
- Burkhard, L. P. (2000). Estimating dissolved organic carbon partition coefficients for nonionic organic chemicals. *Environmental Science and Technology*. <https://doi.org/10.1021/es001269l>
- Canevarolo Jr., S. V. (2006). Ciência dos Polímeros. In *Ciência dos Polímeros: um texto*

*básico para tecnólogos e engenheiros.*

- Casagrande, N. M. (2018). *INCLUSÃO DOS IMPACTOS DOS RESÍDUOS PLÁSTICOS NO AMBIENTE MARINHO EM AVALIAÇÃO DE CICLO DE VIDA*. Retrieved from <https://repositorio.ufsc.br/handle/123456789/193766>
- Dreyer, L. C., Niemann, A. L., & Hauschild, M. Z. (2003). Comparison of Three Different LCIA Methods: EDIP97, CML2001 and Eco-indicator 99. *The International Journal of Life Cycle Assessment*. <https://doi.org/10.1007/bf02978471>
- Ecetoc. (2016). Freshwater ecotoxicity as an impact category in life cycle assessment. *Technical Report No. 127*. <https://doi.org/10.13140/RG.2.2.30606.56640>
- El Hadri, H., Gigault, J., Maxit, B., Grassl, B., & Reynaud, S. (2020). Nanoplastic from mechanically degraded primary and secondary microplastics for environmental assessments. *NanoImpact*. <https://doi.org/10.1016/j.impact.2019.100206>
- Ellen MacArthur Foundation. (2016). *The New Plastics Economy: Rethinking the future of plastics*. *Ellen MacArthur Foundation*.
- Eriksen, M., Lebreton, L. C. M., Carson, H. S., Thiel, M., Moore, C. J., Borerro, J. C., ... Reisser, J. (2014). Plastic Pollution in the World's Oceans: More than 5 Trillion Plastic Pieces Weighing over 250,000 Tons Afloat at Sea. *PLoS ONE*. <https://doi.org/10.1371/journal.pone.0111913>
- European Chemicals Agency. (2012). Chapter R.16: Environmental Exposure Estimation. *Guidance on Information Requirements and Chemical Safety Assessment*, (October).
- European Commission Joint Research Center (Ed.). (2010). *Analysis of existing Environmental Impact Assessment methodologies for use in Life Cycle Assessment - Background Document to the International Reference Life Cycle Data System (ILCD)*. Italy.
- Everaert, G., Van Cauwenberghe, L., De Rijcke, M., Koelmans, A. A., Mees, J., Vandegehuchte, M., & Janssen, C. R. (2018). Risk assessment of microplastics in the ocean: Modelling approach and first conclusions. *Environmental Pollution*. <https://doi.org/10.1016/j.envpol.2018.07.069>
- Fantke, P., Aurisano, N., Bare, J., Backhaus, T., Bulle, C., Chapman, P. M., ... Hauschild, M. (2018). Toward harmonizing ecotoxicity characterization in life cycle impact assessment. *Environmental Toxicology and Chemistry*, *37*(12), 2955–2971. <https://doi.org/10.1002/etc.4261>
- Fantke, P., Bijster, M., Guignar, C., Hauschild, M., Huijbregts, M., Jolliet, O., ... Zelm, R.

- van. (2017). *USEtox 2.0 : documentation (Version 1.1)* (Version 1.).  
<https://doi.org/10.11581/DTU:00000011>
- Fantke, P., Huijbregts, M., Margni, M., Hauschild, M., Jolliet, O., McKone, T., ... Meent, D. van de. (2015). USEtox 2.0 User Manual (v2). In *USEtox.org*.
- Ferreira, J. V. R. (2004). *Análise De Ciclo De Vida De Produtos*.  
<https://doi.org/10.1121/1.3523339>
- Frydkjær, C. K., Iversen, N., & Roslev, P. (2017). Ingestion and Egestion of Microplastics by the Cladoceran *Daphnia magna*: Effects of Regular and Irregular Shaped Plastic and Sorbed Phenanthrene. *Bulletin of Environmental Contamination and Toxicology*.  
<https://doi.org/10.1007/s00128-017-2186-3>
- Furtado, J. M. dos S. (2014). *Comparação de Métodos e Ferramentas de Análise de Impacto de Ciclo de Vida, aplicados a processos químicos alternativos*. 87. Retrieved from [https://fenix.tecnico.ulisboa.pt/downloadFile/395146463140/Dissertacao Jose Furtado 63596.pdf](https://fenix.tecnico.ulisboa.pt/downloadFile/395146463140/Dissertacao%20Jose%20Furtado%2063596.pdf)
- Galafassi, S., Nizzetto, L., & Volta, P. (2019). Plastic sources: A survey across scientific and grey literature for their inventory and relative contribution to microplastics pollution in natural environments, with an emphasis on surface water. *Science of the Total Environment*. <https://doi.org/10.1016/j.scitotenv.2019.07.305>
- Gandhi, N., Diamond, M. L., Van De Meent, D., Huijbregts, M. A. J., Peijnenburg, W. J. G. M., & Guinée, J. (2010). New method for calculating comparative toxicity potential of cationic metals in freshwater: Application to Copper, Nickel, and Zinc. *Environmental Science and Technology*. <https://doi.org/10.1021/es903317a>
- GESAMP. (2015). Sources, fate and effects of MP in the marine environment. *Journal Series GESAMP Reports and Studies*.
- Gigault, J., Halle, A. ter, Baudrimont, M., Pascal, P. Y., Gauffre, F., Phi, T. L., ... Reynaud, S. (2018). Current opinion: What is a nanoplastic? *Environmental Pollution*.  
<https://doi.org/10.1016/j.envpol.2018.01.024>
- Gironi, F., & Piemonte, V. (2011). Bioplastics and petroleum-based plastics: Strengths and weaknesses. *Energy Sources, Part A: Recovery, Utilization and Environmental Effects*. <https://doi.org/10.1080/15567030903436830>
- Goedkoop, M. (1995). *The Eco-indicator 95: Final Report NOH Report 9523*.  
<https://doi.org/10.3370/lca.3.32>
- Goedkoop, M., Heijungs, R., Huijbregts, M., Schryver, A. De, Struijs, J., & Zelm, R. Van.

- (2008). ReCiPe 2008 - A life cycle impact assessment method which comprises harmonised category indicators at the midpoint and the endpoint level. In *Ruimte en Milieu*. <https://doi.org/10.029/2003JD004283>
- Goedkoop, M., & Spriensma, R. (2000). The Eco-Indicator 99 - A Damage Oriented Method for Life Cycle Assessment, Methodology Report. In *PRé Consultants*.
- Guinée, J. B., Gorrée, M., Heijungs, R., Huppes, G., Kleijn, R., Wegener Sleeswijk, A., ... Huijbregts, M. a. J. (2001). Life cycle assessment: An operational guide to the ISO standards. In *III: Scientific background*. [https://doi.org/10.1300/J082v38n04\\_05](https://doi.org/10.1300/J082v38n04_05)
- Hahladakis, J. N., Velis, C. A., Weber, R., Iacovidou, E., & Purnell, P. (2018). An overview of chemical additives present in plastics: Migration, release, fate and environmental impact during their use, disposal and recycling. *Journal of Hazardous Materials*. <https://doi.org/10.1016/j.jhazmat.2017.10.014>
- Hidalgo-Ruz, V., Gutow, L., Thompson, R. C., & Thiel, M. (2012). Microplastics in the marine environment: A review of the methods used for identification and quantification. *Environmental Science and Technology*. <https://doi.org/10.1021/es2031505>
- Horton, A. A., Walton, A., Spurgeon, D. J., Lahive, E., & Svendsen, C. (2017). Microplastics in freshwater and terrestrial environments: Evaluating the current understanding to identify the knowledge gaps and future research priorities. *Science of the Total Environment*. <https://doi.org/10.1016/j.scitotenv.2017.01.190>
- Hüffer, T., Weniger, A. K., & Hofmann, T. (2018). Sorption of organic compounds by aged polystyrene microplastic particles. *Environmental Pollution*. <https://doi.org/10.1016/j.envpol.2018.01.022>
- Jambeck, J. R., Geyer, R., Wilcox, C., Siegler, T. R., Perryman, M., Andrady, A., ... Law, K. L. (2015). Plastic waste inputs from land into the ocean. *Science*. <https://doi.org/10.1126/science.1260352>
- JRC European commission. (2011). ILCD Handbook: Recommendations for Life Cycle Impact Assessment in the European context. In *Vasa*. <https://doi.org/10.278/33030>
- Karaski, T. U., Ribeiro, F. de M., Pereira, B. R., & Arteaga, L. P. S. de. (2016). *Embalagem e Sustentabilidade Desafios e orientações no contexto da Economia Circular*.
- Katsnelson, A. (2015). News Feature: Microplastics present pollution puzzle. *Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America*.

- <https://doi.org/10.1073/pnas.1504135112>
- Koelmans, A. A., Besseling, E., & Shim, W. J. (2015). Nanoplastics in the aquatic environment. Critical review. In *Marine Anthropogenic Litter*.  
[https://doi.org/10.1007/978-3-319-16510-3\\_12](https://doi.org/10.1007/978-3-319-16510-3_12)
- Lachmann, F. A. (2016). *Marine Plastic Debris – Flows , Mitigation Measures and Environmental Evaluation*. 44.
- Länge, R., Hutchinson, T. H., Scholz, N., & Solbé, J. (1998). Analysis of the ECETOC Aquatic Toxicity (EAT) database. II - Comparison of acute to chronic ratios for various aquatic organisms and chemical substances. *Chemosphere*.  
[https://doi.org/10.1016/S0045-6535\(97\)10024-8](https://doi.org/10.1016/S0045-6535(97)10024-8)
- Larsen, H. F., & Hauschild, M. (2007). GM-troph: A low data demand ecotoxicity effect indicator for use in LCIA. *International Journal of Life Cycle Assessment*.  
<https://doi.org/10.1065/lca2006.12.288>
- Lee, H., Byun, D. E., Kim, J. M., & Kwon, J. H. (2018a). Desorption modeling of hydrophobic organic chemicals from plastic sheets using experimentally determined diffusion coefficients in plastics. *Marine Pollution Bulletin*.  
<https://doi.org/10.1016/j.marpolbul.2017.11.032>
- Lee, H., Byun, D. E., Kim, J. M., & Kwon, J. H. (2018b). Desorption of Hydrophobic Organic Chemicals from Fragment-Type Microplastics. *Ocean Science Journal*.  
<https://doi.org/10.1007/s12601-018-0051-x>
- Lee, H., Shim, W. J., & Kwon, J. H. (2014). Sorption capacity of plastic debris for hydrophobic organic chemicals. *Science of the Total Environment*.  
<https://doi.org/10.1016/j.scitotenv.2013.08.023>
- Mato, Y., Isobe, T., Takada, H., Kanehiro, H., Ohtake, C., & Kaminuma, T. (2001). Plastic resin pellets as a transport medium for toxic chemicals in the marine environment. *Environmental Science and Technology*. <https://doi.org/10.1021/es0010498>
- Mei, W., Chen, G., Bao, J., Song, M., Li, Y., & Luo, C. (2020). Interactions between microplastics and organic compounds in aquatic environments: A mini review. *Science of the Total Environment*. <https://doi.org/10.1016/j.scitotenv.2020.139472>
- Mendes, N. C., Bueno, C., & Ometto, A. R. (2015). Avaliação de Impacto do Ciclo de Vida: revisão dos principais métodos. *Production*. <https://doi.org/10.1590/0103-6513.153213>
- Mohanty, A. K., Misra, M., & Drzal, L. T. (2005). Natural fibers, biopolymers, and

- biocomposites. In *Natural Fibers, Biopolymers, and Biocomposites*.  
<https://doi.org/10.1201/9780203508206.ch1>
- Moore, C. J., Moore, S. L., Leecaster, M. K., & Weisberg, S. B. (2001). A comparison of plastic and plankton in the North Pacific Central Gyre. *Marine Pollution Bulletin*.  
[https://doi.org/10.1016/S0025-326X\(01\)00114-X](https://doi.org/10.1016/S0025-326X(01)00114-X)
- Moreira, N. R. P. (2013). *Estudo de várias propriedades mecânicas do polidimetilsiloxano ( PDMS ) usado em dispositivos biomédicos*. 78.
- Pando, C. R. F. (2019). Estudos de Solubilidade e Coeficientes de Partição de Compostos de Relevância Ambiental Agradecimentos. *Doctoral Dissertation*.
- Parron, Lucilia Maria; Garcia, J. R. O. (2015). Serviços ambientais: conceitos, classificação, indicadores e aspectos correlatos. *Serviços Ambientais Em Sistemas Agrícolas e Florestais Do Bioma Mata Atlântica*.
- Paschke, A., Popp, P., & Schüürmann, G. (1998). Water solubility and octanol/water-partitioning of hydrophobic chlorinated organic substances determined by using SPME/GC. *Fresenius' Journal of Analytical Chemistry*, 360(1), 52–57.  
<https://doi.org/10.1007/s002160050641>
- Payet, J. (2005). Assessing toxic impacts on aquatic ecosystems in LCA. *International Journal of Life Cycle Assessment*. <https://doi.org/10.1065/lca2005.09.003>
- Piatti, T. M., & Rodrigues, R. A. F. (2005). *Plásticos: características, usos, produção e impactos ambientais* (p. 51). p. 51. Retrieved from  
[http://www.usinaciencia.ufal.br/multimedia/livros-digitais-cadernos-tematicos/Plasticos\\_caracteristicas\\_usos\\_producao\\_e\\_impactos\\_ambientais.pdf](http://www.usinaciencia.ufal.br/multimedia/livros-digitais-cadernos-tematicos/Plasticos_caracteristicas_usos_producao_e_impactos_ambientais.pdf)
- Rosenbaum, R. K., Bachmann, T. M., Gold, L. S., Huijbregts, M. A. J., Jolliet, O., Juraske, R., ... Hauschild, M. Z. (2008). USEtox - The UNEP-SETAC toxicity model: Recommended characterisation factors for human toxicity and freshwater ecotoxicity in life cycle impact assessment. *International Journal of Life Cycle Assessment*.  
<https://doi.org/10.1007/s11367-008-0038-4>
- Royer, S. J., Ferrón, S., Wilson, S. T., & Karl, D. M. (2018). Production of methane and ethylene from plastic in the environment. *PLoS ONE*.  
<https://doi.org/10.1371/journal.pone.0200574>
- Saade, M. R., Silva, M. G., & Gomes, V. (2014). A Avaliação do Ciclo de Vida – ACV e a etapa de avaliação de impactos ambientais : considerações sobre o uso de diferentes métodos e seus reflexos nos resultados finais. *Natureza on Line*, 12, 109–116.

- Saidani, M., Yannou, B., Leroy, Y., Cluzel, F., & Kendall, A. (2019). A taxonomy of circular economy indicators. *Journal of Cleaner Production*.  
<https://doi.org/10.1016/j.jclepro.2018.10.014>
- Saouter, E., Aschberger, K., Fantke, P., Hauschild, M. Z., Bopp, S. K., Kienzler, A., ... Sala, S. (2017). Improving substance information in USEtox®, part 1: Discussion on data and approaches for estimating freshwater ecotoxicity effect factors. *Environmental Toxicology and Chemistry*. <https://doi.org/10.1002/etc.3889>
- Saouter, E., Aschberger, K., Fantke, P., Hauschild, M. Z., Kienzler, A., Paini, A., ... Sala, S. (2017). Improving substance information in USEtox®, part 2: Data for estimating fate and ecosystem exposure factors. *Environmental Toxicology and Chemistry*.  
<https://doi.org/10.1002/etc.3903>
- Serviço Social da Indústria. (2012). *Indústria da Transformação do Material Plástico: Manual de Segurança e Saúde no Trabalho*. Retrieved from  
<http://www.crq4.org.br/sms/files/manual-plastico.pdf>
- SINDIPLAST - Sindicato da Indústria de Material Plástico do Estado de São Paulo. (2020). Tipos de Plástico. Retrieved January 29, 2020, from  
<http://www.sindiplast.org.br/tipos-de-plasticos/>
- Stevens, C., Powell, D. E., Mäkelä, P., & Karman, C. (2001). Fate and effects of polydimethylsiloxane (PDMS) in marine environments. *Marine Pollution Bulletin*.  
[https://doi.org/10.1016/S0025-326X\(00\)00229-0](https://doi.org/10.1016/S0025-326X(00)00229-0)
- Talsness, C. E., Andrade, A. J. M., Kuriyama, S. N., Taylor, J. A., & Saal, F. S. V. (2009). Components of plastic: Experimental studies in animals and relevance for human health. *Philosophical Transactions of the Royal Society B: Biological Sciences*.  
<https://doi.org/10.1098/rstb.2008.0281>
- Teuten, E. L., Saquing, J. M., Knappe, D. R. U., Barlaz, M. A., Jonsson, S., Björn, A., ... Takada, H. (2009). Transport and release of chemicals from plastics to the environment and to wildlife. *Philosophical Transactions of the Royal Society B: Biological Sciences*. <https://doi.org/10.1098/rstb.2008.0284>
- Thompson, R. C. (2015). Microplastics in the marine environment: Sources, consequences and solutions. In *Marine Anthropogenic Litter*. [https://doi.org/10.1007/978-3-319-16510-3\\_7](https://doi.org/10.1007/978-3-319-16510-3_7)
- UNEP. (2016). Marine Plastic Debris and Microplastics Global lessons and research to inspire action and guide policy change. In *UNEP*.

- <https://doi.org/10.1017/CBO9781107415324.004>
- USEPA. (2020). USEPA EPI Suite™-Estimation Program Interface | Predictive Models and Tools for Assessing Chemicals under the Toxic Substances Control Act (TSCA). *USEPA*. Retrieved from <https://www.epa.gov/tsca-screening-tools/epi-suite™-estimation-program-interface#hardware>
- Venkatachalam, V., Spierling, S., Endres, H.-J., & Siebert-Raths, A. (2018). Integrating Life Cycle Assessment and Eco-design Strategies for a Sustainable Production of Bio-based Plastics. In *Designing Sustainable Technologies, Products and Policies*. [https://doi.org/10.1007/978-3-319-66981-6\\_54](https://doi.org/10.1007/978-3-319-66981-6_54)
- Verones, F., Hellweg, S., Antón, A., Azevedo, L. B., Chaudhary, A., Cosme, N., ... Huijbregts, M. A. J. (2020). LC-IMPACT: A regionalized life cycle damage assessment method. *Journal of Industrial Ecology*, *24*(6), 1201–1219. <https://doi.org/10.1111/jiec.13018>
- Villarrubia-Gómez, P., Cornell, S. E., & Fabres, J. (2018). Marine plastic pollution as a planetary boundary threat – The drifting piece in the sustainability puzzle. *Marine Policy*. <https://doi.org/10.1016/j.marpol.2017.11.035>
- Vince, J., & Hardesty, B. D. (2017). Plastic pollution challenges in marine and coastal environments: from local to global governance. *Restoration Ecology*. <https://doi.org/10.1111/rec.12388>
- Vinet, L., & Zhedanov, A. (2010). A “missing” family of classical orthogonal polynomials. *UNEP*. <https://doi.org/10.1088/1751-8113/44/8/085201>
- Wagner, M., & Lambert, S. (2018). Freshwater Microplastics. In *Handbook of Environmental Chemistry*. <https://doi.org/10.1007/978-3-319-61615-5>
- Woods, J. S., Veltman, K., Huijbregts, M. A. J., Verones, F., & Hertwich, E. G. (2016). Towards a meaningful assessment of marine ecological impacts in life cycle assessment. *Environment International*, 48–61.
- Zheng, Y., Yanful, E. K., & Bassi, A. S. (2005). A review of plastic waste biodegradation. *Critical Reviews in Biotechnology*. <https://doi.org/10.1080/07388550500346359>
- Ziccardi, L. M., Edgington, A., Hentz, K., Kulacki, K. J., & Kane Driscoll, S. (2016). Microplastics as vectors for bioaccumulation of hydrophobic organic chemicals in the marine environment: A state-of-the-science review. *Environmental Toxicology and Chemistry*. <https://doi.org/10.1002/etc.3461>

## **Apêndices**

## Apêndice A – Dados da substância

**Tabela A1: Informação auxiliar para determinação do KOC**

Tipo de substância	Valor
Neutra	2,25E-01
Ácida	1,44E+00
Básica	6,26E-01
Anfóteros	1,13E+00

Fonte: Seção 5.4.3 de Fantke et al. (2017).

**Tabela A2: Dados auxiliares**

Variável	Valor	Unidade	Descrição da variável	Observação
$C_{susp,w[S]}$	0,015 – água doce	kg.m <sup>-3</sup>	Concentração de matéria em suspensão na água doce e no mar continental e global	Conforme Tabela 10 de Fantke et al. (2017)
	0,005 – água do mar			
$C_{doc,w[S]}$	0,005 – água doce	kg.m <sup>-3</sup>	Concentração de carbono orgânico dissolvido (coloidal) em água doce e no mar continental e global	
	0,001 – água do mar			
$\rho_{sd,sl}$	2166,3	kg.m <sup>-3</sup>	Densidade mineral de sedimentos e solo	
$C_{biota,w[S]}$	0,001	kg.m <sup>-3</sup>	Concentração de biota em água doce e no mar continental e global	
$fr\_mCorg, susp, w[S]$	0,1	-	Fração de massa de carbono orgânico de matéria suspensa em água doce e no mar continental e global	
$fr\_mCorg, std, sl/sd$	0,02	-	Carbono em solo natural e agrícola continental e global	
$pKa, gain$	0	-	Constante de equilíbrio de perda de próton do composto original (pKa da reação de dissociação de ácido conjugado da base)	
$pKa, loss$	14	-	Constante de equilíbrio de perda de próton do ácido conjugado do composto original (pKa da reação de dissociação de ácido)	
$pH_w$	7	-	pH da água	
$cf_{DOC w,w}$	0,08	-	Fator de correção para coeficiente de partição octanol/água a fim de prever o coeficiente de partição DOC/água	
DOC	50000000	kg/l	Concentração de carbono orgânico dissolvido	Fantke et al. (2017)
POC	50000000	kg/l	Concentração de carbono orgânico particulado	

Fonte: Adaptado de Fantke et al. (2017).

**Tabela A3: Cálculos auxiliares**

Variável	Valor		Unidade	Descrição da variável	Observação
	PMDS	PE			
KDOC	-	-	L.kg <sup>-1</sup>	Coeficiente de partição de uma substância entre carbono orgânico dissolvido (coloidal) e água	Igual ao KDOC disponível nos dados de substância (Fantke et al., 2017) se não estiver disponível, Seção 5.4.7 de Fantke et al. (2017)
	2,98E-01	3,23E-01			
$K_{ow,app,pH7}$	1,18E-03	1,28E-03	-	Coeficiente de partição octanol/água aparente em pH neutro	se pKa,loss ≤ pKa,gain (Seção 5.4.2 de Fantke et al. (2017))
	3,72E+00	4,03E+00			se pKa,loss > pKa,gain (Seção 5.4.2 de Fantke et al. (2017))
$K_{ow,alt}$	1,18E-03	1,28E-03	-	Coeficiente de partição octanol/água de forma alternativa	Seção 5.4.7 de Fantke et al. (2017)
$K_d$	2,98E-01	7,32E-03	-	Coeficiente de partição sólidos adimensionais/ água de espécies originais	Equação 74 de Fantke et al. (2017)
$K_{d,alt}$	6,86E-03	1,69E-01	-	Coeficiente de partição sólidos adimensionais/ água de forma alternativa	Equação 79 de Fantke et al. (2017)
$K_{susp}$	1,58E-01	1,69E-02	L.kg <sup>-1</sup>	Coeficiente de partição sólidos em suspensão/água	Equação 73 de Fantke et al. (2017)
$fr_{mW}$	1,58E-02	1,00	-	Fração de espécies originais em água doce e salgada	Considerando que pKa,loss > pKa,gain: Equação 22 de Fantke et al. (2017)
$BAF_{dissolved.fish}$	8,00E+07	8,68E+07	L.kgfish <sup>-1</sup>	Fator de bioacumulação de uma substância em água	Equação 163 de Fantke et al. (2017)  BAF dissolvido utilizado no cálculo de uma das variáveis da Matriz K

Fonte: Adaptado de Fantke et al. (2017).

**Tabela A4: Fator de Bioconcentração – cálculos auxiliares e parâmetros *default***

Variável	Valor		Unidade	Descrição da variável	Observação
	PMDS	PE			
$BCF_{fish}$	9,62E-01	9,80E-01	L. kg <sup>-1</sup>	Fator de Bioconcentração	Equações disponíveis na Tabela 3 de Arnot & Gobas (2006)
$k_1$	27,93670036	30,17808107	L.d <sup>-1</sup> .kg <sup>-1</sup>	Constante de absorção branquial	
$\emptyset$	1,00E+00	1,00E+00	-	Fração de soluto biodisponível	
$k_2$	2,90E+01	3,08E+01	d <sup>-1</sup>	Constante de eliminação branquial	
$k_E$	3,16E-03	3,13E-03	d <sup>-1</sup>	Constante de egestão fecal	
$k_G$	0,005677887	0,005677887	d <sup>-1</sup>	Constante de crescimento	
$k_M$	0	0	d <sup>-1</sup>	Constante de biotransformação metabólica	
$E_W$	0,02299153	0,024836157	-	Eficiência de transferência química branquial	se $Kow \geq 0$ (Arnot & Gobas, 2006)
	0,006	0,006			se $Kow < 0$ (Arnot & Gobas, 2006)
$G_V$	2,430173183	2,430173183	L. d <sup>-1</sup>	Taxa de ventilação branquial	(Arnot & Gobas, 2006)
$G_F$	0,000015	0,000015	kg. d <sup>-1</sup>	Taxa de egestão fecal	
$E_D$	5,00E-01	5,00E-01	-	Eficiência de transferência química intestinal	
$K_{GB}$	8,43E-01	8,34E-01	kg. kg <sup>-1</sup>	Coefficiente de partição biota-intestinal	
$T$	21	21	°C	Temperatura média da água	

Fonte: Adaptado de (Arnot & Gobas, 2006).

## Apêndice B – Dados para Fator de Destino

**Tabela A5: Escala Continental**

Variáveis		Abrangência	Unidade	Valor
Área		Terra	km <sup>2</sup>	9,013E+06
Área		Mar	km <sup>2</sup>	9,866E+05
Área-fração		Água doce	-	3,000E-02
Área-fração		Solo natural	-	4,850E-01
Área-fração		Solo agrícola	-	4,850E-01
Área-fração		Outros solos	km	1,000E-20
Temperatura		-	°C	1,200E+01
Velocidade do vento de superfície		-	m.s <sup>-1</sup>	3,000E+00
Velocidade do vento acima da altura de mistura		-	m.s <sup>-1</sup>	6,645E+00
Taxa de chuva		-	mm.yr <sup>-1</sup>	7,000E+02
Profundidade		Água doce	m	2,50E+00
Fração	Descarga de água doce	Cont-global	-	0,000E+00
Fração	Escoamento	-	-	2,500E-01
Fração	Infiltração	-	-	2,500E-01
Erosão do solo		-	mm.yr <sup>-1</sup>	3,000E-02

Fonte: Adaptado de *Default USEtox*.

**Tabela A6: Escala Global**

Variáveis		Abrangência	Unidade	Valor
Irrigação		-	km <sup>3</sup>	4,211E+02
Área		Terra	km <sup>2</sup>	1,410E+08
Área		Mar	km <sup>2</sup>	3,290E+08
Área-fração		Água doce	-	3,000E-02
Área-fração		Solo natural	-	4,850E-01
Área-fração		Solo agrícola	-	4,850E-01
Área-fração		Outros solos	-	1,000E-20
Temperatura		-	°C	1,200E+01
Velocidade do vento de superfície		-	m.s <sup>-1</sup>	3,000E+00
Taxa de chuva		-	mm.yr <sup>-1</sup>	7,000E+02
Profundidade		Água doce	m	2,50E+00
Fração	Descarga de água doce	Cont-global	-	0,000E+00
Fração	Escoamento	-	-	2,500E-01
Fração	Infiltração	-	-	2,500E-01
Erosão do solo		-	mm.yr <sup>-1</sup>	3,000E-02

Fonte: Adaptado de *Default USEtox*.

**Tabela A7: Escala Urbana**

Variáveis	Abrangência	Unidade	Valor
Irrigação	-	km <sup>3</sup>	2,722E+03
Área	Terra	km <sup>2</sup>	2,400E+02
Área-fração	Área não pavimentada	-	6,667E-01

Fonte: Adaptado de *Default USEtox*.

**Tabela A8: População Humana**

Variáveis	Abrangência	Unidade	Valor
Área-fração	Área pavimentada	-	3,333E-01
População Humana	Mundo	-	5,761E+09

Fonte: Adaptado de *Default USEtox*.

**Tabela A9: Exposição**

Variáveis	Abrangência	Unidade	Valor
População humana	Continente	-	9,980E+08
	Urbano	-	2,000E+06
Taxa de respiração humana	Mundo + cont + urbano	m <sup>3</sup> /(person*day)	1,300E+01
Ingestão de água	Mundo + cont	l/(person*day)	1,40E+00
Produção acima do solo	Mundo	kg/(day*capita)	1,364E+00
	Continente	kg/(day*capita)	1,364E+00
Produção subterrânea	Mundo	kg/(day*capita)	1,117E+00
	Continente	kg/(day*capita)	1,117E+00
Carne	Mundo	kg/(day*capita)	9,492E-02
	Continente	kg/(day*capita)	9,492E-02
Produção diária	Mundo	kg/(day*capita)	2,368E-01
	Continente	kg/(day*capita)	2,368E-01
Peixe água doce	Mundo	kg/(day*capita)	1,128E-02

Fonte: Adaptado de *Default USEtox*.

**Tabela A10: Descrição**

Variáveis	Abrangência	Unidade	Valor
Peixes de água doce	Continente	kg/(day*capita)	1,128E-02
Peixes costeiros de água marinha	Mundo	kg/(day*capita)	3,605E-02
Peixes costeiros de água marinha	Continente	kg/(day*capita)	3,605E-02

Fonte: Adaptado de *Default USEtox*.

**Tabela A11: Resultados das variáveis da Matriz K utilizados no cálculo do Fator de Destino para os polímeros PMDS e PE**

Variáveis	Descrição das variáveis	Unidade	Resultado	
			PMDS	PE
SED.w1C.sd1C	Sedimentação para sedimento de água doce	m/s	2,97888E-14	2,94E-14
ADSORB.w1C.sd1C	Adsorção para sedimento de água doce	m/s	3,39E-10	3,13E-10
DEPTH.w1C	Compartimento de água doce de profundidade mista	m	2,5	2,5
DEPTH.w2C	Compartimento de água marinha de profundidade mista	m	100	100
RESUSPrate.sd1C	Taxa de Ressuspensão de sedimento de água doce	m/s	2,66E-10	2,66E-10
DESORB.sd1C.w1C	Dessorção de sedimento de água doce	m/s	3,42E-08	3,42E-08
DEPTH.sd1C	Compartimento de sedimento de água doce de profundidade mista	m	3,00E-02	3,00E-02
BURIAL.sd1C	Sedimentação por aterramento em sedimento de água doce	m/s	8,602E-11	8,602E-11
kdeg.sd1C	Transferência de sedimento de água doce por degradação		9,07E-03	2,02E-03
GROSSSEDrate.w1C	Taxa de sedimentação bruta de água doce	m/s	3,52E-10	3,52E-10
FRACs.sdC	Fração do volume de sólidos em sedimento		0,2	0,2
SUSP.w1C	Concentração de matéria suspensa em água doce	kg/m <sup>3</sup>	1,50E-02	1,50E-02
SUSP.w2C	Concentração de matéria suspensa em água do mar	kg/m <sup>3</sup>	5,00E-03	5,00E-03
SUSP.w2G	Concentração de matéria suspensa em água do mar	kg/m <sup>3</sup>	5,00E-03	5,00E-03
Kp.susp1C	Coefficiente de partição água/sólido em suspensão	L/kg	1,583E-02	1,690E-02
Kp	Coefficiente de partição de espécies originais - sólidos adimensionais/água	-	6,858E-03	7,322E-03
Kp.alt	Coefficiente de partição da forma alternativa - Sólidos adimensionais/água	-	0,158	0,169
Kp.sd1C	Coefficiente de partição em água doce - sedimento/água	L/kg	7,914E-03	8,449E-03
pKa chemical class	Classificação da constante de dissociação de ácido (Ka)		Neutro	Neutro
CORGsusp1.C	Fração de massa de carbono orgânico em matéria suspensa	-	0,1	0,1
CORG.sd1C	Fração de massa de carbono orgânico sedimento de água doce	-	0,05	0,05
CORG	Fração de massa padrão de carbono orgânico no solo / sedimento	-	0,02	0,02

Variáveis	Descrição das variáveis	Unidade	Resultado	
			PMDS	PE
FRw.w1C	Fração de químico dissolvido em água doce		1,23E-02	1,14E-02
FRorig.w1	Fração de espécies originais em água doce	-	0,9999998	0,9999998
FRorig.sd1	Fração de espécies originais em sedimento de água doce	-	0,9999998	0,9999998
SETTLvelocity.C	Definição de velocidade de Partículas Suspensas	m/s	2,89E-05	2,89E-05
NETsedrate.w1C	Taxa líquida de acumulação de sedimento na água doce	m/s	8,602E-11	8,602E-11
NETsedrate.w2C	Taxa líquida de acumulação de sedimento na água doce	m/s	1,75E-12	1,75E-12
FRACw.sdC	Fração de volume - água no sedimento	-	0,8	0,8
FRACs.sdC	Fração de volume - sólidos no sedimento	-	0,2	0,2
RHO.water	Densidade da água	kg/m <sup>3</sup>	1000	1000
RHO.sed	Densidade aparente do sedimento	kg/m <sup>3</sup>	1233,26	1233,26
RHOSolid	Densidade mineral de sedimento e solo	kg/m <sup>3</sup>	2166,3	2166,3
EROSION.s1C	Erosão do solo natural	m/s	9,513E-13	9,513E-13
EROSION.s2C	Erosão do solo agrícola	m/s	9,513E-13	9,513E-13
EROSION.C	Erosão do solo	mm/yr	3,000E-02	3,000E-02
AREAFRAC.s1C	Fração de área - solo natural	-	4,371E-01	4,371E-01
AREAFRAC.s2C	Fração de área - solo agrícola	-	4,372E-01	4,372E-01
AREAFRAC.w1C	Fração de área - água doce	-	2,704E-02	2,704E-02
AREAFRAC.w2C	Fração de área - água marinha	-	9,867E-02	9,867E-02
AREAFRAC.s2G	Fração de área - solo agrícola	-	1,392E-01	1,392E-01
AREAland.C	Área da terra	m <sup>2</sup>	9,013E+12	9,013E+12
AREAsea.C	Área do mar	m <sup>2</sup>	9,866E+11	9,866E+11
AREAland.G	Área global de terra	m <sup>2</sup>	1,410E+14	1,410E+14
AREAsea.G	Área global marinha	m <sup>2</sup>	3,290E+14	3,290E+14
SYSTEMAREA.U	Sistema urbano	m <sup>2</sup>	2,400E+08	2,400E+08
SYSTEMAREA.C	Sistema continental	m <sup>2</sup>	1,000E+13	1,000E+13
SYSTEMAREA.G	Sistema global	m <sup>2</sup>	4,600E+14	4,600E+14
PRODsusp.w1C	Produção autóctone de matéria suspensa em água doce	kg/s	8,574E+01	8,574E+01
PRODsusp.w2C	Produção autóctone de matéria suspensa na água marinha	kg/s	3,129E+02	3,129E+02
WATERflow.w1C.w2C	Fluxo de água doce continental para água marinha continental	m <sup>3</sup> /s	5,452E+04	5,452E+04
WATERflow.w2G.w2C	Fluxo de água marinha global para água marinha continental	m <sup>3</sup> /s	3,0741E+06	3,0741E+06
WATERflow.w2C.w2G	Fluxo da água marinha continental para o oceano global	m <sup>3</sup> /s	3,150E+06	3,150E+06

Variáveis	Descrição das variáveis	Unidade	Resultado	
			PMDS	PE
FRACs.s1C	Fração de volume - sólidos no solo natural	-	0,6	0,6
FRACs.s2C	Fração de volume - sólidos no solo agrícola	-	0,6	0,6
FRACnatsoil.C	Fração de solo natural	-	4,850E-01	4,850E-01
FRACagsoil.C	Fração de solo agrícola	-	4,850E-01	4,850E-01
FRACagsoil.G	Fração de solo agrícola	-	4,850E-01	4,850E-01
FRACa.s2C	Fração de volume de ar em solo agrícola	-	0,2	0,2
FRACw.s2C	Fração de volume de água em solo agrícola	-	0,2	0,2
FRACa.s1C	Fração de volume de ar em solo natural	-	0,2	0,2
FRACw.s1C	Fração de volume de água em solo natural	-	0,2	0,2
FRAC.w1C.w1G	Fração de água doce continental descarregada em água doce global	-	0,000E+00	0,000E+00
FRACfresh.C	Fração de água doce	-	3,000E-02	3,000E-02
FRACrun.s1C	Fração de volume de precipitação em solo natural escorrendo para as águas superficiais	-	2,500E-01	2,500E-01
FRACrun.s2C	Fração de volume de precipitação em solo agrícola escorrendo para águas superficiais	-	2,500E-01	2,500E-01
RAINflow.aC.w1C	Entrada de chuva na água doce continental	m <sup>3</sup> /s	6,002E+03	6,002E+03
RAINflow.aC.w2C	Entrada de chuva na água do mar continental	m <sup>3</sup> /s	2,190E+04	2,190E+04
WATERrun.s1C	Água escoada do solo natural	m <sup>3</sup> /s	2,426E+04	2,426E+04
WATERrun.s2C	Água escoada do solo agrícola	m <sup>3</sup> /s	2,426E+04	2,426E+04
RAINrate.C	Precipitação média	m/s	2,220E-08	2,220E-08
kwsd.water.wC	Coefficiente de Transferência de massa parcial	m/s	2,78E-06	2,78E-06
kwsd.sed.sdC	Coefficiente de Transferência de massa parcial	m/s	2,78E-08	2,78E-08
Ksdw1.C	Coefficiente de Partição sedimento/água adimensional água doce	-	0,803429008	8,037E-01
VOLUME.w1C	Volume do compartimento de água doce	m <sup>3</sup>	6,760E+11	6,760E+11
VOLUME.w2C	Volume do compartimento de água do mar	m <sup>3</sup>	9,866E+13	9,866E+13
TAU.w2C	Tempo de residência da água do mar na plataforma continental	s	31536000	31536000
VOLAT.w1C.aC	Volatilização de água doce	m/s	4,34E-09	4,00E-09
kaw.air.aC	Coefficiente de Transferência de massa parcial	m/s	1,21E-04	1,21E-04

Variáveis	Descrição das variáveis	Unidade	Resultado	
			PMDS	PE
kaw.water.wC	Coefficiente de Transferência de massa parcial	m/s	3,51E-07	1,21E-04
Kh.C	Coefficiente de Partição de ar/água adimensional de espécies originais	-	5,58E+01	3,51E-07
WINDspeed.C	Velocidade do vento	m/s	3,000E+00	1,32E+10
Kh	Coefficiente de Partição de gás/água adimensional de espécies originais	-	1,11E+02	3,000E+00
H0vap	Entalpia de vaporização	J/mol	50000	2,63E+10
H0sol	Entalpia de dissolução	J/mol	10000	50000
TEMP.C	Temperatura	K	2,850E+02	10000
IRRIGATION.w1C	Irrigação de água doce para solo agrícola	m/s	1,172E-10	2,850E+02
IRRIGATION.C	Irrigação	m <sup>3</sup>	4,211E+11	1,172E-10