
Boletim de Pesquisa e Desenvolvimento 29

ISSN 1516-4675
Fevereiro, 2005

**Estimativa da Superfície
Específica de Solos e do
Coeficiente de Sorção de Pesticidas**



República Federativa do Brasil

Luís Inácio Lula da Silva

Presidente

Ministério da Agricultura, Pecuária e Abastecimento

Roberto Rodrigues

Ministro

Empresa Brasileira de Pesquisa Agropecuária - Embrapa

Conselho de Administração

Luís Carlos Guedes Pinto

Presidente

Sílvio Crestana

Vice-Presidente

Alexandre Kalil Pires

Hélio Tollini

Ernesto Paterniani

Marcelo Barbosa Saintive

Membros

Diretoria Executiva da Embrapa

Sílvio Crestana

Diretor-Presidente

Kleper Euclides Filho

José Eugênio França

Tatiana Deane de Abreu Sá

Diretores-Executivos

Embrapa Meio Ambiente

Paulo Choji Kitamura

Chefe Geral

Geraldo Stachetti Rodrigues

Chefe-Adjunto de Pesquisa e Desenvolvimento

Maria Cristina Martins Cruz

Chefe-Adjunto de Administração

Arivaldo Luchiari Junior

Chefe-Adjunto de Comunicação e Negócios



ISSN 1516-4675

Fevereiro, 2005

Empresa Brasileira de Pesquisa Agropecuária
Centro Nacional de Pesquisa de Monitoramento e Avaliação de Impacto Ambiental
Ministério da Agricultura, Pecuária e Abastecimento

Boletim de Pesquisa e Desenvolvimento 29

Estimativa da Superfície Específica de Solos e do Coeficiente de Sorção de Pesticidas

Lourival Costa Paraíba
Alfredo José Barreto Luiz
Daniel Vidal Pérez

Jaguariúna, SP
2005

Embrapa Meio Ambiente

Rodovia SP 340 - Km 127,5 - Tanquinho Velho
Caixa Postal 69 - Cep.13820-000, Jaguariúna, SP
Fone: (19) 3867-8750
Fax: (19) 3867-8740
www.cnpma.embrapa.br
sac@cnpma.embrapa.br

Comitê de Editoração da Unidade

Presidente: Geraldo Stachetti Rodrigues
Secretário-Executivo: Sandro Freitas Nunes
Bibliotecário: Maria Amélia de Toledo Leme
Membros: Heloisa F. Filizola; Manoel Dornelas de Souza; Cláudio César
de Almeida Buschinelli; Maria Conceição Peres Young Pessoa;
Osvaldo Machado R. Cabral; Marta Camargo de Assis
Normalização Bibliográfica: Maria Amélia de Toledo Leme
Editoração eletrônica: Silvana Cristina Teixeira

1ª edição

Todos os direitos reservados.

A reprodução não-autorizada desta publicação, no todo ou em parte,
constitui violação dos direitos autorais (Lei no 9.610).

Paraíba, Lourival Costa.

Estimativa da Superfície Específica de Solos e do Coeficiente de
Sorção de Pesticidas / Lourival Costa Paraíba... [et al]. - Jaguariúna:
Embrapa Meio Ambiente, 2005.

18 p. - (Boletim de Pesquisa e Desenvolvimento / Embrapa Meio
Ambiente, ISSN 1516-4675; 29)

1. Agrotóxicos - Sorção - Modelo matemático. 2. Solo -
Superfície específica. I. Título. II. Série.

CDD 632.9504

© Embrapa 2005

Sumário

Resumo	6
Abstract	7
Introdução	8
Material e Métodos	11
Resultados e Discussão	13
Conclusões	14
Referências	15

Estimativa da Superfície Específica de Solos e do Coeficiente de Sorção de Pesticidas

Lourival Costa Paraíba¹
Alfredo José Barreto Luiz²
Daniel Vidal Pérez³

Resumo

São apresentados dois modelos de regressão linear múltipla. O primeiro foi obtido para estimar a superfície específica (SE) de solos brasileiros tendo como variáveis independentes os conteúdos volumétricos de argila, areia, silte e carbono orgânico. Tomou-se o cuidado para que o modelo proposto respeitasse restrições físicas de positividade dos valores da superfície específica, impondo-se restrições na determinação dos coeficientes dos atributos do modelo. Posteriormente, determinou-se uma relação linear múltipla para estimar o logaritmo decimal do coeficiente de sorção de pesticidas ($LogKd$) por meio da superfície específica do solo, do coeficiente de partição entre o octanol e a água, da solubilidade aquosa do pesticida e do pH do solo. Os modelos ajustados explicam 82% e 78% da variabilidade das variáveis dependentes SE e $LogKd$, respectivamente. Foram utilizados dados de 307 perfis de solos para a determinação da relação entre a superfície específica e os atributos do solo e 118 valores de coeficientes de sorção medidos experimentalmente para 20 pesticidas em 46 dados de solos representativos do ambiente agrícola brasileiro. Todos os dados deste estudo foram coletados em trabalhos científicos publicados. Os modelos apresentados podem facilitar o trabalho da previsão da superfície específica de solos (SE) e do coeficiente de sorção de pesticidas (Kd), contribuindo na estimativa da concentração ambiental de pesticidas por modelos matemáticos ou por índices que usem esses parâmetros em seus cálculos.

Palavras-chave: coeficiente de distribuição, função de pedotransferência.

¹ Matemático, Doutor em Matemática Aplicada, Embrapa Meio Ambiente, Rod. SP 340 - Km 127,5 Cx Postal 69 - Jaguariúna, SP. lourival@cnpma.embrapa.br

² Engenheiro Agrônomo, Dr. em Sensoriamento Remoto, Embrapa Sede, Av. W3 Norte (final), Cx Postal 040315 - Brasília, DF. alfredo.luiz@embrapa.br

³ Engenheiro Agrônomo, Doutor em Química Analítica, Embrapa Solos, Rua Jardim Botânico, 1024 - Rio de Janeiro, RJ. daniel@cnpes.embrapa.br

Estimation of soil specific surface area and pesticide sorption coefficient

Abstract

Two multiple linear regression models are presented. The first one was obtained to estimate the specific surface area (*SE*) of the Brazilian soils having as independent variables the clay, sand, silt and organic carbon volumetric contents. Furthermore, we determined a linear regression model to estimate the pesticide sorption coefficient (*K_d*) by the *SE*, octanol-water partition coefficient, pesticide aqueous solubility and soil *pH*. The adjusted models explain 82% and 78% of the variability of the variables *SE* and *LogK_d*, respectively. We used data from 307 Brazilian soil samples, to establish the relationship between the *SE* and the soil attributes, and 118 *K_d* values of 20 pesticides in 46 soils samples representative of the Brazilian agricultural environment to establish the relationship between the *LogK_d* and the soil and pesticide attributes. The presented regression models can facilitate the work of forecast the pesticide environmental fate by mathematical models.

Keywords: distribution coefficient, pedotransfer function.

Introdução

A previsão da concentração e a análise dos efeitos de um pesticida sobre o meio ambiente são auxiliadas pelo conhecimento das propriedades físico-químicas dessas substâncias. Muitos processos ambientais importantes podem ser caracterizados por coeficientes de partição. Os pesticidas orgânicos podem ter diferentes afinidades preferenciais; alguns pela matéria sólida, outros pela matéria orgânica e outros pela solução aquosa do solo. Uma dessas relações de afinidade é descrita pelo coeficiente de sorção ou coeficiente de distribuição, K_d (ml/g), definido como o quociente entre a concentração do pesticida sorvido nas partículas do solo e a concentração do pesticida na solução aquosa do solo em um sistema fechado, isotérmico, em equilíbrio, contendo o pesticida, a matéria sólida e a solução aquosa do solo (Karickhoff, 1981; Brouwer et al., 1994). Outra afinidade importante é descrita pelo coeficiente de partição entre o carbono orgânico do solo e a solução aquosa do solo, K_{oc} (ml/g), definido pelo quociente entre a concentração do pesticida no carbono orgânico do solo, uma fração da matéria orgânica do solo, e a concentração do pesticida na solução aquosa do solo em um sistema fechado, isotérmico, em equilíbrio, contendo o pesticida e o carbono orgânico do solo. Uma das utilidades desses coeficientes de partição é a previsão da contaminação do solo, das águas superficiais e das águas subterrâneas, pois se um pesticida tem baixa afinidade com a matéria sólida ou com a matéria orgânica do solo e alta afinidade com a água, então existe uma grande possibilidade de que esse composto venha a ser um contaminante de águas subterrâneas e, reciprocamente, se um pesticida tem uma alta afinidade pela matéria sólida ou pela matéria orgânica do solo e uma baixa afinidade com a solução aquosa do solo, então esse composto pode ser transportado por escoamento superficial de água, adsorvido ou absorvido nas partículas do solo, para corpos de águas superficiais (Álvarez-Benedí et al., 1999). O trabalho de Karickhoff (1981) demonstrou que, para compostos orgânicos hidrofóbicos, a capacidade de sorção do solo é controlada pela fração volumétrica de carbono orgânico no solo.

A sorção é um fenômeno físico-químico que se refere aos processos de retenção de forma geral, sem distinção aos processos específicos de adsorção, absorção ou precipitação (Regitano, 2002). A adsorção é um processo físico-químico reversível que ocorre quando moléculas do pesticida são atraídas para a superfície da matéria sólida ou para a matéria orgânica do solo por mecanismos químicos ou físicos tais como reações de coordenação, interações por transferência de cargas, trocas iônicas, forças de van der Waals, ligações covalentes ou interações hidrofóbicas (Lavorenti et al., 2003). A absorção é um fenômeno puramente físico que consiste na penetração de moléculas do pesticida nos espaços microscópicos do solo. A sorção é o processo geral de retenção das moléculas no solo, sem distinção entre os processos específicos de adsorção ou de absorção.

O valor do K_d pode ser estimado por

$$K_d = CO \times K_{oc}$$

onde CO é o conteúdo volumétrico de carbono orgânico do solo. Experimentalmente, determina-se primeiro o valor de K_d calculando-se o valor do quociente

$$Kd = Cs/Cw$$

onde Cs é a concentração do pesticida no solo e Cw é a concentração do pesticida na solução aquosa do solo. Posteriormente, calcula-se o valor do Koc , por

$$Koc = Kd/CO$$

(Kanazawa, 1989). O Koc é um dos coeficientes que compõe vários índices indicadores do potencial de lixiviação de pesticidas como, por exemplo, o fator de retardo (Davidson et al., 1968), o fator de atenuação (Rao et al., 1985), o índice Gus (Gustafson, 1989), o índice LPI (Meeks & Dean, 1990), o índice $TLPI$ (Paraíba et al., 2003) e é um dos coeficientes da equação de dispersão-advectação que modela e simula o transporte e a transformação de solutos no perfil do solo (Jury et al., 1991).

O cálculo do Koc por meio do cálculo do Kd pode não ser apropriado para pesticidas muito solúveis em água ou para solos nos quais a relação entre a fração volumétrica de argila (AG) e a fração volumétrica de carbono orgânico (CO) seja superior a 40,0, ou seja, $AG/CO \geq 40,0$. Nesta situação a sorção do pesticida é dominada pela sorção na argila, em detrimento da sorção na matéria orgânica ou nos constituintes sólidos do solo (Vigh & Di Guardo, 1995). Pionke & De Angelis (1972) apresentam um método alternativo no qual é usada a superfície específica do solo para estimar o valor de Kd de pesticidas muito solúveis em água.

A natureza complexa do processo de sorção faz com que o coeficiente de sorção dependa funcionalmente da área superficial específica do solo, da concentração de substâncias neutras ou carregadas no solo, do conteúdo volumétrico de matéria orgânica, da polaridade da solução aquosa do solo e de matéria sólida do solo (Schwarzenbach et al., 1993). O objetivo deste trabalho é apresentar uma alternativa numérica para estimar valores de $LogKd$ por meio de uma equação obtida por regressão linear múltipla que relaciona o logaritmo do coeficiente de sorção, $LogKd$ (ml/g), com o logaritmo do valor da superfície específica, $LogSE$ (m²/g), o logaritmo do coeficiente de partição entre o octanol e a água, $LogKow$, o logaritmo da solubilidade aquosa do pesticida, $LogWS$ (mg/l), e o pH do solo. Para tanto, será proposta uma relação funcional, obtida por meio de regressão linear múltipla que relaciona a superfície específica (SE) com os conteúdos volumétricos de argila (AG), areia (AR), silte (SL) e carbono orgânico (CO) do solo. Todos os logaritmos foram calculados na base dez.

O coeficiente de partição de um pesticida entre o octanol e a água Kow é um número sem dimensão determinado pelo quociente entre a concentração do pesticida no octanol e a concentração do pesticida na água, de uma mescla mantida à temperatura constante, contendo o pesticida, o octanol e a água na qual a fugacidade do pesticida no octanol e a fugacidade do pesticida na água estão em estado de equilíbrio, ou seja, em estado onde as fugacidades do pesticida no octanol e a fugacidade do pesticida na água são iguais. A fugacidade exprime a tendência de escape de um composto químico de um compartimento, meio ou fase (Mackay & Paterson, 1982). O valor do Kow para pesticidas varia entre 10^{-3} a 10^7 ($-3,0 \leq LogKow \leq 7,0$) e pode ser encontrado facilmente em manuais de referência (Tomlim, 2000) ou em páginas eletrônicas na internet. Dado que o octanol simula o conteúdo de lipídio dos organismos, o valor do Kow exprime o grau de afinidade do pesticida por lipídio, sendo uma medida da lipofilicidade de um pesticida. Devido aos altos valores de Kow , o $LogKow$ é mais usado do que o Kow . Um pesticida é considerado hidrofóbico quando seu $LogKow \geq 3,0$. Em geral, o valor do $LogKow$ é diretamente proporcional ao valor do $LogKoc$ (Kanazawa, 1989).

A solubilidade aquosa de um pesticida, WS (mg/l), é a quantidade máxima do pesticida que em uma temperatura constante, pode ser dissolvida em uma dada quantidade de água. A solubilidade aquosa pode ser uma propriedade determinante do destino de um pesticida, pois se um pesticida tiver uma alta solubilidade e baixa sorção, então existe uma grande possibilidade de que este pesticida seja um contaminante de águas subterrâneas. A sorção de um pesticida tende a ser inversamente proporcional à sua solubilidade em água. Para a grande maioria dos pesticidas a solubilidade aquosa é inversamente proporcional ao coeficiente de partição entre o octanol e a água (Kenaga, 1980).

O processo de sorção depende fortemente das características químicas intrínsecas do pesticida, pois a sorção de pesticidas ácidos, básicos ou catiônicos é influenciada pelo pH do solo aumentando ou diminuindo as forças de atração entre as moléculas do pesticida e as moléculas dos constituintes da matéria orgânica ou da matéria sólida do solo (Nicholls & Evans, 1991a; Nicholls & Evans, 1991b). A sorção de pesticidas iônicos é fortemente dependente da fração volumétrica de carbono orgânico do solo, pois a matéria orgânica do solo é constituída por inúmeras substâncias quimicamente ativas (Briggs, 1981). Chen et al. (2000) indicam que, a sorção de pesticidas em solos secos não depende da natureza da polaridade do pesticida.

O aumento da sorção é diretamente proporcional ao acréscimo da superfície específica a qual é função do decréscimo do tamanho das partículas do solo. Estas partículas tendem a possuir uma grande carga comparada à sua superfície específica (Freeze & Cherry, 1979). Os solos que são constituídos por uma quantidade apreciável de partículas coloidais como as argilas, exibem uma alta capacidade para sorver pesticidas em sua superfície (Schwarzenbach et al., 1993). A superfície específica da matéria sólida do solo é um sítio importante para o processo de sorção, principalmente para os pesticidas polares em solos com baixo conteúdo volumétrico de matéria orgânica (Helling et al., 1971).

Segundo Lopes & Guidolin (1987), a superfície específica (SE) dos solos é um dos fatores que influem na *Capacidade de Troca de Cátions* (CTC) dos mesmos, sendo definida simplesmente como a área por unidade de peso. Lopes & Guidolin (1987) afirmam ainda que quanto mais subdividido for o material que compõe um solo maior será sua SE , o que resulta em uma maior CTC. Resende et al. (1988) associam a SE com a capacidade do solo em reter nutrientes, ressaltando que essa característica é mais desenvolvida na fração argila e quase inexistente nos minerais das areias. Isso é explicado pela relação inversamente proporcional existente entre o tamanho das partículas e a SE . Resende et al. (1988) chamam ainda a atenção para a heterogeneidade dos solos, afirmando que estes variam regionalmente por causa de diferenças em materiais de origem, condições bioclimáticas e idade, e que isso acarreta variações em composição mineralógica, granulométrica, profundidade, riqueza em nutrientes, capacidade de retenção de água, porosidade, etc.

Em geral, as reações químicas dos colóides dos solos orgânicos ou dos inorgânicos são fenômenos de superfície. Por isso, diversos métodos diretos e indiretos para a estimativa da SE foram desenvolvidos. Apesar de algumas incertezas metodológicas, as medidas baseadas na sorção de uma molécula polar, geralmente *etileno glicol monoetil éter* (EGME), são as mais comuns na área das ciências dos solos. O método de retenção do EGME foi proposto por Heilman et al. (1965) e modificado por Eltantawy & Arnold (1973). Assim, uma função que relacione a SE com atributos dos solos rotineiramente determinados como, por exemplo, o conteúdo volumétrico de argila, areia, de silte e carbono orgânico seria de grande interesse.

Principalmente para melhorar os modelos que usam a *SE* como uma variável de entrada, como no enfoque dado por Pionke & De Angelis (1972) para prever o *Kd* de alguns pesticidas solúveis em água ou quando se deseja usar a equação de Goss & Schwarzenbach (1999) para estimar o valor da energia de sorção de um pesticida no solo.

Material e métodos

Todos os dados utilizados nesse trabalho foram coletados em trabalhos científicos publicados, dissertações de mestrado e teses de doutorado. Os resumos das estatísticas descritivas dos dados de solo, utilizados para a determinação dos parâmetros do modelo de regressão linear múltipla entre a variável dependente *SE* e as variáveis independentes *AG*, *AR*, *SL* e *CO*, estão resumidos na Tabela 1. Foi utilizado um conjunto de 307 dados de 130 perfis de solos, abrangendo um largo espectro de materiais de solos de diferentes origens. As fontes de referências dos tipos de solos, de pesticidas e do número de dados de *Kd*, utilizados para determinar os parâmetros do modelo de regressão entre a variável dependente *LogKd* e as variáveis independentes *LogSE*, *LogKow*, *LogWS* e *pH*, estão indicados na Tabela 2. Foi utilizado um total de 118 valores de *Kd* determinados experimentalmente para 20 pesticidas em 46 dados de solos brasileiros. Os valores de *LogKow* e *LogWS* da Tabela 3 para todos os pesticidas da Tabela 2 foram coletados no '*Pesticide Manual*' (Tomlin, 2000).

Ao se decidir por um modelo de regressão linear múltipla para ser usado na estimativa da superfície específica é necessário que os parâmetros do modelo sejam maiores ou iguais a zero, que a soma das frações volumétricas do solo sejam menores ou iguais à unidade e que os coeficientes respeitem a restrição $\alpha_1 > \alpha_2 > \alpha_3 > \alpha_4 > 0$, onde os α_{is} são os coeficientes de *CO*, *AG*, *SL* e *AR*, respectivamente (Pionke & De Angelis, 1972). As análises das estatísticas descritivas, de variância dos ajustes dos parâmetros dos modelos foram realizadas usando-se o SAS (1989). Os parâmetros das equações foram determinados usando-se o procedimento NLIN do SAS (1989), o qual permite canalizar os coeficientes do modelo de regressão para respeitar as restrições técnicas de positividade.

Tabela 1. Referências, estatística descritiva das variáveis da equação (1), tipos de solos e o número total de dados de solos coletados na literatura.

Referências	Estatística	SE (m ² /g)	AR	SL	AG	CO	Tipo de solos: número total de dados coletados
Grohmann, 1970	Máximo	224	0,94	0,41	0,71	0,030	Latossolos,
	Mínimo	10	0,17	0,00	0,05	0,001	Argissolos, Nitossolos,
	Média	70	0,57	0,12	0,31	0,009	Neossolos: 41
	Desvio Padrão	54	0,26	0,12	0,18	0,008	
Cordeiro, 1977	Máximo	98	0,85	0,17	0,77	0,027	Latossolos, Argissolos:
	Mínimo	30	0,13	0,01	0,13	0,002	19
	Média	57	0,53	0,10	0,37	0,009	
	Desvio Padrão	24	0,26	0,05	0,23	0,008	
Lopes, 1977	Máximo	107	0,59	0,33	0,72	0,051	Latossolos, Argissolos:
	Mínimo	58	0,07	0,14	0,25	0,002	20
	Média	83	0,23	0,20	0,57	0,011	
	Desvio Padrão	12	0,15	0,05	0,14	0,012	
Moniz, 1980	Máximo	108	0,80	0,19	0,74	0,031	Latossolos, Nitossolos,
	Mínimo	17	0,19	0,01	0,12	0,000	Luvissolos,
	Média	59	0,47	0,05	0,47	0,008	Plantossolos: 53
	Desvio Padrão	26	0,21	0,04	0,19	0,006	
Embrapa, 1988a	Máximo	148	0,70	0,25	0,88	0,010	Latossolos: 14
	Mínimo	37	0,03	0,06	0,24	0,001	
	Média	96	0,22	0,14	0,64	0,004	
	Desvio Padrão	33	0,19	0,06	0,17	0,002	
Rodrigues, 1984	Máximo	169	0,16	0,24	0,85	0,036	Latossolos: 20
	Mínimo	97	0,03	0,11	0,65	0,003	
	Média	137	0,06	0,16	0,78	0,017	
	Desvio Padrão	22	0,03	0,04	0,06	0,011	
Barreto, 1986	Máximo	165	0,82	0,29	0,89	0,066	Latossolos: 14
	Mínimo	15	0,04	0,06	0,12	0,001	
	Média	90	0,28	0,14	0,58	0,015	
	Desvio Padrão	41	0,23	0,07	0,23	0,018	
Gama, 1986	Máximo	34,2	0,10	0,57	0,72	0,039	Nitossolos, Luvissolos,
	Mínimo	12,1	0,02	0,25	0,36	0,002	Neossolos: 13
	Média	24,1	0,05	0,39	0,56	0,010	
	Desvio Padrão	6,6	0,02	0,10	0,12	0,010	
Palmieri, 1986	Máximo	18,5	0,24	0,32	0,86	0,069	Latossolos, Neossolos
	Mínimo	10,2	0,02	0,12	0,44	0,001	Nitossolos: 20
	Média	13	0,09	0,17	0,75	0,012	
	Desvio Padrão	2,3	0,06	0,05	0,11	0,015	
Rego, 1986	Máximo	17	0,72	0,44	0,77	0,005	Neossolos, Latossolos:
	Mínimo	3	0,04	0,10	0,18	0,000	5
	Média	8,2	0,34	0,24	0,42	0,002	
	Desvio Padrão	5,8	0,28	0,13	0,22	0,002	
Santos, 1986	Máximo	13,6	0,64	0,21	0,69	0,019	Latossolos, Argissolos:
	Mínimo	6	0,26	0,04	0,20	0,002	14
	Média	9,7	0,36	0,10	0,54	0,009	
	Desvio Padrão	1,8	0,11	0,05	0,15	0,007	
Embrapa, 1988b	Máximo	12,5	0,75	0,21	0,87	0,009	Latossolos, Argissolos:
	Mínimo	2,5	0,03	0,06	0,18	0,001	24
	Média	8,5	0,28	0,11	0,60	0,004	
	Desvio Padrão	2,8	0,21	0,05	0,20	0,002	
Anjos, 1991	Máximo	21,4	0,81	0,31	0,37	0,017	Latossolos, Neossolos,
	Mínimo	3	0,35	0,09	0,10	0,002	Espondossolos: 14
	Média	9,6	0,65	0,17	0,18	0,006	
	Desvio Padrão	5,4	0,13	0,08	0,07	0,005	
Perez, 1990	Máximo	10,9	0,89	0,41	0,82	0,038	Argissolos, Nitossolos:
	Mínimo	2,5	0,08	0,03	0,07	0,001	36
	Média	5,9	0,52	0,16	0,33	0,009	
	Desvio Padrão	2,4	0,21	0,09	0,18	0,008	

SE: superfície específica; AR: areia; AG: argila; SL: silte; CO: carbono orgânico.

Tabela 2. Referências, tipos de solos, pesticidas e número total de dados de *Kd* usadas no ajuste da regressão múltipla dada pela equação (2).

Referências	Tipos de solos	Pesticidas: número total de dados coletados
Souza et al., 2000	Latossolo Vermelho distroférico Neossolo Quartzarênico	Tebutiurum: 3
Souza et al., 2001	Latossolo Vermelho distroférico Neossolo Quartzarênico	Diurum: 3
Laabs et al., 2002	Latossolo Vermelho-Amarelo, Neossolo Quartzarênico	Alacloro, Atrazina, Cloropirifós, Cialotrina, Deltametrina, alfa-Endosulfam, Metolacoloro, Monocrotofós, Simazina, Trifluralina: 20
Oliveira et al., 2001	Latossolo Vermelho Neossolo Quartzarênico Argissolo Vermelho-Amarelo	Alacloro, Atrazina, Dicamba, Heazinona, Imazetapir, Nicossulfurom, Metsulfurom-metil, Simazina, Sulfometurom-metil: 54
Regitano et al., 2001	Gleissolo Háplico Latossolo Vermelho Neossolo Quartzarênico	Clorotalonil: 3
Regitano et al., 2000	Neossolo Quartzarênico Nitossolo Vermelho Latossolo Vermelho distrófico Latossolo Vermelho ácrico Vertissolo Argilúvico Gleissolo Háplico	Imazaquim: 11
Rocha et al., 2002	Latossolo Vermelho Latossolo Vermelho ácrico Nitossolo Vermelho	Imazaquim: 24

Resultados e discussão

Como os valores dos atributos dos solos usados para ajustar a função proposta foram obtidos de dados publicados em dissertações de mestrado e doutorado, o principal critério para seleção dos dados foi o da uniformidade com relação ao método de obtenção dos valores dos atributos (*SE*, *AG*, *AR*, *SL* e *OC*). A equação de regressão linear múltipla ajustada apresentou um alto coeficiente de determinação ($R^2 = 0,82$), confirmando a suposição de que a relação é linear e significativa entre os atributos analisados. O modelo de regressão obtido é dado por

$$SE = 1313,78CO + 117,00AG + 116,90SL + 5,15AR \quad (1)$$

com $R^2 = 0,82$ e $p < 0,05$, onde *SE* é a superfície específica calculada obedecendo às restrições físicas impostas pelos coeficientes dos conteúdos volumétricos de carbono orgânico, argila, silte e areia. Desde que o valor máximo de p foi menor do que 0,05, então existe uma relação estatística significativa entre a variável dependente e as variáveis independentes, em torno de 95% de confiança. O valor estatístico do R^2 indica que o modelo foi ajustado explicando 82% da variabilidade do *SE*, confirmando a suposição de que a relação é linear e significativa entre os atributos analisados. A equação (1) é uma função de pedotransferência (Bouma, 1989).

Com o modelo de regressão linear múltipla dado pela equação (1), foram determinados 46 valores de *LogSE* usando-se os perfis de solo da Tabela 3. O modelo de regressão obtido para a estimativa de *LogKd* é dado por

$$LogKd = 0,89LogSE + 0,26LogKow - 0,29LogWS - 0,22pH \quad (2)$$

com $R^2 = 0,78$ e $p < 0,01$. Desde que o valor máximo de p foi menor do que 0,01, então existe uma relação estatística significativa entre a variável dependente e as variáveis independentes, em torno de 99% de confiança. O valor estatístico do R^2 indica que o modelo foi ajustado explicando 78% da variabilidade do $LogKd$, confirmando a suposição de que a relação é linear e significativa entre os atributos analisados. Os resumos das estatísticas descritivas das variáveis dependentes e independentes dos modelos dados pelas equações (1) e (2) estão resumidos na Tabela 3 e Tabela 4, respectivamente.

Tabela 3. Estatística das características físico-químicas dos 20 pesticidas usados no estudo.

Estatística	<i>LogKow</i>	<i>LogWS</i> (mg/l)	<i>LogKd</i> (ml/g)
Mínimo	-1,47	-3,7	-0,98
Máximo	6,9	6,0	3,68
Média	2,25	1,61	0,28
Desvio padrão	2,18	2,32	0,99

Kow = coeficiente de partição octanol-água; *WS* = solubilidade em água; *Kd* = coeficiente de sorção.

Tabela 4. Estatística das variáveis físico-químicas dos 34 tipos de solos utilizados no estudo.

Estatística	<i>AG</i>	<i>AR</i>	<i>CO</i>	<i>SL</i>	<i>pH</i>	<i>SE</i> [*] (m ² /g)
Mínimo	0,06	0,06	0,003	0,02	3,2	21,1
Máximo	0,82	0,90	0,078	0,30	7,7	191,7
Média	0,50	0,36	0,018	0,13	5,3	91,3
Desvio padrão	0,21	0,26	0,015	0,08	1,3	38,9

*Os valores de *SE* foram estimados pelo modelo de regressão linear múltipla dado pela equação (1).

Conclusões

Foram apresentados dois modelos de regressão linear múltipla. Quando são conhecidos os conteúdos volumétricos de argila, de areia, de silte e de carbono orgânico é possível estimar a superfície específica, utilizando-se a expressão dada pela equação (1), e quando são conhecidos a superfície específica, o pH do solo, a solubilidade aquosa e o coeficiente de partição entre o octanol e a água é possível estimar o coeficiente de sorção do pesticida, usando-se a expressão (2). Os valores positivos dos coeficientes do *LogSE* e de *LogKow* na equação (2) indicam que o *LogKd* é diretamente proporcional a essas variáveis, ou seja, a sorção de um pesticida tende a ser maior em solos com alta superfície específica e com um alto conteúdo volumétrico de carbono orgânico. Analogamente, os coeficientes da solubilidade aquosa (*LogWS*) e do *pH* do solo indicam uma relação inversa de dependência com o coeficiente de sorção, pois quanto maior for a solubilidade aquosa de um pesticida ou o pH do solo, existe uma grande possibilidade de que o pesticida tenha uma baixa sorção nesse solo. As expressões (1) e (2) não são definitivas para o cálculo do valor de *Kd*, porém podem facilitar o trabalho da previsão da sorção de pesticidas em solos e contribuir na estimativa da concentração ambiental de pesticidas por modelos matemáticos ou por índices que usem o valor do *Kd* em seus cálculos.

Referências

- ÁLVAREZ-BENEDÍ, J.; CARTÓN, A.; BOLADO, S. A review of modeling approaches. **Recent Research Developments in Agricultural & Food Chemistry**, v.3, p.259-276, 1999.
- ANJOS, L.H.C. dos. Identification, characterization, and genesis of 'Plintossolos' developed from the Itapecurú formation in Maranhão State, Brazil. 1991, 226p. (Ph.D. Thesis) - Purdue University, West Lafayette.
- BARRETO, W.O. **Electrical double layer capacity of soils with variable charge colloids**. 1986, 273p. (Ph.D. Thesis) – UFRRJ, Itaguaí.
- BOUMA, J. Using soil survey data for quantitative land evaluation. **Advances in Soil Science**, v.9, p.177-213, 1989.
- BRIGGS, G. Theoretical and experimental relations between soil adsorption, octanol-water partition coefficient, water solubilities, bioconcentration factors, and Parachor. **Journal of Agricultural and Food Chemistry**, v.29, p.1050-1059, 1981.
- BROUWER, W.W.M.; BOESTEN, J.J.T.I.; LINDERS, J.B.H.; VAN DER LINDEN, A.M.A. The behaviour of pesticide in soil: dutch guidelines for laboratory studies and their evaluation. **Pesticide Outlook**, Oct., p.23-28, 1994.
- CHEN, D.; ROLSTON, D.E.; YAMAGUCHI, T. Calculating partition coefficients of organic vapors in unsaturated soil and clays. **Soil Science**, v.165, p.217-225, 2000.
- CORDEIRO, J.C. **Physico-hydrical characteristics of Latosols under Cerrado cover from Central Brazil**. 1977, 122p. (M.Sc. Thesis) - UFRRJ, Rio de Janeiro.
- DAVIDSON, J.M.; REICK, C.E.; SANTELMAN, P.W. Influence of water flux and porous materials on the movement of selected herbicides. **Soil Science Society of America Proceedings**, v.32, p.629-633, 1968.
- ELTANTAWY, J.M.; ARNOLD, P.W. Reappraisal of ethylene glycol monoethyl ether (EGME) method for surface area estimations of clays. **Journal of Soil Science**, v.24, p.232-238, 1973.
- EMBRAPA. Serviço Nacional de Levantamento e Conservação de Solos. REUNIÃO DE CLASSIFICAÇÃO, CORRELAÇÃO DE SOLOS E INTERPRETAÇÃO DE APTIDÃO AGRÍCOLA, 3., 1988, Rio de Janeiro, Brasil. **Proceedings...** Rio de Janeiro: EMBRAPA-SNLCS/Sociedade Brasileira de Ciência do Solo, 1988a. 425p.
- EMBRAPA. Serviço Nacional de Levantamento e Conservação de Solos. INTERNATIONAL SOIL CLASSIFICATION WORKSHOP, 8., Rio de Janeiro, Brasil, 1986. **Proceedings...** Rio de Janeiro: Embrapa-SNLCS/USDA/ Universidad Puerto Rico, 1988b. 285p.
- FREEZE, R.A.; CHERRY, J.A. **Groundwater**. Englewood Cliffs: Prentice-Hall, 1979. 604p.
- GAMA, J. R. N. F. **Characterization and formation of soils with high clay activity of the State of Acre**. 1986, 150p. (M.Sc. Dissertation) - UFRRJ, Itaguaí.

GOSS, K.U.; SCHWARZENBACH, R.P. Empirical prediction of heats of vaporization and heats of adsorption of organic compounds. **Environmental Science and Technology**, v.33, p.3390-3393, 1999.

GROHMANN, F. **Specific surface and its correlation to soil physical and physico-chemical properties**. 1970, 52p. (Ph.D. Thesis) - ESALQ/USP, Piracicaba.

GUSTAFSON, D.I. Groundwater ubiquity score: a simple method for assessing pesticide leachability. **Environmental Toxicology and Chemistry**, v.8, p.339-357, 1989.

HEILMAN, M.D.; CARTER, D.L.; GONZALEZ, C.L. The ethylene glycol monoethyl ether (EGME) technique for determining soil surface area. **Soil Science**, v.100, p.409-413, 1965.

HELLING, C.S.; KEARNEY, P.C.; ALEXANDER, M. Behavior of pesticide in soils. **Advances in Agronomy**, v.23, p.147-239, 1971.

JURY, W.A.; GARDNER, W.R.; GARDNER, W.H. **Soil physics**. New York: John Wiley & Sons, 1991. 328p.

KANAZAWA, J. Relationship between the soil sorption constants for pesticides and their physicochemical properties. **Environmental Toxicology and Chemistry**, v.8, p.477-484, 1989.

KARICKHOFF, S.W. Semi-empirical estimation of sorption of hydrophobic pollutants. **Chemosphere**, v.10, n.8, p.833-846, 1981.

KENAGA, E. Predicted bioconcentration factors and soil sorption coefficients of pesticides and other chemicals. **Ecotoxicology and Environmental Safety**, v.4, p.26-38, 1980.

LAABS, V.; AMELUNG, W.; PINTO, A.; ALTSAEDT, A.; ZECH, W. Fate of pesticides in tropical soils of Brazil under field conditions. **Journal of Environmental Quality**, v.31, p.256-268, 2002.

LAVORENTI, A.; PRATA, F.; REGITANO, J.B. Comportamento de Pesticidas em solos - fundamentos. **Tópicos em Ciência do Solo**, v.3, p.291-334, 2003.

LOPES, O.F. **Characterization of dark red latosols from North Minas Gerais State**. 1977, 89p. (M.Sc. Dissertation) - UFV, Viçosa.

LOPES, A.S.; GUIDOLIN, J.A. **Interpretação de análise de solo: conceitos e aplicações**. São Paulo: ANDA - Associação Nacional para Difusão de Adubos e Corretivos Agrícolas, 1987. 58p.

MACKAY, D.; PATERSON, S. Fugacity revisited: The fugacity approach to environmental transport. **Environmental Science and Technology**, v.16, p.654A-650A, 1982.

MEEKS, Y.J.; DEAN, J.D. Evaluating groundwater vulnerability to pesticides. **Journal of Water Resources Planning and Management**, v.116, p.693-707, 1990.

MONIZ, A.C. **Formation of an oxisol-ultisol transition in São Paulo, Brazil**. 1980, 290p. (Ph.D. Thesis) - North Carolina State University, Raleigh.

NICHOLLS, P.H.; EVANS, A.A. Sorption of ionisable organic compounds by filed soils. Part 1: acids. **Pesticide Science**, v.33, p.319-330, 1991a.

NICHOLLS, P.H.; EVANS, A.A. Sorption of ionisable organic compounds by filed soils. Part 2: Cations, bases and Zwitterions. **Pesticide Science**, v.33, p.331-345, 1991b.

OLIVEIRA, R.S.; KOSKINEN, W.C.; FERREIRA, F.A. Sorption and leaching potential of herbicides on Brazilian soils. **Weed Research**, v.41, p.97-110, 2001.

PALMIERI, F. **A study of a climosequence of soils derived from volcanic rock parent material in Santa Catarina and Rio Grande do Sul States, Brazil**. 1986, 259p. (Ph.D. Thesis) - Purdue University, West Lafayette.

PARAÍBA, L.C.; CERDEIRA, A.L.; SILVA, E.F.; MARTINS, J.S.; COUTINHO, H.L.C. Evaluation of soil temperature effect on herbicide leaching potential into groundwater in the Brazilian Cerrado. **Chemosphere**, v.53, p.1087-1095, 2003.

PEREZ, D.V. **Electrochemical properties of soils with B argillic and low activity clays**. 1990, 144p. (M.Sc. Dissertation) - UFRRJ, Itaguaí.

PIONKE, H.B.; DE ANGELIS, R.J. Method for distributing pesticide loss in field runoff between the solution and adsorbed phase. In: USDA-SEA (Ed.). **CREAMS, a field scale model for chemicals, runoff, and erosion from agricultural management systems**. Washington: USDA, 1972. p.607-645. (USDA. Conservation Resources Report, 26).

RAO, P.S.C.; HORNSBY, A.G.; JESSUP, R.E. Indices for ranking the potential for pesticide contamination of groundwater. **Proceedings of the Soil and Crop Science Society of Florida**, v.44, p.1-8, 1985.

REGITANO, J.B. Propriedades físico-químicas dos defensivos e seu destino no ambiente In: SIMPÓSIO SOBRE DINÂMICA DE DEFENSIVOS AGRÍCOLAS NO SOLO, Piracicaba, 2002. **Anais...** Piracicaba: ESALQ-USP, 2002. 96p.

REGITANO, J.B.; ALLEONI, L.R.F.; VIDAL-TORRADO, P.; CASAGRANDE, J.C.; TORNISIELO, V.L. Imazaquin sorption in highly weathered tropical soils. **Journal of Environmental Quality**, v.29, p.894-900, 2000.

REGITANO, J.B.; TORNISIELO, V.L.; LAVORENTI, A.; PACOVSKY, R.S. Transformation pathways of ¹⁴C-chlorothalonil in tropical soils. **Archives of Environmental Contamination and Toxicology**, v.40, p.295-302, 2001.

REGO, R.S. **Characterization and genesis of soils with plynthite from Marajó Island, PA**. 1986, 156p. (M.Sc. Dissertation) - UFRRJ, Itaguaí.

RESENDE, M.; CURTI, N.; SANTANA, D.P. **Pedologia e fertilidade do solo: interações e aplicações**. Lavras: Ministério da Educação/ ESAL, 1988. 84p.

ROCHA, W.S.D.; REGITANO, J.B.; ALLEONI, L.R.F.; TORNISIELO, V.L. Sorption of imazaquin in soils with positive balance of charges. **Chemosphere**, v.49, p.263-270, 2002.

RODRIGUES, T.E. **Characterization and genesis of Brown soils from alkaline rocks of Poços de Caldas, MG**. 1984, 200p. (Ph.D. Thesis) - ESALQ, Piracicaba.

SANTOS, H.G. dos. **Soils intermediate between Red-Yellow Latosol and Red-Yellow Podzolic with low activity clay**: definition and differentiation. 1986, 293p. (Ph.D. Thesis) - UFRRJ, Itaguaí.

SAS Institute. **SAS/STAT user's guide**: Version 6. 4.ed. Cary: SAS Institute, 1989. v.2, 84p. (The NLIN Procedure, p.1135-1193).

SCHWARZENBACH, R.P.; GSCHWEND, P.M.; IMBODEN, D.M. **Environmental organic chemistry**. New York: John Wiley, 1993. 681p.

SOUZA, M.D.; BOEIRA, R.C.; GOMES, M.A.F. Adsorção e desorção de diuron em solos tropicais. **Pesticidas**: Revista de Ecotoxicologia e Meio Ambiente, v.10, p.113-124, jan./dez. 2000.

SOUZA, M.D.; BOEIRA, R.C.; GOMES, M.A.F.; FERRACINI, V.L.; MAIA, A.H.N. Adsorção e lixiviação de tebuthiuron em três tipos de solos. **Revista Brasileira de Ciência do Solo**, v.25, p.1053-1061, 2001.

TOMLIN, C.D.S. **The pesticide manual**. Farnham: British Crop Protection Council, 2000. 1250p.

VIGH, M.; DI GUARDO, A. Predictive approaches for the evaluation of pesticide exposure. In: VIGH, M.; FUNARI, E. (Ed.). **Pesticide risk in groundwater**. Boca Raton: Lewis Publishers, 1995. p.73-100.

Embrapa

Meio Ambiente

Ministério da Agricultura,
Pecuária e Abastecimento

