

O Impacto do Iodeto na Formação de Trihalometanos

Joseph P. Gould
School of Civil Engineering
Georgia Institute of Technology
Atlanta GA 30332-0512

RESUMO

Este trabalho foi desenvolvido com o objetivo de se estudar os problemas relacionados aos subprodutos da desinfecção (DBPs), especialmente provenientes do iodeto. Esta área de estudo vem sendo negligenciada, devido a fatores como:

- . A concentração de iodeto na água fresca é de uma a duas vezes inferior à de brometo, o que sugere que os DBPs iodados podem não estar presentes ou com uma baixa frequência na água tratada para ingestão;

- . Devido à baixa força de ligação C-I, estes compostos são instáveis; e se formados, poderiam desaparecer rapidamente;

- . Não foram documentados efeitos adversos à saúde devido à exposição aos DBPs iodados.

Após estes estudos, observou-se que não se pode fazer afirmações, com veemência, sobre efeitos maléficos à saúde ocasionados pela exposição aos DBPs iodados.

INTRODUÇÃO

Todos os esforços estão sendo direcionados para o problema da produção de subprodutos da desinfecção (DBPs). Uma área que foi e continua sendo, quase que na totalidade negligenciada, é o impacto gerado naturalmente pelo iodeto sobre os produtos formados durante a cloração da água. Esta negligência não é, à primeira vista, completamente sem justificativa. Algumas razões racionais podem ser citadas para justificar a falta de pesquisa nesta área.

Por exemplo, enquanto o iodeto é onipresente na natureza, sua concentração em águas frescas é de uma a duas vezes inferior à de brometo. Isto sugere que os subprodutos iodados da desinfecção podem não estar presentes em concentrações significantes ou com uma baixa frequência na água tratada para ingestão.

- . Devido à baixa força de ligação C-I, estes compostos são instáveis; e se formados, poderiam desaparecer rapidamente;

- . Não foram documentados efeitos adversos à saúde devido à exposição aos DBPs iodados.

- . Os DBPs iodados representam um desafio analítico devido à sua instabilidade e não-disponibilidade de materiais de referência.

A proposta que segue apresenta uma justificativa para o estudo do impacto gerado pelo iodeto na natureza da formação e distribuição dos DBPs e promove um programa de pesquisa que irá combinar estudos laboratoriais controlados e investigações sobre as fontes naturais de água e água tratada para ingestão, que fornecerá esta elucidação.

Tabela 1. Concentrações de Iodeto em Águas Naturais.

Água	Conc. mg/L	Referência
Água do mar ($I^- + IO_3^-$)	0,055	1.2
Água Superficial do Rio Missouri	0,005	3
Água Subterrâneas do Rio Missouri	0,150	3
Campo Marinho Típico de Extração de Petróleo	40	4
Campo Marinho de Extração de Petróleo de Oklahoma	≥ 100	5

IODETO NA NATUREZA

Existe um consenso no que diz respeito à não abundância de iodeto na natureza. Com exceção ao astato, o iodeto é o halogênio que se encontra em menor quantidade na crosta terrestre. Enquanto seus baixos índices de abundância são refletidos nas concentrações medidas nas águas superficiais, as concentrações de iodeto podem sofrer grandes variações em águas naturais como consequência de fatores locais (tais fatores podem ocorrer comumente). Algumas concentrações típicas de iodeto medidas em águas naturais nos Estados Unidos são apresentadas na Tabela 1.

Como pode ser visto, a faixa de variação é extremamente elevada (5 ordens de magnitude) e sugere que a modesta transferência entre a água rica em iodeto e fontes adjacentes de água para ingestão pode acarretar um elevada concentração de iodeto na água para ingestão. Por exemplo, a intrusão de água do mar em costas aquíferas irá inevitavelmente resultar em uma elevada concentração de iodeto na água proveniente destas costas. A contaminação cruzada das águas subterrâneas com águas sub-superficiais ricas em iodeto pode acarretar drásticas elevações na concentração de iodeto. Deste modo, a suposição de que as águas empregadas para abastecimento estarão inevitavelmente livres de contaminação (suficiente) de iodeto ou imunes a esta contaminação não é segura.

PROCEDIMENTO DE REDOX DO IODETO

Enquanto é qualitativamente similar aos demais halogênios comumente encontrados nos DBPs, o iodeto difere significativamente do cloro e do bromo no que diz respeito aos índices iniciais quantitativos. Por exemplo, enquanto a monocloramina é incapaz de oxidar o brometo, esta é capaz de oxidar o iodeto. O significado deste fator na aplicação da cloraminação como meio de controle de DBPs é considerável, como será demonstrado posteriormente.

O iodo molecular participa mais diretamente da halogenação da matéria orgânica natural do que o cloro e o bromo. Este fato é consequência da baixa constante de equilíbrio (comparativamente) para formação de HOI através da reação do I_2 com a água ($\log K = -12,7$). $pH = 7$ e concentração total de iodo igual a $0,1 \mu M I_2$ representa aproximadamente 5% do iodo total em solução, enquanto a $1 \mu M$ de iodo total a proporção de iodo sob a forma de I_2 aumenta para 27%. As concentrações de cloro e bromo moleculares sob as mesmas condições são mínimas ($\leq 0,003\%$ de C_T).

Pouco se sabe sobre a química dos iodetos de nitrogênio, embora existam evidências de que estes compostos são extremamente instáveis. É provável que as interações deste halogênio com a matéria orgânica natural da água não sejam significantes.

OBSERVAÇÕES SOBRE OS DBPs IODADOS NAS ÁGUAS PARA INGESTÃO

Existem importantes observações sobre os DBPs iodados presentes na água tratada para ingestão. Por exemplo, Thomas, Weisner e Brass⁶ reportaram que nas Fases II e III do National Organics Reconnaissance Survey⁷, o dicloriodometano (CHCl_2I) foi observado em 64% das cidades amostradas nestas duas fases. Os autores ressaltaram que, apesar de não terem sido obtidos dados quantitativos, esta frequência excede à de bromofórmio nas mesmas amostras.

Bunn e colaboradores⁸ também citaram a presença de dicloriodometano na água para ingestão proveniente do Rio Missouri.

Glaze e colaboradores⁹ reportaram a presença de dicloriodometano, dibromiodometano (CHBr_2I) e clorobromiodometano (CHClBrI) na água para ingestão no norte do Texas.

Coleman e colaboradores¹⁰ identificaram alguns THMs iodados na água para ingestão durante a análise de compostos orgânicos voláteis em cinco amostras da mesma.

Hansson, et al.¹¹ reportou um sério incidente relacionado à problemas de sabor na água para ingestão em Kalgoorlie, na Austrália. Ao realizar as análises, os pesquisadores identificaram cinco THMs iodados e concluíram que o que mais contribuiu para o problema de sabor foi o iodofórmio (CHI_3), que foi detectado em níveis superiores a 5 $\mu\text{g/L}$. Interessante é que os pesquisadores atribuíram este elevado grau de incorporação de iodo ao uso da cloraminação, que favoreceu uma maior oxidação do iodeto (se comparado com o brometo), devido ao baixo poder oxidante da monoclaramina quando comparado com o HOCl. Um fator primordial, mas não citado, que acarretou a incorporação substancial de iodo foi a presença de níveis significantes de iodeto nas fontes de água.

Pode-se observar claramente que os trihalometanos iodados não são raros na água tratada para ingestão e podem alcançar níveis intoleráveis. O pequeno número de trabalhos que relatam sua ocorrência é consequência de simples falhas dos pesquisadores desta área (e não da raridade destes compostos). Este fato sugere pesquisas sistemáticas sobre as condições de controle da formação e concentrações e análises mínimas da fonte e água para ingestão, com ênfase para os riscos relacionados à contaminação por estes compostos.

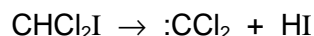
Tabela 2. Energias de Ligação Carbono-Halogênio¹²

Ligação	Energia, kJ
C-F	427
C-Cl	326
C-Br	272
C-I	238

ESTABILIDADE E RISCOS POTENCIAIS À SAÚDE

Estes assuntos, embora não pareçam relacionados, podem estar intimamente ligados. Os compostos iodados alifáticos, tais como metanos iodados, são classicamente instáveis. Isto é consequência da baixa energia de ligação C-I, quando comparada com as relativas aos demais halogênios (Tabela 2). Esta energia é uma medida da facilidade com a qual a ligação pode ser quebrada. Tipicamente, a ligação C-I é uma das mais fracas existentes entre os compostos orgânicos. O iodo é classificado como um excelente “grupo de partida”. Este processo pode ser catalizado ou resultar de processos fotoquímicos com a quebra da ligação como consequência do impacto do fóton. Hine¹² reportou que a hidrólise catalítica não é um processo significativo em valores de pH próximos ao neutro, o que sugere que o processo fotoquímico possa ser o dominante na água tratada para ingestão. Entretanto, como a água tratada normalmente fica a maior parte do tempo dentro sistemas fechados e escuros (trajeto usina de tratamento – usuário), a degradação fotoquímica dos DBPs iodados virtualmente não ocorre. Este certamente é o caso que ocorreu em Kalgoorlie, onde os THMs iodados se mantiveram durante todo o tempo (percorreram centenas de milhas). Em qualquer evento, como ocorre com a maioria das águas tratadas, qualquer DBP iodado que saia da planta de tratamento tem grande chance de alcançar as residências dos usuários.

O modo de degradação dos DBPs iodados é amplo para se garantir qualquer efeito relativo à saúde humana. Em estudos com THMs iodados, Hine¹² reportou que a degradação destes compostos acarreta a eliminação de moléculas de HI e a formação de carbonos divalentes conhecidos como carbenos ou metilenos. Os carbenos são extremamente reativos



estando disponíveis para realizar duplas ligações (C-C). Este potencial reativo sugere a possibilidade de ocorrerem interações entre intermediários reativos dos carbenos e moléculas biologicamente ativas, tais como ácidos nucleicos e enzimas, com consequências desconhecidas.

ESTUDOS LABORATORIAIS SOBRE A FORMAÇÃO DE THM IODADOS

Desconsiderando os estudos da química orgânica clássica, pesquisas sobre a formação de DBPs iodados sob as condições normais às quais a água é exposta quando tratada são um pouco mais extensivas do que os estudos atuais sobre a ocorrência destes compostos.

Bunn⁸, quando detectou dicloriodometano na água tratada do Rio Missouri, adicionou 1 mg/L de iodeto à água, seguido de HOCl e reportou um conseqüente decréscimo na formação de clorofórmio, junto com a formação de dicloriodometano, clorodiodometano (CHClI₂) e iodofórmio.

Rickabaugh e Kinman¹³ estudaram o uso do iodo como uma alternativa (em substituição ao cloro) como desinfetante. Foi detectada uma significativa redução nos níveis de TTHM formados. Não houve esforço para explicar este fenômeno. Uma vez que não foi adicionado HOCl, a inclusão do cloro nos trihalometanos é intrigante. Este fato pode ser

consequência de processos complexos associados com a instabilidade da ligação C-I; mas na falta de detalhes experimentais, a interpretação destes resultados é impossível.

Gould, Giabbai e Kim¹⁴ conduziram estudos sobre a formação de THMs iodados na presença de HOCl, brometo e iodeto, empregando como precursor o 2,4,6-trihidroxiacetofenona (TAP). Estes estudos, enquanto conduzidos com concentrações superiores às encontradas na água em condições normais, foram valiosos na definição dos procedimentos gerais destes sistemas e no estabelecimento de parâmetros analíticos.

Estudos similares, mas mais extensivos, foram conduzidos por Gould e Blount¹⁵. Nestes estudos, foram utilizadas as substâncias húmicas do Rio Suwanee como precursores. Além disso, este estudo estabeleceu uma metodologia analítica adicional que permite o desenvolvimento de dados analíticos confiáveis sem a necessidade de se empregar padrões de referência puros.

MATERIAIS E MÉTODOS

Iodeto de Potássio e Brometo de Sódio grau reagente foram empregados. O controle do pH foi realizado através do uso de sais de fosfato ou bicarbonato de sódio apropriados. O Chlorox® comercial foi padronizado iodometricamente e empregado como fonte de cloro. A água utilizada foi deionizada e filtrada em carbono. Sua demanda por cloro foi inferior a 0,5 mg/L (como Cl₂).

As substâncias húmicas empregadas foram produzidas por concentração em osmose reversa a partir da água do Rio Suwanee à uma concentração de carbono de 2.800 mg/L. Este material é a melhor característica da matéria orgânica natural aquática.

Os THMs contendo iodo foram preparados em misturas pelo refluxo de THMs contendo bromo com iodeto na presença de carbonato de sódio. Sob estas condições, ocorre a substituição nucleofílica do bromo pelo iodo, gerando uma mistura de vários possíveis THMs iodados. Além disso, o tratamento do clorodibromometano (desta maneira) irá produzir uma mistura de CHClBrI e CHClI₂.

Os níveis destes materiais foram estimados considerando o fato de que a intensidade iônica gerada pelo impacto eletrônico na espectrometria de massa pode ser estimada para os compostos relacionados com bom grau de precisão e exatidão, baseado nos parâmetros estruturais. Esta técnica favorece a descoberta de Lampe, Franklin e Field¹⁶, que afirma que a intensidade gerada pelo íon é uma simples função linear da seção cruzada de captura de elétron, que é por si só uma função linear da polarizabilidade da molécula. A polarizabilidade é diretamente proporcional à refratividade molar do composto (MR), como foi demonstrado por Pauling e Pressman¹⁷. Além disso, o fluxo iônico para um composto pode ser estimado como uma simples função linear da refratividade molar, como na equação 1. Nesta equação, λ é o fluxo de íons e a e b são constantes. MR pode ser rapidamente determinado para qualquer dos THMs empregando o grupo de valores MR apresentados por Eisenlohr¹⁸.

$$\lambda = a*MR + b \quad (1)$$

Aplicando a cromatografia gasosa (GC/MS) às soluções padrão dos quatro cloro/bromo THMs e iodofórmio, que é o único THM iodado prontamente disponível, a relação entre λ e MR foi estabelecida e os valores de a e b foram obtidos por regressão. Os valores de λ foram então estimados para os THMs iodados tendo como base as refratividades molares

calculadas. Em todos os casos, os valores de λ foram normalizados para quantidades molares unitárias dos respectivos THMs. A mistura sintética dos THMs iodados foi então utilizada para se obter as curvas de calibração (purge and trap calibration curves) para todos os seis THMs iodados, em faixas condizentes com as situações atuais de tratamento de água. Em estudos recentes, a Equação 1 foi calibrada empregando-se nove halometanos, incluindo-se os quatro clorobromometanos e iodofórmio. Os valores medidos para a e b foram, respectivamente, $5,03 \pm 0,22$ megaunidades de área por nanomole e $-76,57 \pm 6,37$ megaunidades de área.

Todas as análises de trihalometanos foram realizadas utilizando-se o cromatógrafo a gás Hewlett Packard 4460 equipado com um detector seletivo de massa e um purge and trap type sample concentrator.

RESULTADOS E DISCUSSÃO

Elevadas Concentrações de Carbono: Séries de estudos foram conduzidas com elevados níveis de NOM (TOC = 56 mg/L) e elevadas concentrações de HOCl, brometo e iodeto. As reações foram realizadas à 20°C, no escuro por um período de 24 horas, a um pH igual a 7,2. Foram desenvolvidos um total de 24 estudos. Os resultados típicos deste estudo são apresentados na Figuras 1 – 6. Certas tendências óbvias são aparentes. A inclusão do iodeto gera a redução dos níveis de THMs produzidos, quando comparados com as análises envolvendo HOCl e brometo, mas não iodeto. Pode-se notar também que a adição de amônia (cloraminação), como era esperado, reduziu a formação de THM, no geral; entretanto, também era esperado o aumento na tendência de formação de múltiplos THMs iodados, quando comparado com o cloro somente.

No esforço de colocar estes dados numa estrutura quantitativa, foram conduzidas múltiplas análises de regressão empregando concentrações milipolares de HOCl, Br⁻ e I⁻ como as variáveis independentes e os TTHMs em concentrações de μM . Foram obtidas as seguintes relações.

Para C-X, com HOCl sozinho:

$$\ln TTHMs = 1.166 + 0.457*[HOCl] - 0.111*[Br^-] - 0.245*[I^-] \quad (2)$$

Para C-N, onde o HOCl foi adicionado primeiro seguido de 10 mM NH₄Cl (após um minuto):

$$\ln TTHMs = 0.955 + 0.412*[HOCl] - 0.062*[Br^-] - 0.818*[I^-] \quad (3)$$

Para N-C, onde o HOCl foi adicionado após o NH₄Cl::

$$\ln TTHMs = -1.171 + 0.554*[HOCl] + 0.130*[Br^-] - 0.121*[I^-] \quad (4)$$

Comparações entre os valores de TTHMs calculados e medidos como os derivados destas equações são típicos aos dados plotados na Figura 7. Como pode ser visto, estes resultados são coerentes. Deves-se admitir que alguns dados plotados são empíricos. Entretanto, estes dados são amplamente empregados para retratar as tendências destes sistemas. Claramente, em todos os casos, a presença do iodeto tende a reduzir a formação de TTHM, como ocorre com a adição de amônia, especialmente quando é adicionado antes do HOCl.

Surpreendentemente, não foram obtidas correlações óbvias entre a composição da solução e o grau de incorporação de iodo na mistura de TTHM.

Níveis da Água para Ingestão: Uma série de estudos foi concluída empregando índices de carbono NOM iguais à 5,6 mg/L, adição de HOCl no nível de 5 mg/L como Cl₂, brometo a 0, 0,1 e 1 mg/L e iodeto a 0, 0,01, 0,1, 1 e 10 mg/L. O pH da solução foi de 8,0-8,4 e o tempo de reação igual a 24 horas. As análises destes resultados estão incompletas mas estudo dos dados referentes à concentração apresentados na Tabela 3, demonstrou claramente que, enquanto os níveis de iodeto eram inferiores a 10 µg/L, houve uma incorporação significativa de iodeto nos TTHMs. De fato, o CHCl₂I, foi um dos THMs mais comumente observados em soluções às quais não se adicionou iodeto. Este fato é decorrente da presença do iodeto e alguns brometos no Rio Suwanee.

Outro ponto interessante é o comportamento incomum das análises contendo um mg/L de iodeto. Em todos os 3 casos, a formação de TTHM foi reduzida notavelmente. Este fato pode ser consequência da complexa química do iodo. Nada mais específico pode ser concluído neste momento.

Reatividade dos Trihalometanos Iodados: Como foi indicado anteriormente, uma das propriedades interessantes dos iodocarbonos é facilidade com a qual a ligação C-I é quebrada, gerando intermediários reativos. No teste deste processo, foi adicionado 100 mg/L de ciclohexeno à água seguido por 10 mg/L de mistura contendo CHCl₂I, CHClI₂ e CHClBrI. Esta solução foi mantida no escuro por 7 dias e amostrada diariamente para a realização da análise de cromatografia gasosa. As Figuras 8-10 são os RICs obtidos inicialmente, um dia durante a análise e em 7 dias. Como pode ser visto, as modificações começam a ocorrer bem no início do processo e a mistura vai tornando-se complexa com o passar dos dias. As misturas contendo significantes concentrações de produtos oxidantes tais como ciclohexenol e ciclohexenona e significativos níveis de espécies halogenadas, como por exemplo o diclorobicloheptano, ataca mais espécies com estruturas incertas do que as indicadas pelas massas espectrais (Figuras 11-13).

Obviamente, estes compostos são muito ativos, podendo se suspeitar de sua interação com compostos bioquímicos, tais como proteínas e ácidos nucleicos.

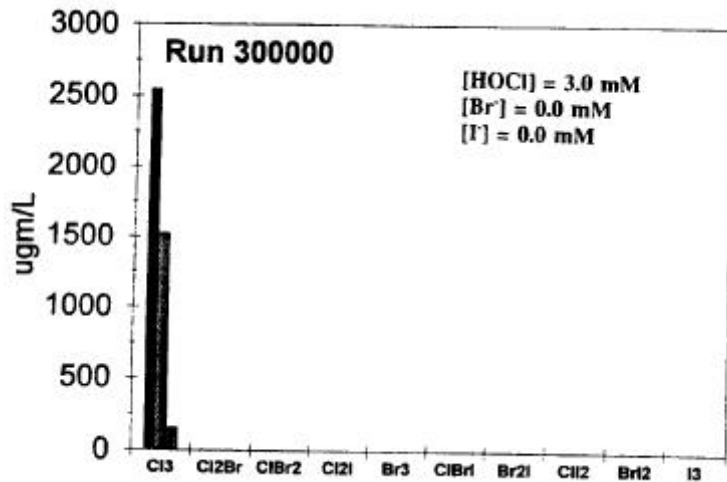
CONCLUSÕES

A presença de iodeto na água natural provavelmente contribui para a formação de THMs contendo iodo, e outros DBPs iodados. Enquanto presente em concentrações típicas, foi observado, em laboratório, significativa formação de THMs iodados. Além disso, o iodeto afeta o processo de formação dos TTHMs, que é alterado pelo uso de amônia em conjunto com o cloro.

A interação dos THMs iodados com um simples resíduo, ciclohexeno, mostra a complexa e extensiva reatividade destes compostos. Há a possibilidade de ocorrerem interações similares com compostos bioquímicos, não podendo ser descartadas consequências relacionadas à saúde.

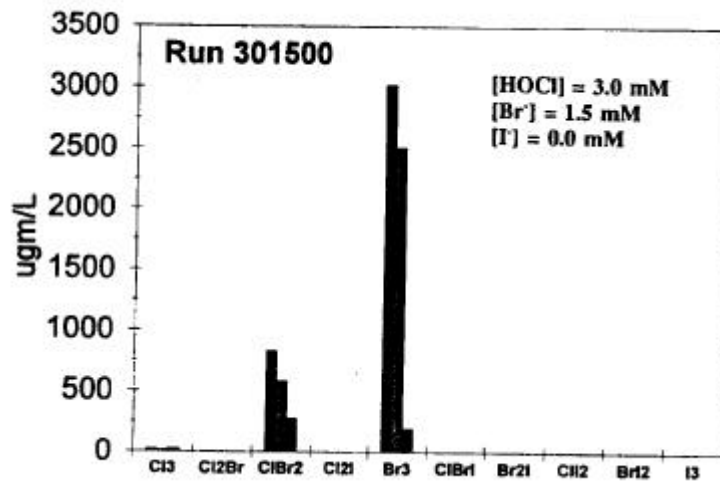
REFERÊNCIAS

1. Handbook of Chemistry and Physics, 53 rd. Edition. Published by the Chemical Rubber Company, Cleveland, Ohio (1973).
2. Wong, G.T.F. "The Marine Geochemistry of Iodine." *Reviews in Aquatic Sciences* 4, 45-73 (1991).
3. Feder, G.L. Geochemical Survey of Missouri: Geochemical Survey of Waters of Missouri. Professional Paper 954-E, U.S. Geological Survey, Washington, D.C. (1979).
4. Collins, A.G., Zelinski, W.P. and Pearson, C.A. "Bromide and Iodide in Oilfield Brines in Some Tertiary and Cretaceous Formations in Mississippi and Alabama." Report of Investigations No. 6959, U.S. Bureau of Mines, U.S. Department of the Interior, Washington, D.C. (1967).
5. Arndt, R.H. and Mankin, C.J. "Minerals in the Economy of Oklahoma." State Mineral Profiles of the U.S. Bureau of Mines, U.S. Department of the Interior, Washington, D.C. (1979).
6. Thomas, R.F., Weisner, M.J. and Brass, H.J. "The Fifth Trihalomethane: Dichloriodomethane, Its Stability and Occurrence in Chlorinated Drinking Water." *Water Chlorination, Environmental Impact and Health Effects* 3, 161-168 (1980).
7. Symons, J.M., Bellar, T.A., Carswell, J.K., DeMarco, J., Kropp, K.L., Robeck, G.G., Seeger, D.R., Slocum, C.J., Smith, B.L. and Stevens, A.A. "National Organics Reconnaissance Survey for Halogenated Organics." *J. Amer. Water Works Assn.* 67, 634-647 (1975).
8. Bunn, W.W., Haas, B.B., Deane, E.R. and Kloepfer, R.D. "Formation of Trihalomethanes by Chlorination of Surface Water." *Environ. Letters* 10, 205-213 (1975).
9. Glaze, W.H., Henderson, J.E. and Smith, G. "Analysis of New Chlorinated Compounds Formed by Chlorination of Municipal Waters." *Water Chlorination, Environmental Impact and Health Effects* 1, 153-158 (1975).
10. Coleman, W.M., Lingg, R.D., Melton, R.G. and Kopfler, F.C. "The Occurrence of Volatile Organics in Five Drinking Water Supplies Using Gas Chromatography/Mass Spectrometry." In Identification and Analysis of Organic Pollutants in Environmental Waters, L. Keith, Editor. Published by Ann Arbor Scientific Publishers, Ann Arbor, Michigan. pp 305-327 (1976).
11. Hansson, R.C., Henderson, M.J., Jack, P. and Taylor, P.D. "Iodoform Taste Complaints in Chloramination." *Water Res.* 21, 1265-1271 (1987).
12. Hine, J. "Physical Organic Chemistry." 2nd Edition. McGraw-Hill Book Company, Inc. (1962).
13. Rickabaugh, J. and Kinman, R.N. "Trihalomethane Formation from Iodine and Chlorine Disinfection of Ohio River Water." *Water Chlorination, Environmental Impact and Health Effects* 2, 583-591 (1978).
14. Gould, J.P., Giabbai, M. and Kim, J.-S. "Formation of Iodinated Trihalomethanes." *Water Chlorination, Environmental Impact and Health Effects* 5, 923-936 (1985).
15. Blount, M.L. "The formation of Iodinated Trihalomethanes as a Function of Precursor and Type of Chlorine Treatment." Special Research Problem Report Submitted to the School of Civil Engineering of the Georgia Institute of Technology (1990).
16. Lampe, F.W., Franklin, J.L. and Field, F.H. "Cross Sections for Ionizations by Electrons." *J. Amer. Chem. Soc.* 79, 6129-6132 (1957).
17. Pauling, L. and Pressman, D. *J. Amer. Chem. Soc.* 67, 1003 (1945).
18. Eisenlohr, F. "A New Calculation of Atomic Refractions." *Z. Physik Chem.* 75, 585-607 (1910).



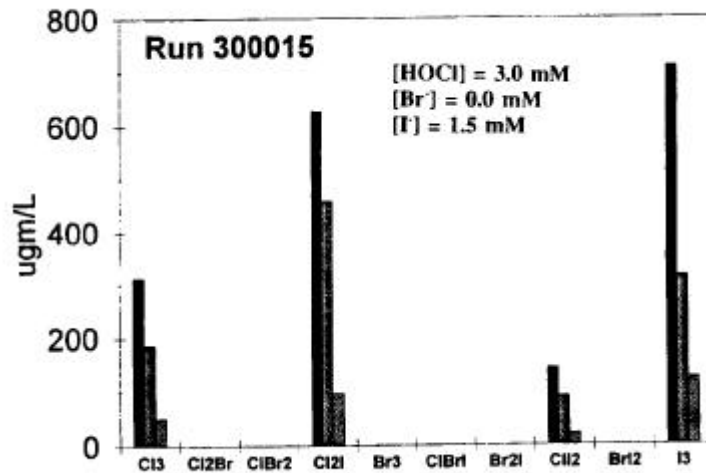
Legenda: Run = Corrida Cromatográfica.
NOM = Carbono Orgânico Total (56 mg/L)

Figura 1. Distribuição de THM para elevado NOM na corrida 300000.



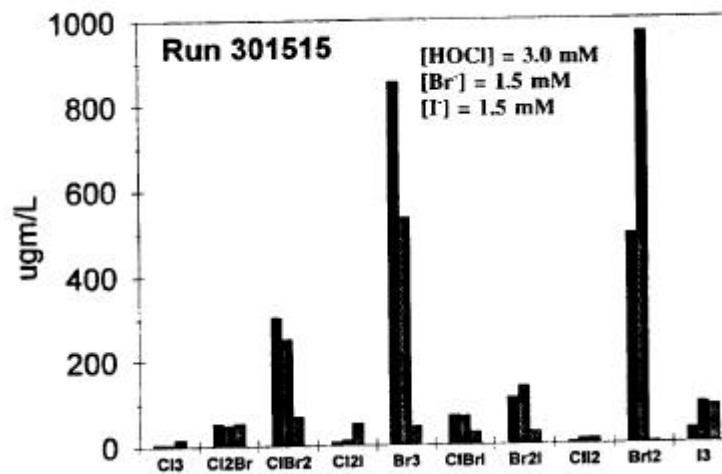
Legenda: Run = Corrida Cromatográfica.
NOM = Carbono Orgânico Total (56 mg/L)

Figura 2. Distribuição de THM para elevado NOM na corrida 301500.



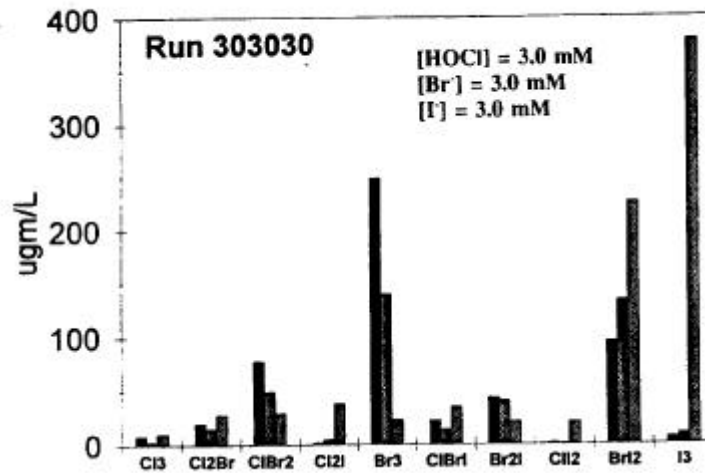
Legenda: Run = Corrida Cromatográfica.
 NOM = Carbono Orgânico Total (56 mg/L)

Figura 3. Distribuição de THM para elevado NOM na corrida 300015.



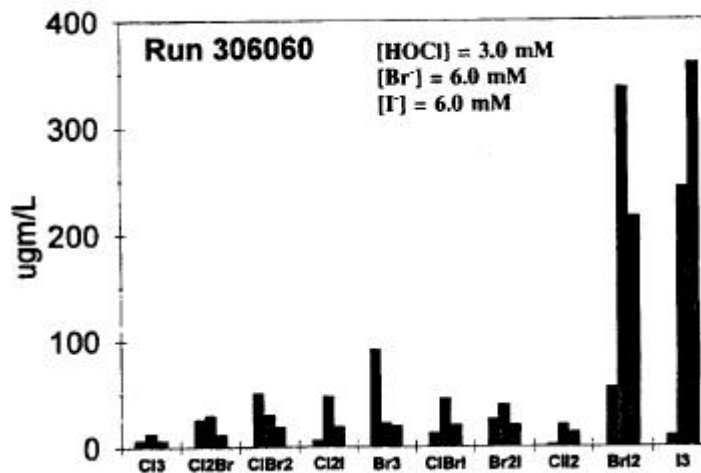
Legenda: Run = Corrida Cromatográfica.
 NOM = Carbono Orgânico Total (56 mg/L)

Figura 4. Distribuição de THM para elevado NOM na corrida 301515.



Legenda: Run = Corrida Cromatográfica.
 NOM = Carbono Orgânico Total (56 mg/L)

Figura 5. Distribuição de THM para elevado NOM na corrida 303030.



Legenda: Run = Corrida Cromatográfica.
 NOM = Carbono Orgânico Total (56 mg/L)

Figura 6. Distribuição de THM para elevado NOM na corrida 306060.

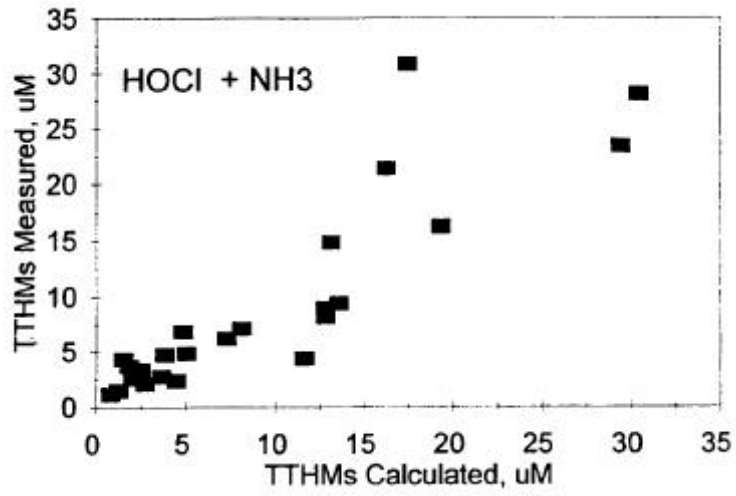


Figura 7. Valores calculados versus valores medidos de TTHM para series C-N.

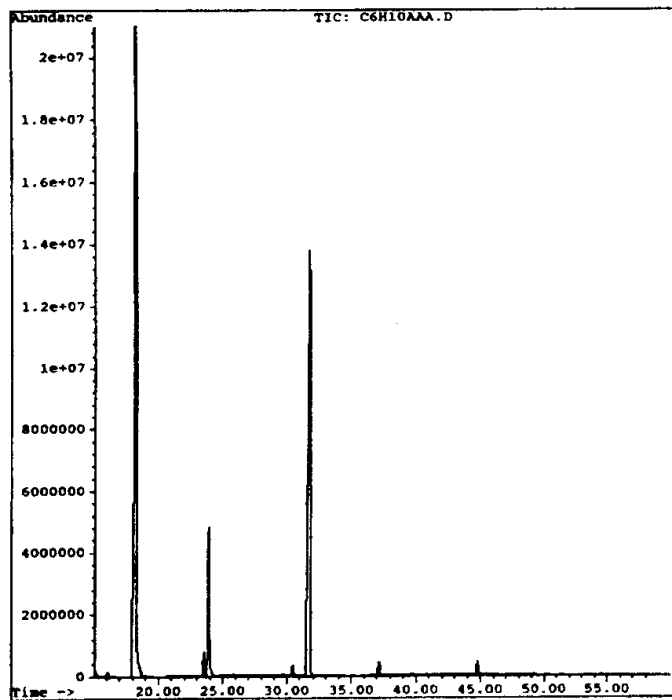


Figure 8. RIC for cyclohexene THM mixture at time = 0.

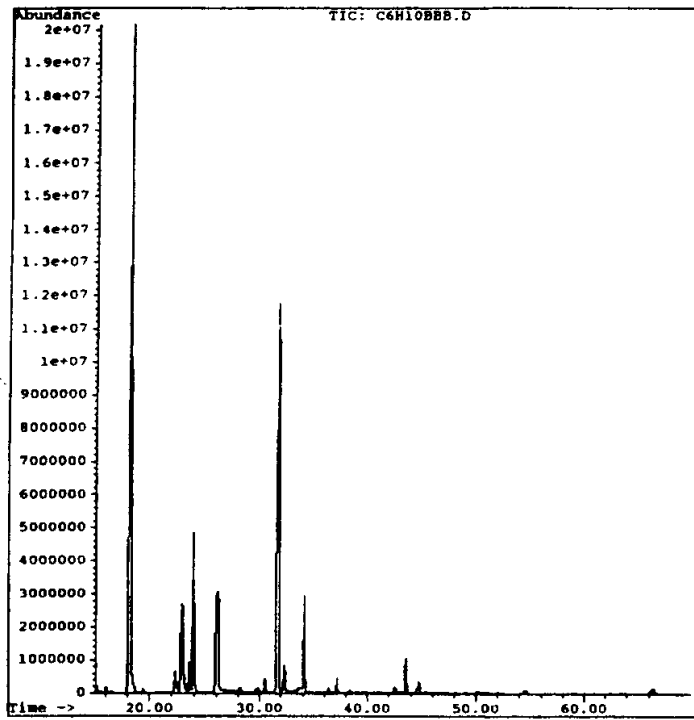


Figure 9. RIC for cyclohexene THM mixture at time = 24 hours.

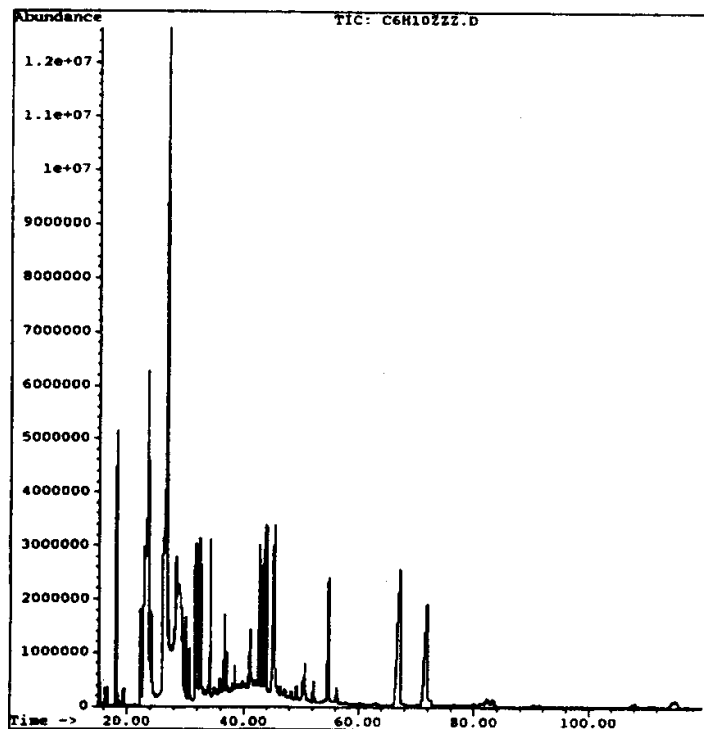


Figure 10. RIC for cyclohexene THM mixture at time = 0.

Tabela 3. Trihalometanos produzidos durante a cloração de amostras com baixo índice de carbono NOM.

	PPB									TTHMs	Br ppm	I ppm
	CHCl3	CHCl2Br	CHClBr2	CHBr3	CHCl2I	CHClBrI	CHBr2I	CHClI2	CHI3			
1A	122.6	171.9	301.5	102.3	2.1	1.8	0.0	0.0	0.0	702.2	1.00	10.00
1B	4.6	0.0	0.0	0.0	22.2	9.4	1.9	6.1	10.1	54.4	1.00	1.00
1C	77.8	128.2	265.5	107.5	9.4	9.1	2.8	0.0	0.0	600.4	1.00	0.10
1D	128.9	166.7	304.4	102.4	3.4	2.7	1.1	0.0	0.0	709.4	1.00	0.01
1E	126.3	165.2	278.9	92.3	2.6	1.8	0.9	0.0	0.0	668.0	1.00	0.00
1F	383.1	105.2	34.6	1.4	8.6	1.8	0.6	0.0	0.0	535.4	0.10	10.00
1G	2.8	0.0	0.0	0.0	28.1	2.8	1.4	3.7	10.4	49.2	0.10	1.00
1H	263.4	69.2	32.4	2.2	34.0	8.9	2.0	1.0	0.0	413.1	0.10	0.10
1I	354.2	99.2	37.1	2.6	10.3	3.9	1.0	0.0	0.0	508.2	0.10	0.01
1J	404.6	91.9	35.5	2.9	1.9	1.6	0.6	0.0	0.0	539.1	0.10	0.00
2 ^A	348.7	59.1	15.2	0.0	9.0	0.0	0.0	0.0	0.0	432.0	0.0	10.00
2B	2.3	0.0	0.0	0.0	19.0	2.1	0.0	5.1	11.3	39.8	0.0	1.00
2C	202.9	43.4	13.5	0.0	27.1	5.3	0.0	0.5	0.0	292.7	0.0	0.10
2D	305.3	61.0	15.1	0.0	11.5	1.5	0.0	0.0	0.0	394.4	0.0	0.01
2E	333.0	69.4	17.2	0.0	11.8	0.0	0.0	0.0	0.0	431.3	0.0	0.00

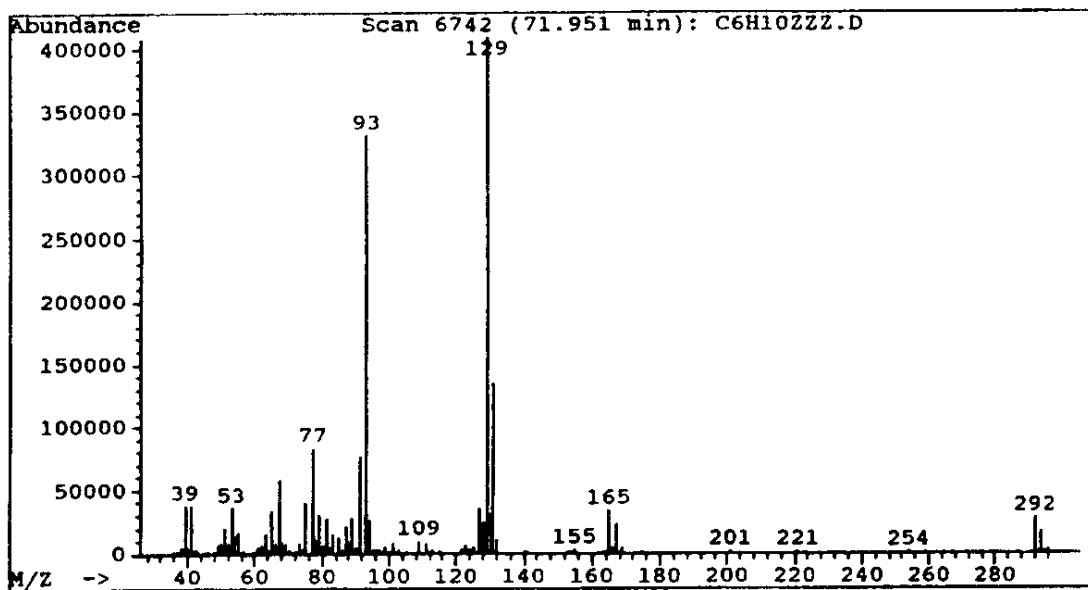


Figura 11. Espectro de Massa para C₆H₁₀CHCl₂I.

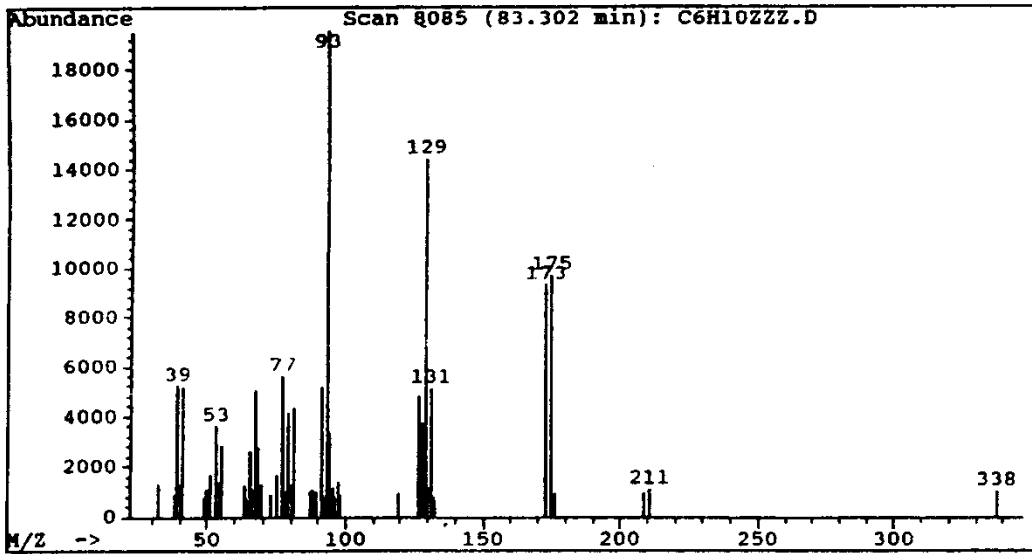


Figura 12. Espectro de Massa para $C_6H_{10}CHClBr$.

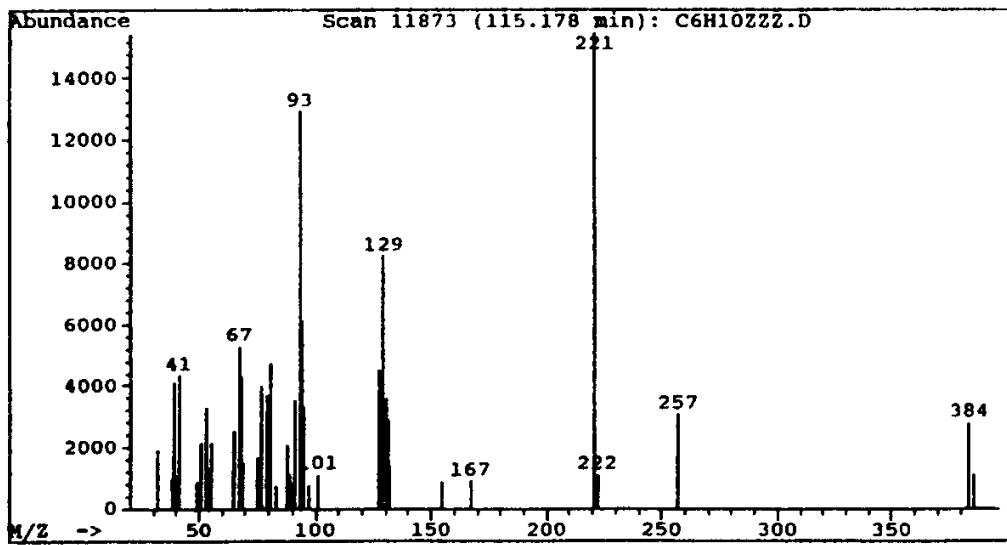


Figura 13. Espectro de Massa para $C_6H_{10}CHCl_2$.