

## MATERIAL SUPLEMENTAR

**Éteres difenílicos polibromados (PBDE) como contaminantes persistentes: ocorrência, comportamento no ambiente e estratégias analíticas**

**Daniel L. R. Anunciação<sup>a</sup>, Fernanda V. Almeida<sup>a</sup>, Emerson L. Y. Hara<sup>b</sup>, Marco T. Grassi<sup>b</sup> e Fernando F. Sodré<sup>a,\*</sup>**

<sup>a</sup>Instituto de Química, Universidade de Brasília, Campus Darcy Ribeiro, 70910-000 Brasília – DF, Brasil

<sup>b</sup>Departamento de Química, Universidade Federal do Paraná, Centro Politécnico, CP 19032, 81531-980 Curitiba – PR, Brasil

\*e-mail: ffsodre@unb.br

**Tabela 1S.** Quantidade de átomos de bromo substituintes e número de congêneres dos PBDE

Átomos de Bromo	Fórmula Molecular	Massa molar (g mol <sup>-1</sup> )	Nº. de congêneres
1	C <sub>12</sub> H <sub>9</sub> OBr	249,103	3
2	C <sub>12</sub> H <sub>8</sub> OBr <sub>2</sub>	327,999	12
3	C <sub>12</sub> H <sub>7</sub> OBr <sub>3</sub>	406,895	24
4	C <sub>12</sub> H <sub>6</sub> OBr <sub>4</sub>	485,791	42
5	C <sub>12</sub> H <sub>5</sub> OBr <sub>5</sub>	564,687	46
6	C <sub>12</sub> H <sub>4</sub> OBr <sub>6</sub>	643,584	42
7	C <sub>12</sub> H <sub>3</sub> OBr <sub>7</sub>	722,479	24
8	C <sub>12</sub> H <sub>2</sub> OBr <sub>8</sub>	801,376	12
9	C <sub>12</sub> H <sub>1</sub> OBr <sub>9</sub>	880,272	3
10	C <sub>12</sub> OBr <sub>10</sub>	959,167	1
		Total	209

**Tabela 2S.** Nomenclatura dos PBDE segundo a IUPAC e a classificação Ballschmiter-Zell (BZ)

Nome (BZ)	Nome IUPAC	Nome (BZ)	Nome IUPAC
BDE-1	2-bromodifenil éter	BDE-106	2,3,3',4,5-pentabromodifenil éter
BDE-2	3-bromodifenil éter	BDE-107	2,3,3',4',5-pentabromodifenil éter
BDE-3	4-bromodifenil éter	BDE-108	2,3,3',4,5'-pentabromodifenil éter
BDE-4	2,2'-dibromodifenil éter	BDE-109	2,3,3',4,6-pentabromodifenil éter
BDE-5	2,3-dibromodifenil éter	BDE-110	2,3,3',4',6-pentabromodifenil éter
BDE-6	2,3'-dibromodifenil éter	BDE-111	2,3,3',5,5'-pentabromodifenil éter
BDE-7	2,4-dibromodifenil éter	BDE-112	2,3,3',5,6-pentabromodifenil éter
BDE-8	2,4'-dibromodifenil éter	BDE-113	2,3,3',5',6-pentabromodifenil éter
BDE-9	2,5-dibromodifenil éter	BDE-114	2,3,4,4',5-pentabromodifenil éter
BDE-10	2,6-dibromodifenil éter	BDE-115	2,3,4,4',6-pentabromodifenil éter
BDE-11	3,3'-dibromodifenil éter	BDE-116	2,3,4,5,6-pentabromodifenil éter
BDE-12	3,4-dibromodifenil éter	BDE-117	2,3,4',5,6-pentabromodifenil éter
BDE-13	3,4'-dibromodifenil éter	BDE-118	2,3',4,4',5-pentabromodifenil éter
BDE-14	3,5-dibromodifenil éter	BDE-119	2,3',4,4',6-pentabromodifenil éter
BDE-15	4,4'-dibromodifenil éter	BDE-120	2,3',4,5,5'-pentabromodifenil éter
BDE-16	2,2',3-tribromodifenil éter	BDE-121	2,3',4,5',6-pentabromodifenil éter
BDE-17	2,2',4-tribromodifenil éter	BDE-122	2,3,3',4',5'-pentabromodifenil éter
BDE-18	2,2',5-tribromodifenil éter	BDE-123	2,3',4,4',5'-pentabromodifenil éter
BDE-19	2,2',6-tribromodifenil éter	BDE-124	2,3',4',5,5'-pentabromodifenil éter
BDE-20	2,3,3'-tribromodifenil éter	BDE-125	2,3',4',5',6-pentabromodifenil éter
BDE-21	2,3,4-tribromodifenil éter	BDE-126	3,3',4,4',5-pentabromodifenil éter
BDE-22	2,3,4'-tribromodifenil éter	BDE-127	3,3',4,5,5'-pentabromodifenil éter
BDE-23	2,3,5-tribromodifenil éter	BDE-128	2,2',3,3',4,4'-hexabromodifenil éter
BDE-24	2,3,6-tribromodifenil éter	BDE-129	2,2',3,3',4,5-hexabromodifenil éter
BDE-25	2,3',4-tribromodifenil éter	BDE-130	2,2',3,3',4,5'-hexabromodifenil éter
BDE-26	2,3',5-tribromodifenil éter	BDE-131	2,2',3,3',4,6-hexabromodifenil éter
BDE-27	2,3',6-tribromodifenil éter	BDE-132	2,2',3,3',4,6'-hexabromodifenil éter
BDE-28	2,4,4'-tribromodifenil éter	BDE-133	2,2',3,3',5,5'-hexabromodifenil éter
BDE-29	2,4,5-tribromodifenil éter	BDE-134	2,2',3,3',5,6-hexabromodifenil éter
BDE-30	2,4,6-tribromodifenil éter	BDE-135	2,2',3,3',5,6'-hexabromodifenil éter
BDE-31	2,4',5-tribromodifenil éter	BDE-136	2,2',3,3',6,6'-hexabromodifenil éter
BDE-32	2,4',6-tribromodifenil éter	BDE-137	2,2',3,4,4',5-hexabromodifenil éter
BDE-33	2,3',4'-tribromodifenil éter	BDE-138	2,2',3,4,4',5'-hexabromodifenil éter

Nome (BZ)	Nome IUPAC	Nome (BZ)	Nome IUPAC
BDE-34	2,3',5'-tribromodifenil éter	BDE-139	2,2',3,4,4',6-hexabromodifenil éter
BDE-35	3,3',4'-tribromodifenil éter	BDE-140	2,2',3,4,4',6'-hexabromodifenil éter
BDE-36	3,3',5'-tribromodifenil éter	BDE-141	2,2',3,4,5,5'-hexabromodifenil éter
BDE-37	3,4,4'-tribromodifenil éter	BDE-142	2,2',3,4,5,6-hexabromodifenil éter
BDE-38	3,4,5'-tribromodifenil éter	BDE-143	2,2',3,4,5,6'-hexabromodifenil éter
BDE-39	3,4',5'-tribromodifenil éter	BDE-144	2,2',3,4,5',6-hexabromodifenil éter
BDE-40	2,2',3,3'-tetrabromodifenil éter	BDE-145	2,2',3,4,6,6'-hexabromodifenil éter
BDE-41	2,2',3,4-tetrabromodifenil éter	BDE-146	2,2',3,4',5,5'-hexabromodifenil éter
BDE-42	2,2',3,4'-tetrabromodifenil éter	BDE-147	2,2',3,4',5,6-hexabromodifenil éter
BDE-43	2,2',3,5-tetrabromodifenil éter	BDE-148	2,2',3,4',5,6'-hexabromodifenil éter
BDE-44	2,2',3,5'-tetrabromodifenil éter	BDE-149	2,2',3,4',5',6-hexabromodifenil éter
BDE-45	2,2',3,6-tetrabromodifenil éter	BDE-150	2,2',3,4',6,6'-hexabromodifenil éter
BDE-46	2,2',3,6'-tetrabromodifenil éter	BDE-151	2,2',3,5,5',6-hexabromodifenil éter
BDE-47	2,2',4,4'-tetrabromodifenil éter	BDE-152	2,2',3,5,6,6'-hexabromodifenil éter
BDE-48	2,2',4,5-tetrabromodifenil éter	BDE-153	2,2',4,4',5,5'-hexabromodifenil éter
BDE-49	2,2',4,5'-tetrabromodifenil éter	BDE-154	2,2',4,4',5,6'-hexabromodifenil éter
BDE-50	2,2',4,6-tetrabromodifenil éter	BDE-155	2,2',4,4',6,6'-hexabromodifenil éter
BDE-51	2,2',4,6'-tetrabromodifenil éter	BDE-156	2,3,3',4,4',5-hexabromodifenil éter
BDE-52	2,2',5,5'-tetrabromodifenil éter	BDE-157	2,3,3',4,4',5'-hexabromodifenil éter
BDE-53	2,2',5,6'-tetrabromodifenil éter	BDE-158	2,3,3',4,4',6-hexabromodifenil éter
BDE-54	2,2',6,6'-tetrabromodifenil éter	BDE-159	2,3,3',4,5,5'-hexabromodifenil éter
BDE-55	2,3,3',4-tetrabromodifenil éter	BDE-160	2,3,3',4,5,6-hexabromodifenil éter
BDE-56	2,3,3',4'-tetrabromodifenil éter	BDE-161	2,3,3',4,5',6-hexabromodifenil éter
BDE-57	2,3,3',5-tetrabromodifenil éter	BDE-162	2,3,3',4',5,5'-hexabromodifenil éter
BDE-58	2,3,3',5'-tetrabromodifenil éter	BDE-163	2,3,3',4',5,6-hexabromodifenil éter
BDE-59	2,3,3',6-tetrabromodifenil éter	BDE-164	2,3,3',4',5',6-hexabromodifenil éter
BDE-60	2,3,4,4'-tetrabromodifenil éter	BDE-165	2,3,3',5,5',6-hexabromodifenil éter
BDE-61	2,3,4,5-tetrabromodifenil éter	BDE-166	2,3,4,4',5,6-hexabromodifenil éter
BDE-62	2,3,4,6-tetrabromodifenil éter	BDE-167	2,3',4,4',5,5'-hexabromodifenil éter
BDE-63	2,3,4',5-tetrabromodifenil éter	BDE-168	2,3',4,4',5',6-hexabromodifenil éter
BDE-64	2,3,4',6-tetrabromodifenil éter	BDE-169	3,3',4,4',5,5'-hexabromodifenil éter
BDE-65	2,3,5,6-tetrabromodifenil éter	BDE-170	2,2',3,3',4,4',5-heptabromodifenil éter
BDE-66	2,3',4,4'-tetrabromodifenil éter	BDE-171	2,2',3,3',4,4',6-heptabromodifenil éter
BDE-67	2,3',4,5-tetrabromodifenil éter	BDE-172	2,2',3,3',4,5,5'-heptabromodifenil éter
BDE-68	2,3',4,5'-tetrabromodifenil éter	BDE-173	2,2',3,3',4,5,6-heptabromodifenil éter
BDE-69	2,3',4,6-tetrabromodifenil éter	BDE-174	2,2',3,3',4,5,6'-heptabromodifenil éter
BDE-70	2,3',4',5-tetrabromodifenil éter	BDE-175	2,2',3,3',4,5',6-heptabromodifenil éter
BDE-71	2,3',4',6-tetrabromodifenil éter	BDE-176	2,2',3,3',4,6,6'-heptabromodifenil éter
BDE-72	2,3',5,5'-tetrabromodifenil éter	BDE-177	2,2',3,3',4,5',6'-heptabromodifenil éter
BDE-73	2,3',5',6-tetrabromodifenil éter	BDE-178	2,2',3,3',5,5',6-heptabromodifenil éter
BDE-74	2,4,4',5-tetrabromodifenil éter	BDE-179	2,2',3,3',5,6,6'-heptabromodifenil éter
BDE-75	2,4,4',6-tetrabromodifenil éter	BDE-180	2,2',3,4,4',5,5'-heptabromodifenil éter
BDE-76	2,3',4',5'-tetrabromodifenil éter	BDE-181	2,2',3,4,4',5,6-heptabromodifenil éter
BDE-77	3,3',4,4'-tetrabromodifenil éter	BDE-182	2,2',3,4,4',5,6'-heptabromodifenil éter
BDE-78	3,3',4,5-tetrabromodifenil éter	BDE-183	2,2',3,4,4',5',6-heptabromodifenil éter
BDE-79	3,3',4,5'-tetrabromodifenil éter	BDE-184	2,2',3,4,4',6,6'-heptabromodifenil éter
BDE-80	3,3',5,5'-tetrabromodifenil éter	BDE-185	2,2',3,4,5,5',6-heptabromodifenil éter

Nome (BZ)	Nome IUPAC	Nome (BZ)	Nome IUPAC
BDE-81	3,4,4',5-tetrabromodifenil éter	BDE-186	2,2',3,4,5,6,6'-heptabromodifenil éter
BDE-82	2,2',3,3',4-pentabromodifenil éter	BDE-187	2,2',3,4',5,5',6-heptabromodifenil éter
BDE-83	2,2',3,3',5-pentabromodifenil éter	BDE-188	2,2',3,4',5,6,6'-heptabromodifenil éter
BDE-84	2,2',3,3',6-pentabromodifenil éter	BDE-189	2,3,3',4,4',5,5'-heptabromodifenil éter
BDE-85	2,2',3,4,4'-pentabromodifenil éter	BDE-190	2,3,3',4,4',5,6-heptabromodifenil éter
BDE-86	2,2',3,4,5-pentabromodifenil éter	BDE-191	2,3,3',4,4',5',6-heptabromodifenil éter
BDE-87	2,2',3,4,5'-pentabromodifenil éter	BDE-192	2,3,3',4,5,5',6-heptabromodifenil éter
BDE-88	2,2',3,4,6-pentabromodifenil éter	BDE-193	2,3,3',4',5,5',6-heptabromodifenil éter
BDE-89	2,2',3,4,6'-pentabromodifenil éter	BDE-194	2,2',3,3',4,4',5,5'-octabromodifenil éter
BDE-90	2,2',3,4',5-pentabromodifenil éter	BDE-195	2,2',3,3',4,4',5,6-octabromodifenil éter
BDE-91	2,2',3,4',6-pentabromodifenil éter	BDE-196	2,2',3,3',4,4',5,6'-octabromodifenil éter
BDE-92	2,2',3,5,5'-pentabromodifenil éter	BDE-197	2,2',3,3',4,4',6,6'-octabromodifenil éter
BDE-93	2,2',3,5,6-pentabromodifenil éter	BDE-198	2,2',3,3',4,5,5',6-octabromodifenil éter
BDE-94	2,2',3,5,6'-pentabromodifenil éter	BDE-199	2,2',3,3',4,5,5',6'-octabromodifenil éter
BDE-95	2,2',3,5',6-pentabromodifenil éter	BDE-200	2,2',3,3',4,5,6,6'-octabromodifenil éter
BDE-96	2,2',3,6,6'-pentabromodifenil éter	BDE-201	2,2',3,3',4,5',6,6'-octabromodifenil éter
BDE-97	2,2',3,4',5'-pentabromodifenil éter	BDE-202	2,2',3,3',5,5',6,6'-octabromodifenil éter
BDE-98	2,2',3,4',6'-pentabromodifenil éter	BDE-203	2,2',3,4,4',5,5',6-octabromodifenil éter
BDE-99	2,2',4,4',5-pentabromodifenil éter	BDE-204	2,2',3,4,4',5,6,6'-octabromodifenil éter
BDE-100	2,2',4,4',6-pentabromodifenil éter	BDE-205	2,3,3',4,4',5,5',6-octabromodifenil éter
BDE-101	2,2',4,5,5'-pentabromodifenil éter	BDE-206	2,2',3,3',4,4',5,5',6-nonabromodifenil éter
BDE-102	2,2',4,5,6'-pentabromodifenil éter	BDE-207	2,2',3,3',4,4',5,6,6'-nonabromodifenil éter
BDE-103	2,2',4,5',6-pentabromodifenil éter	BDE-208	2,2',3,3',4,5,5',6,6'-nonabromodifenil éter
BDE-104	2,2',4,6,6'-pentabromodifenil éter	BDE-209	decabromodifenil éter
BDE-105	2,3,3',4,4'-pentabromodifenil éter		