

Anexo 1

Características Físico-químicas [40, 74, 116, 184, 185]

Tabela A1.1: Principais características físico-químicas dos compostos estudados.

	E3	BPA	DES	E1	E2
Estrutura molecular					
Categoria	Estrogénio natural	Plastificante (monómero)	Estrogénio sintético	Estrogénio esteróide natural ou sintético	Estrogénio natural
Fórmula molecular	C ₁₈ H ₂₄ O ₃	C ₁₅ H ₁₆ O ₂	C ₁₈ H ₂₀ O ₂	C ₁₈ H ₂₂ O ₂	C ₁₈ H ₂₄ O ₂
Massa Molecular (g/mol)	288,38	228,29	268,35	270,37	272,38
Solubilidade em água (mg/L a 20 °C)	13	300*	12	13	13
Pressão de Vapor	8,9E-13	ND	ND	3,1E-08	3,1E-08
Ponto de fusão (°C)	285	156	169	255	176
Nº CAS	50-27-1	80-05-7	6898-97-1	53-16-7	50-28-2
	EE2	PROG	OP	MeEE2	NP
Estrutura molecular					
Categoria	Estrogénio sintético	Progestogénio	Alquilfenol	Estrogénio sintético	Alquilfenol
Fórmula molecular	C ₂₀ H ₂₄ O ₂	C ₂₁ H ₃₀ O ₂	C ₁₄ H ₂₂ O	C ₂₁ H ₂₆ O ₂	C ₁₅ H ₂₄ O
Massa Molecular (g/mol)	296,40	314,46	206,32	310,43	220,35
Solubilidade em água (mg/L a 20 °C)	4,8	8,8*	19*	0,3	4,9*
Pressão de Vapor	6,0E-09	ND	1,0E+00	1,0E-07	1,01E-03
Ponto de fusão (°C)	183	131	83	151	ND
Nº CAS	57-63-6	57-83-0	140-66-9	72-33-3	84852-15-3

E3: estríol; BPA: bisfenol A; DES: dietilestilbestrol; E1: estrona; E2: 17β-estradiol; EE2: 17α-etinilestradiol; PROG: progesterona; OP: octilfenol; MeEE2: mestranol; NP: nonilfenol.

*: pressão de vapor a 25 °C; ND: informação indisponível.