

Titre: Développement de facteurs de caractérisation pour les mélanges complexes d'hydrocarbures pour l'évaluation de l'impact écotoxicité aquatique en analyse du cycle de vie
Title:

Auteur: Émilie Bamard
Author:

Date: 2010

Type: Mémoire ou thèse / Dissertation or Thesis

Référence: Bamard, É. (2010). Développement de facteurs de caractérisation pour les mélanges complexes d'hydrocarbures pour l'évaluation de l'impact écotoxicité aquatique en analyse du cycle de vie [Mémoire de maîtrise, École Polytechnique de Montréal]. PolyPublie. <https://publications.polymtl.ca/449/>
Citation:

 **Document en libre accès dans PolyPublie**
Open Access document in PolyPublie

URL de PolyPublie: <https://publications.polymtl.ca/449/>
PolyPublie URL:

Directeurs de recherche: Louise Deschênes
Advisors:

Programme: Génie chimique
Program:

UNIVERSITÉ DE MONTRÉAL

DÉVELOPPEMENT DE FACTEURS DE CARACTÉRISATION POUR LES
MÉLANGES COMPLEXES D'HYDROCARBURES POUR L'ÉVALUATION
DE L'IMPACT ÉCOTOXICITÉ AQUATIQUE EN ANALYSE DU CYCLE DE
VIE

ÉMILIE BAMARD

DÉPARTEMENT DE GÉNIE CHIMIQUE

ÉCOLE POLYTECHNIQUE DE MONTRÉAL

MÉMOIRE PRÉSENTÉ EN VUE DE L'OBTENTION
DU DIPLÔME DE MAÎTRISE ÈS SCIENCES APPLIQUÉES

(GÉNIE CHIMIQUE)

DÉCEMBRE 2010

UNIVERSITÉ DE MONTRÉAL

ÉCOLE POLYTECHNIQUE DE MONTRÉAL

Ce mémoire intitulé:

DÉVELOPPEMENT DE FACTEURS DE CARACTÉRISATION POUR LES MÉLANGES
COMPLEXES D'HYDROCARBURES POUR L'ÉVALUATION DE L'IMPACT
ÉCOTOXICITÉ AQUATIQUE EN ANALYSE DU CYCLE DE VIE

présenté par : BAMARD Émilie

en vue de l'obtention du diplôme de : Maîtrise ès sciences appliquées

a été dûment accepté par le jury d'examen constitué de :

M. SAVADOGO Oumarou, D. d'État, président

Mme DESCHÊNES Louise, Ph.D., membre et directrice de recherche

M. SCHOEFS Olivier, Ph.D., membre

DÉDICACE

*A mes parents et toute ma famille,
Qui sont ma force et mon inspiration*

REMERCIEMENTS

Je souhaite remercier le CIRAIG pour m'avoir permis de réaliser ce projet de recherche durant ces deux années. Je remercie plus particulièrement Louise Deschênes et Cécile Bulle pour leur soutien, leur disponibilité et leurs conseils tout au long des travaux.

Je tiens à remercier Sandra Estrela pour ses corrections et sa disponibilité quelque soit le moment et le temps imparti.

Je tiens à remercier toutes les personnes, amis proches ou éloignés, pour leur soutien, leurs conseils ou encore leur vision des choses qui m'ont permis de prendre du recul et de regarder certaine situation différemment.

Je tiens tout particulièrement à remercier mes parents, qui m'ont appris qu'il fallait toujours se battre sans jamais laisser tomber et sans qui je n'aurais très certainement pas pu réaliser tout ce parcours; ma famille (chacun d'entre eux) pour la force qu'elle me procure et Greg pour son soutien continuel même dans les pires moments où personne ne garderait patience.

Enfin, merci aux partenaires de la Chaire internationale en analyse du cycle de vie pour leur soutien financier : Arcelor-Mittal, Bell Canada, Cascades, Eco Entreprises Québec/Recyc-Québec, Groupe EDF/GDF-SUEZ, Hydro-Québec, Johnson & Johnson, Mouvement des caisses Desjardins, Rio Tinto Alcan, RONA, SAQ, Total et Veolia Environnement.

RÉSUMÉ

L'Analyse du Cycle de Vie (ACV) est un outil qui évalue les impacts potentiels des émissions de contaminants dans l'environnement tout au long du cycle de vie d'un produit, procédé ou service. Les émissions de mélanges d'hydrocarbures, tels que les produits pétroliers, sont très fréquentes lors des activités industrielles (essence, diesel), particulièrement lors de déversements dans les fleuves et les océans. Or, ce type de mélange n'est pas caractérisé lors de l'Évaluation des Impacts du Cycle de Vie (ÉICV), qui correspond à la troisième étape d'une ACV. Actuellement, les facteurs de caractérisation (FC) considérés sont soit le plus faible et le plus élevé des constituants du mélange à l'étude, soit celui de substances supposées représentatives du mélange, soit ceux issus du fractionnement du mélange ou encore les impacts des différents composés sont additionnés. Les interactions pouvant exister entre les composés ne sont alors pas prises en compte, car les FC considérés sont pour des substances seules et non résultants de tous les constituants en présence. Il est alors important de développer des facteurs de caractérisation pour des mélanges complexes d'hydrocarbures afin de pouvoir évaluer, en ACV, les impacts potentiels de ces derniers sur les écosystèmes aquatiques.

Ce projet porte sur le cas de l'huile de traitement des poteaux de bois sans pentachlorophénol, qui est un mélange d'hydrocarbures issu des processus de distillation de l'industrie pétrolière. L'objectif principal de la recherche est de développer des FC pour la catégorie d'impact *écotoxicité aquatique* pour des mélanges organiques complexes, dont les constituants présentent un mode d'action toxique commun, et pour lesquels les facteurs de sort (FF) ont été calculés pour différents compartiments environnementaux. Des FF ont été déterminés expérimentalement afin de prendre en compte les interactions entre co-contaminants. Ces FC expérimentaux ont alors été comparés avec les FC obtenus à partir du calcul des FF en utilisant différentes méthodes théoriques de regroupement des substances de propriétés et de devenir similaires dans l'environnement.

L'hypothèse de recherche de cette étude est : « Dans un contexte d'ÉICV et pour la catégorie *écotoxicité aquatique*, les facteurs de caractérisation (FC) théoriques pour un mélange complexe d'hydrocarbures, développés en utilisant les propriétés des principales fractions du mélange, ont des valeurs qui ne sont pas significativement différentes des FC obtenus à partir de mesures expérimentales, qui prennent en compte les interactions pouvant exister entre co-contaminants. »

Comme les hydrocarbures pétroliers constituent des mélanges dont les constituants possèdent un mode d'action toxique commun, l'huile utilisée pour le traitement des poteaux de bois a été choisie pour ce projet. Il a fallu, dans un premier temps, déterminer des méthodes permettant de calculer des FC pour des mélanges complexes. La composition de l'huile de traitement de poteaux, qui a été utilisée dans le cadre de ce projet, devait alors être déterminée. Les analyses expérimentales qui auraient permis de le faire sont coûteuses, encore en développement et peu utilisées. Les constituants du mélange à l'étude ont donc été estimés à partir d'une base de données d'hydrocarbures et en prenant en compte la plage d'ébullition de l'huile à poteaux (199°C – 350°C). Une revue de littérature sur le traitement des mélanges complexes en terme de calcul de sort ou d'analyse de risque a permis de mettre en évidence deux méthodes développées en dehors du contexte de l'ACV: la Hydrocarbon Block Method (méthode HBM) et la méthode du Total Petroleum Hydrocarbon Working Group (TPHWG). Ces deux méthodes permettent de regrouper les substances ayant des propriétés et des comportements dans l'environnement similaires et donc de calculer de façon plus pertinente le facteur de sort des mélanges d'hydrocarbures. La méthode HBM considère la température d'ébullition des composés ainsi que leur structure chimique alors que la méthode du TPHWG utilise leur nombre de carbone équivalent (ECN) en plus de leur groupe chimique. Ces méthodes ont permis ensuite de regrouper les constituants potentiels en plusieurs fractions. Les fractions issues des travaux du TPHWG et leurs propriétés ont été directement appliquées. La méthode a ensuite été affinée afin d'être plus représentative des constituants potentiels du mélange étudié. Dans un second temps, les FC théoriques et d'autres expérimentaux ont été calculés et comparés. Afin d'effectuer les calculs de ces facteurs, il a fallu définir les différentes propriétés physico-chimiques des constituants potentiels ainsi que celle des groupes de composés formés grâce à la méthode du TPHWG. Ceci a été réalisé en utilisant la 'CONCAWE Library' une base de données qui regroupe plus de 1500 hydrocarbures et leurs propriétés. Certaines propriétés (masse molaire, coefficient de partition carbone organique-eau, coefficient de partition octanol-eau, solubilité aqueuse, pression de vapeur, donnée de toxicité EC₅₀, constante de Henry) des fractions définies par le TPHWG étaient disponibles dans leur rapport. Les constantes de dégradation dans l'air, l'eau, les sédiments et le sol sont des valeurs par défaut provenant du modèle USEtox. Les propriétés pour les fractions affinées, adaptées pour les constituants de cette étude, ont été calculées à l'aide de corrélations, développées pour chaque classe chimique dans le cadre de ce travail de recherche, et

du nombre de carbone équivalent moyen de chacune des fractions. Ensuite, les propriétés des fractions selon la méthode HBM n'avaient pas à être déterminées car les FC pour chaque bloc se calculaient directement à partir de ceux des substances potentiellement présentes dans l'huile. Enfin, les propriétés du mélange étudié (constante de dégradation, coefficient de partition, pression de vapeur, solubilité aqueuse) ont été mesurées en laboratoire. Ces mesures expérimentales pour l'huile de traitement dans son ensemble permettent de prendre en compte les interactions qui peuvent exister au sein du mélange. Des FC expérimentaux ont alors pu être calculés. Une fois toutes les propriétés bien définies, le minimum, le maximum et la moyenne géométrique des différentes propriétés ont été déterminés pour les composés potentiels et pour les fractions selon le TPHWG. Les valeurs ont ensuite été comparées aux propriétés du mélange à l'étude. Les FC, et par conséquent les facteurs de sort (FF) et facteurs d'effet (EF), pour l'écotoxicité aquatique ont été calculés en utilisant la version 1.01 du modèle USEtox. Des FF, EF et FC écotoxicologiques ont alors été obtenus pour 1) chacun des composés potentiels, 2) chacune des fractions selon la méthode HBM, 3) chacune des fractions originelles du TPHWG telles que données dans leur étude, 4) les fractions du TPHWG affinées et 5) l'huile de traitement des poteaux dans son ensemble. Les facteurs selon la méthode HBM ont été calculés en prenant pour chaque bloc la moyenne arithmétique des FF, EF et FC des substances les composant. Ensuite, le minimum, le maximum et la moyenne géométrique étaient déterminés pour les calculs 1, 2, 3 et 4, puis étaient comparés entre eux et aux facteurs expérimentaux obtenus pour l'huile. Enfin, la détermination des propriétés, requises pour les calculs, constituant une étape clé du projet, une analyse de sensibilité a été réalisée afin de savoir lesquelles avaient le plus d'influence sur les résultats finaux.

Six cent soixante-dix sept constituants potentiels de l'huile ont été identifiés. Ils ont permis de former 13 fractions originelles des travaux du TPHWG, 18 fractions adaptées selon la méthode du TPHWG (quatre classes chimiques et huit plages d'ECN) et également 18 autres fractions selon la méthode HBM (quatre classes chimiques et cinq plages d'ébullition). De manière générale, les propriétés mesurées expérimentalement étaient éloignées de celles provenant de la littérature. Les propriétés de l'huile comme composé seul étaient soit inférieures de un à trois ordres de grandeur soit supérieures de deux ou trois ordres de grandeur par rapport à la moyenne géométrique de celles des constituants potentiels et des fractions selon la méthode du TPHWG, sauf pour la masse molaire, le coefficient de partition octanol-eau et la constante de dégradation

dans l'eau. Les valeurs des propriétés étaient cependant incluses dans l'intervalle de valeurs formé par le minimum et le maximum pour chacune des propriétés. Ensuite, les FF, EF et FC dans l'eau douce ont été comparés pour les méthodes de calcul 1, 2, 3, 4 et 5, pour une émission en polluants dans l'air urbain puis sur une échelle continentale dans l'air rural, l'eau douce, l'eau de mer, le sol naturel et le sol agricole. Les résultats montrent que les plages de FF, EF et FC obtenues par les méthodes de fractionnement sont plus petites que celles des composés potentiels. En effet, les fractions permettent de diminuer la variabilité des facteurs obtenus de un à trois ordres de grandeur comparativement aux constituants potentiels. De manière générale, les FF expérimentaux de l'huile de traitement dans l'eau douce sont plus élevés que ceux obtenus par les méthodes théoriques, alors que l'EF de l'huile de traitement est proche des EF théoriques (ordre de grandeur de 10^{+05} - 10^{+06} PAF.m³/kg). Par exemple, pour une émission dans le sol naturel le FF expérimental est de l'ordre de 10^{-03} jours (j) alors que les FF théoriques sont de l'ordre de 10^{-04} j. Le FC, qui est le résultat de la multiplication du FF avec l'EF, est alors plus élevé pour l'huile (10^{+06} PAF.m³.j/kg pour une émission dans l'eau douce) que pour les composés potentiels (10^{+05} PAF.m³.j/kg pour une émission dans l'eau douce). Les facteurs les plus élevés sont observés pour une émission dans l'eau douce.

L'analyse de sensibilité des propriétés a mis en évidence celles qui doivent être déterminées avec attention. La valeur de toxicité mise en entrée de USEtox (EC₅₀), le coefficient de partition octanol-eau, la constante de Henry et la constante de dégradation dans l'air étaient les paramètres ayant le plus d'influence sur les facteurs finaux. Un changement de leur valeur de plus et moins 50% entraînait de fortes variations des FF, EF et FC calculés (d'environ 30% à 200%). Les données de EC₅₀ dépendent fortement du K_{ow}, qui est issu d'algorithmes théoriques et non de mesures expérimentales. La constante de dégradation dans l'air est une valeur par défaut du modèle USEtox. Elle n'est donc pas représentative du mélange à l'étude, mais influe sur les résultats obtenus.

Des FC ont alors été obtenus pour le mélange qu'est l'huile de traitement de poteaux. Les méthodes théoriques semblent sous-estimer les facteurs issus de mesures expérimentales qui prennent en compte les interactions potentielles entre co-contaminants. En effet, pour une émission dans l'eau douce les FF et FC théoriques sont en général inférieurs aux expérimentaux de deux ordres de grandeur (10^{+02}). Cependant, les FC expérimentaux se trouvent dans les plages des FC obtenus avec les méthodes théoriques et ne sont pas très éloignés des moyennes

géométriques. Les méthodes issues de la littérature fournissent donc une bonne approximation des FC pour des mélanges complexes d'hydrocarbures et peuvent être utilisées afin de caractériser ce type de polluant dans les ACV.

Les FC obtenus se trouvent dans la plage de FC pour la méthode qui prend en compte le minimum et le maximum des FC des composés du mélange, mais sont bien plus élevés que ceux établis lorsque le mélange est assimilé à une seule fraction.

Les méthodes théoriques (HBM, TPHWG) peuvent cependant être améliorées. Des analyses en laboratoire afin de développer des fractions expérimentales et plus de propriétés, dont la toxicité, pour les différents composés permettraient d'aboutir à une méthode plus adaptée à ce type de polluant.

Les FC développés dans cette étude permettent alors de caractériser de manière plus réaliste les impacts potentiels de tels produits, comme par exemple lors d'un déversement de pétrole.

ABSTRACT

Life Cycle Assessment (LCA) is a tool used to assess the potential impacts of contaminant emissions to the environment over the whole life cycle of a product, process or service.

Hydrocarbon mixtures, such as petroleum products, are frequently emitted to the environment because of industrial activities (gasoline, diesel), particularly when considering oil spill in rivers and oceans. This type of mixture is not characterized in Life Cycle Impact Assessment (LCIA), which corresponds to the third phase of a LCA. Currently, the characterization factors (CFs) considered are either the lowest and the highest of the mixture constituents or the most representative substance one or obtained by fractioning the mixture or finally the impacts of the different constituents are summed. Potential interactions between components are then not taken into account, as the considered CFs are for single substances and not the result of all the components taken together. Consequently, it is important to develop characterization factors for hydrocarbon complex mixtures in order to be able to evaluate, in LCA, the potential impacts of those products on aquatic ecosystems.

This project is based on the case of the pole-treating oil without pentachlorophenol, which is a hydrocarbon mixture from distillation processes in the petroleum industry. The principal research objective is to develop CFs for the *aquatic ecotoxicity* impact category for organic complex mixtures, whose constituents have a common toxic mode of action, and for which fate factors (FF) have been calculated for several environmental compartments. Some FFs were determined by taking into account the interactions between co-contaminants. Those experimental CFs were then compared with others obtained from FFs calculated by using different theoretical methods, which group substances having similar properties and fate in the environment.

The research hypothesis of this study is: “In a LCIA context and for the *aquatic ecotoxicity* category, the hydrocarbon complex mixture theoretical characterization factors (CFs), developed by using the mixture principal fraction properties, have values which are not significantly different compared to the CF obtained from experimental measurements, which take into account potential interactions between co-contaminants.”

As petroleum hydrocarbons form mixtures whose constituents have a common toxic mode of action, the pole-treating oil was chosen. Firstly, methods had to be determined in order to

calculate CFs for complex mixtures. The composition of the pole-treating oil, which was used in this project, had then to be determined. Experimental analyses, which could have been used to do it, are expensive, still in development and rarely used. The studied mixture constituents were consequently assumed by using a database containing hydrocarbons and the boiling point range of the pole-treating oil (199°C – 350°C). A literature review on the consideration of the complex mixtures in fate calculation and risk analysis highlighted two methods developed outside the LCA context: the Hydrocarbon Block Method (HBM) and the Total Petroleum Hydrocarbon Criteria Working Group (TPHWG) method. These two methods make it possible to group substances which have similar properties and behaviour in the environment and then to calculate more accurately hydrocarbon mixture fate factor. The HBM considers the component boiling point and their chemical class while the TPHWG method uses their equivalent carbon number (ECN) as well as their chemical group. The pole-treating oil potential constituents were then grouped into several fractions by using the HBM and TPHWG methods. The original fractions from the TPHWG work and their properties were directly applied. The method was then refined in order to be more representative of the studied mixture potential constituents. After that, the theoretical CFs and experimental ones were calculated and compared. In order to calculate those factors, the physical-chemical properties had to be defined for the potential constituents as well as for the fractions formed by using the TPHWG method. This was performed by using the CONCWE Library, a database which contains more than 1500 hydrocarbons and their properties. Some properties (molecular weight, organic carbon-water partition coefficient, octanol-water partition coefficient, water solubility, vapor pressure, toxicity data EC_{50} , Henry law constant) of the original fractions of the TPHWG work were available in their report. The degradation constant in the air, water, sediments and soil are default values from the USEtox model. The refined fraction properties, adapted for the constituents of this study, were calculated by using correlations, which were developed for each chemical classes used in this research work, and the average equivalent carbon number of each fraction. Then, the fraction properties according to the HBM were not required, as the CF for each fraction was calculated directly from the pole-treating oil potential constituent ones. Finally, the properties of the studied mixture as a whole component (degradation constant, partition coefficient, vapor pressure, water solubility) were measured in laboratory. These oil experimental measurements make it possible to take into account the potential interactions between co-contaminants within the mixture. Experimental CFs could then

be calculated. Once all the properties were defined, the minimum, the maximum and the geometric mean of the different properties were determined for each potential constituents and TPHWG refined fractions. The values were then compared to the studied mixture properties. The CFs, and consequently the fate factors (FFs) and effect factors (EFs), for the *aquatic ecotoxicity* category were calculated by using the model USEtox version 1.01. Ecotoxicological FFs, EFs and CFs were then obtained for 1) each potential constituents, 2) each fractions according to the HBM, 3) each original fractions from the TPHWG as given in their study, 4) each TPHWG refined fractions and 5) the pole-treating oil as a whole component. The factors according to the HBM were calculated by taking for each fraction the arithmetic mean of the FFs, EFs and CFs of the substances contained in it. After that, the minimum, the maximum and the geometric mean were determined for the calculations 1, 2, 3 and 4, and were compared with each other and with the oil experimental ones. Finally, as the definition of the properties required for the calculations is a key part of the project, a sensitivity analysis was conducted in order to determine to which ones the final results are sensitive.

Six hundred and seventy seven pole-treating oil potential constituents were identified. They lead to the formation of 13 original TPHWG fractions, 18 refined ones according to the TPHWG method (four chemical classes and eight ECN ranges) and 18 fractions according to the HBM (four chemical classes and five boiling point ranges). Generally, the properties experimentally measured were different from the ones from literature. The properties of the oil as a whole component were either lower (one to three orders of magnitude) or higher (one or two orders of magnitude) than the potential constituent and TPHWG fraction geometric mean ones, except for the molecular weight, the octanol-water partition coefficient and the degradation constant in water. However, the property values were included in the value range created by the minimum and the maximum for each property. Then, the FFs, EFs and CFs in freshwater were compared for the calculations 1, 2, 3, 4 and 5 for a pollutant emission to urban air and then on a continental scale to rural air, freshwater, seawater, natural soil and agricultural soil. The results show that the FF, EF and CF ranges obtained by using the fractioning methods are smaller than the potential constituent ones. As a matter of fact, fractions reduce the obtained factor variability from one to three order of magnitude compared to the potential components. Generally, the pole-treating oil experimental FFs in freshwater are higher than those obtained by using the theoretical methods, while the pole-treating oil EF is close to the theoretical ones (order of magnitude of 10^{+05} – 10^{+06}

PAF.m³/kg). As an example, for an emission to natural soil the experimental FF is about 10⁻⁰³ days (d) while the theoretical FFs are about 10⁻⁰⁴ d. The CF, which is the result of the multiplication of the FF by the EF, is consequently higher for the oil (10⁺⁰⁶ PAF.m³.d/kg for an emission to freshwater) than the potential components (10⁺⁰⁵ PAF.m³.d/kg for an emission to freshwater). The highest factors are observed for an emission to freshwater.

The sensitivity analysis of the properties underlined those which have to be defines cautiously. The toxicity data used as input in USEtox (EC₅₀), the octanol-water partition coefficient, the Henry law constant and the degradation constant in the air are the parameters which influences the most the final factors. A change in their value of more and less 50% leaded to high FF, EF and CF variations (approximately 30% to 200%). The EC₅₀ data strongly depend on K_{ow}, which is the result of theoretical algorithms and experimental measurements. The degradation constant in the air is a default value taken in the USEtox model. Consequently, it is not representative of the studied mixture, but has an influence on the obtained results.

CFs were also calculated for the pole-treating oil mixture. The theoretical methods seem to underestimate the factors obtained from experimental measurements, which take into account potential interactions between co-contaminants. As a matter of fact, for an emission to freshwater theoretical FFs and CFs are generally lower than the experimental ones of two orders of magnitude (10⁺⁰²). However, the experimental CFs are contained within the CF ranges obtained by using the theoretical methods and are close to the geometric means. Consequently, the methods taken from literature give a good approximation of the CFs for hydrocarbon complex mixtures and can be used in order to characterize this type of pollutant in LCA studies.

The obtained CFs are included within the CF range for the method which takes into account the mixture constituent CF minimum and maximum, but are higher than those evaluated when the mixture is simplified to a single fraction. The theoretical methods can be improved. Laboratory analyses in order to develop experimental fractions and more properties, such as the toxicity, for the different compounds would lead to a method more suitable for this type of pollutant.

The CFs developed in this study can be used in order to characterize in a more realistic way the potential impacts of such products, as for oil spill for example.

TABLE DES MATIÈRES

DÉDICACE	III
REMERCIEMENTS	IV
RÉSUMÉ	V
ABSTRACT	X
TABLE DES MATIÈRES	XIV
LISTE DES TABLEAUX	XVII
LISTE DES FIGURES	XVIII
LISTE DES ANNEXES	XX
LISTE DES SIGLES ET ABRÉVIATIONS	XXI
CHAPITRE 1 INTRODUCTION	1
1.1 Contexte et problématique de l'étude	1
1.2 Hypothèse de recherche	2
1.3 Objectifs du projet de recherche	2
1.4 Contenu du mémoire	2
CHAPITRE 2 REVUE DE LITTÉRATURE	4
2.1 L'Analyse du Cycle de Vie (ACV)	4
2.1.1 Définition de l'Analyse du Cycle de Vie	4
2.1.2 Méthodologie de l'Analyse du Cycle de Vie	5
2.2 La catégorie d'impact écotoxicité aquatique	12
2.2.1 Modèles d'Évaluation des Impacts du Cycle de Vie (ÉICV) existants	14
2.2.2 Calcul des facteurs de sort et d'effet dans USEtox	18
2.3 La problématique des mélanges complexes	19
2.3.1 Les mélanges complexes organiques	19

2.3.2	Analyse des mélanges complexes	20
2.3.3	Les mélanges complexes en Évaluation des Impacts du Cycle de Vie (ÉICV).....	22
2.4	Considération des mélanges complexes d'hydrocarbures hors du contexte de l'ACV	23
2.4.1	Détermination de la composition du mélange	24
2.4.2	Groupement des constituants d'un mélange	24
2.4.3	Détermination des propriétés physico-chimiques	29
2.5	Calcul du sort environnemental pour les fractions établies selon la HBM.....	34
2.6	Conclusion de la revue de littérature	34
CHAPITRE 3 MÉTHODOLOGIE		36
3.1	Développement méthodologique pour le calcul de facteurs de caractérisation pour l'écotoxicité aquatique pour des mélanges d'hydrocarbures	36
3.1.1	Détermination des constituants potentiels de l'huile de traitement des poteaux	36
3.1.2	Définition de fractions	37
3.1.3	Détermination des propriétés nécessaires au calcul de l'impact.....	38
3.1.4	Calcul et comparaison des FF, EF et FC pour l'écotoxicité aquatique.....	41
3.1.5	Analyse de sensibilité	41
CHAPITRE 4 DÉVELOPPEMENT MÉTHODOLOGIQUE POUR LE CALCUL DE FACTEURS DE CARACTÉRISATION POUR L'ÉCOTOXICITÉ AQUATIQUE POUR DES MÉLANGES D'HYDROCARBURES EN ACV		42
4.1	Présentation de l'article.....	42
4.2	Methodological development for aquatic ecotoxicological characterization factor calculation for hydrocarbon mixtures in life cycle assessment	42
4.2.1	Abstract	42
4.2.2	Introduction.....	43

4.2.3	Materials and methods	46
4.2.4	Results and discussion	59
4.2.5	Conclusion	71
4.2.6	Acknowledgements	72
4.2.7	References	72
CHAPITRE 5 DÉVELOPPEMENT DE FACTEURS DE SORT (FF) POUR TOUS LES COMPARTIMENTS DE RÉCEPTION		77
5.1	FF dans l'air urbain	77
5.2	FF dans l'air continental (rural)	79
5.3	FF dans l'eau de mer	81
5.4	FF dans le sol naturel et le sol agricole	83
CHAPITRE 6 DISCUSSION GÉNÉRALE		88
6.1	Détermination des constituants potentiels	88
6.2	Définition des fractions	89
6.3	Calcul des propriétés	90
6.4	Calculs des FC et FF	91
CHAPITRE 7 CONCLUSION ET RECOMMANDATIONS		93
RÉFÉRENCES		95
ANNEXES		105

LISTE DES TABLEAUX

Tableau 2-1: Illustration de termes utilisés (ISO, 2006b).....	9
Tableau 2-2: Comparaison des méthodes d'Évaluation des Impacts du Cycle de Vie qui ont servi à développer le modèle consensus USEtox (Adapté de De Koning <i>et al.</i> , 2002; Rosenbaum <i>et al.</i> ; Rosenbaum <i>et al.</i> , 2007)	16
Tableau 2-3: Types de groupement établis par van de Meent <i>et al</i> (Adapté de van de Meent, <i>et al.</i> , 2009).....	25
Tableau 2-4: Groupement selon 7 plages de température d'ébullition et 2 classes chimiques (Adapté de van de Meent, <i>et al.</i> , 2009)	26
Tableau 2-5: Groupement de composés selon le nombre de carbone équivalent et la classe chimique (Adapté de Gustafson, <i>et al.</i> , 1997).....	27
Tableau 3-1: Corrélations pour la détermination des données de toxicité: EC ₅₀ (Veith & Broderius, 1990)	39
Table 4-1: Distribution of the assumed constituents within each determined fraction.....	49
Table 4-2: Method differences in CF determination.....	54
Table 4-3: Maximum, minimum and geometric mean of the potential constituent and fraction properties and properties of the pole-treating oil	60
Table 4-4: Sensitivity analysis of the results depending on the properties values (Boxes in grey represent the most sensitive parameters).....	69

LISTE DES FIGURES

Figure 2-1: Différentes étapes du cycle de vie d'un produit, service ou procédé	5
Figure 2-2 : Étapes constituant une analyse de cycle de vie (Adapté de ISO, 2006a).....	6
Figure 2-3: Les différentes catégories d'impact: intermédiaires et dommages (Adapté de Jolliet <i>et al.</i> , 2003).....	10
Figure 2-4: Chaîne de cause à effet pour la catégorie écotoxicité (Adapté de Hauschild & Pennington, 2002; Jolliet, <i>et al.</i> , 2003)	13
Figure 2-5: Exemple de la définition de groupements à partir du facteur de lixiviation (LF) (Adapté de Gustafson <i>et al.</i> , 1997).	27
Figure 2-6: : Exemple du développement de corrélation pour déterminer les propriétés des groupements (Adapté de Gustafson, <i>et al.</i> , 1997)	33
Figure 3-1: Représentation du LF en fonction des ECN pour tous les constituants potentiels de l'huile de traitement	38
Figure 4-1: Diagram of the leaching factor (LF) based on the equivalent carbon number (ECN) to define the fraction according to the TPHWG method	48
Figure 4-2: Correlations developed for the calculation of the water solubility of the fractions from the TPHWG method	56
Figure 4-3: Fate factors (FFs) for three different emission compartments with continental freshwater as the receiving compartment. The TPHWG method corresponds to the fractions directly taken from TPHWG work, while the refined TPHWG method corresponds to the fractions that were redefined by applying the entire TPHWG methodology to the study constituents. A: Emission to continental air; B: Emission to continental freshwater and C: Emission to continental natural soil.	64
Figure 4-4: Effect factors (EFs) of the potential constituents and theoretical	

methods as compared to the experimental CF of the oil. The TPHWG method corresponds to the fractions directly taken from TPHWG work, while the refined TPHWG method corresponds to the fractions that were redefined by applying the entire TPHWG methodology to the study constituents.	66
Figure 4-5: Characterization factors (CFs) obtained for three different emission compartments with continental freshwater as the receiving compartment. The TPHWG method corresponds to the fractions directly taken from TPHWG work, while the refined TPHWG method corresponds to the fractions that were redefined by applying the entire TPHWG methodology to the study constituents. A: Emission to continental air; B: Emission to continental freshwater and C: Emission to continental natural soil.	67
Figure 5-1: Représentation graphique des facteurs de sort (FF) pour le compartiment de réception air urbain	78
Figure 5-2: Représentation graphique des facteurs de sort (FF) pour le compartiment de réception air continental	80
Figure 5-3: Représentation graphique des facteurs de sort (FF) pour le compartiment de réception eau de mer	82
Figure 5-4: Représentation graphique des facteurs de sort (FF) pour le compartiment de réception sol naturel	84
Figure 5-5: Représentation graphique des facteurs de sort (FF) pour le compartiment de réception sol agricole	86

LISTE DES ANNEXES

ANNEXE 1 – Graphique représentant le développement des corrélations pour la détermination des propriétés des fractions selon la méthode du TPHWG	105
ANNEXE 2 – Distributions log normales des FC pour l'écotoxicité aquatique (compartiment d'émission : eau douce)	111
ANNEX 3 - S1 - Comparison of the properties of fuel oil no. 2 and pole-treating oil [1, 2]	112
ANNEX 4 - S2 - The 677 potential constituents of oil and their properties.....	113
ANNEXE 5 - S3 – The eighteen refined fractions obtained by applying the TPHWG method and their properties obtained from correlations	202
ANNEX 6 - S4 – The thirteen fractions directly taken from the TPHWG study and their properties	204
ANNEX 7 - S5 - The three other emission compartments for the fate factors (FFs) with continental freshwater as the receiving compartment are presented below.	206
ANNEX 8 - S6 - The three other emission compartments for the CFs results with continental freshwater as the receiving compartment are presented below.....	207

LISTE DES SIGLES ET ABRÉVIATIONS

ACV	Analyse du Cycle de Vie
ECN	Nombre de Carbone Equivalent
EF	Facteur d'effet
ÉICV	Évaluation des Impacts du Cycle de Vie
FC	Facteur de Caractérisation
FF	Facteur de sort
GC	<i>Capillary gas chromatography</i>
HAP	Hydrocarbures aromatiques polycycliques
HBM	<i>Hydrocarbon Block Method</i>
ICV	Inventaire du cycle de vie
ISO	Organisation internationale de normalisation
LCA	<i>Life cycle assessment</i>
LCIA	<i>Life cycle impact assessment</i>
LF	<i>Leaching factor</i> / facteur de lixiviation
PAF	<i>Potentially affected fraction</i>
PCP	Pentachlorophénol
TPHWG	<i>Total Petroleum Hydrocarbon Criteria Working Group</i>

CHAPITRE 1 INTRODUCTION

1.1 Contexte et problématique de l'étude

Les mélanges complexes de polluants organiques sont très présents dans l'environnement. Ils peuvent être de source naturelle, comme par exemple le gaz naturel (Enbridge, 2007; Ressources naturelles Canada, 2008), mais sont en grande partie de source anthropique. L'industrie pétrolière tient une grande place dans notre société. Le diesel, l'essence ou encore le kérosène sont des produits issus de la distillation du pétrole brut (Bélorgeot, 2010; Masterton & Slowinski, 1977), qui font partie intégrante de l'activité humaine.

Les dommages liés aux écosystèmes aquatiques et terrestres (pollution des sols, des eaux et de l'air) par les mélanges de polluants issus de l'activité à la fois humaine et industrielle sont nombreux : marées noires (Dumas, 2010; Rogel *et al.*, 2003), fuites de réservoirs de pétrole, rejets d'usine.

L'Analyse du Cycle de Vie (ACV) permet d'évaluer les impacts potentiels sur les écosystèmes d'une émission de polluant dans l'environnement (ISO, 2006a; Jolliet *et al.*, 2005). Cet outil est très intéressant dans la mesure où il considère l'ensemble des extractions et rejets sur l'ensemble du cycle de vie (de l'extraction des matières premières à la fin de vie) d'un produit, procédé ou service. Les aires de protection généralement considérées sont la qualité des écosystèmes, la santé humaine ou encore les ressources naturelles. Le développement de l'ACV, qui est une méthode encore récente, est important afin de rendre les résultats de ces études plus robustes et représentatifs de la réalité. Les différents polluants émis à l'environnement et leur comportement doivent donc être modélisés de manière réaliste et fiable.

Les mélanges complexes de composés organiques sont encore mal modélisés dans les études ACV actuellement réalisées (Cadotte *et al.*, 2007; Sanscartier *et al.*, 2010). Ce type de contaminants constitue un réel défi quant à sa caractérisation et sa prise en compte dans les études. La variabilité d'un mélange à un autre et les différentes interactions qui peuvent exister entre co-contaminants rendent la tâche difficile.

La forte présence de ces mélanges et le rôle qu'ils jouent dans les dommages causés aux écosystèmes mettent bien en évidence l'importance de mieux considérer ces polluants en ACV.

Leur modélisation permettrait par exemple de comparer de manière plus réaliste plusieurs techniques de réhabilitation de sites contaminés (Toffoletto *et al.*, 2005).

1.2 Hypothèse de recherche

L'hypothèse de recherche ayant guidé les travaux de ce projet de recherche est la suivante :

« Dans un contexte d'Évaluation des Impacts du Cycle de Vie (ÉICV) et pour la catégorie écotoxicité aquatique, les facteurs de caractérisation (FC) théoriques pour un mélange complexe d'hydrocarbures, développés en utilisant les propriétés des principales fractions du mélange, ont des valeurs qui se rapprochent du FC obtenu à partir de mesures expérimentales, qui prennent en compte les interactions pouvant exister entre co-contaminants. »

1.3 Objectifs du projet de recherche

L'objectif principal de ce projet, afin de répondre à l'hypothèse de recherche, est de développer des FC pour la catégorie d'impact *écotoxicité aquatique* pour des mélanges organiques complexes, dont les constituants présentent un mode d'action toxique commun, et pour lesquels les facteurs de sort (FF) ont été calculés pour différents compartiments environnementaux.

Afin de remplir cet objectif, différentes sous-étapes étaient nécessaires :

- Développer des FF, et par conséquent des FC, expérimentaux qui prennent en compte les interactions potentielles entre co-contaminants
- Développer des FC à partir de méthodes de regroupement de composés issues de la littérature
- Confronter les résultats théoriques et expérimentaux (FF, EF et FC)

1.4 Contenu du mémoire

Ce mémoire est constitué de différentes parties permettant de remplir chacun des objectifs mentionnés à la section 1.3. Le projet de recherche a conduit à la rédaction d'un article scientifique, qui a été soumis au journal *Environmental Toxicology and Chemistry*. Ce

manuscript constitue une partie centrale de ce projet et est présenté dans une section à part entière.

Tout d'abord, une revue de littérature est présentée afin de définir le contexte de l'analyse du cycle de vie (ACV), préciser les limites de cet outil, puis détailler la problématique des mélanges complexes au sein de l'ACV (Chapitre 2). Ensuite, la méthodologie (Chapitre 3) mise en place pour répondre aux deux premiers sous-objectifs mentionnés précédemment est expliquée. Le choix du mélange d'hydrocarbures à l'étude est expliqué, les mesures expérimentales détaillées et les principales méthodes de fractionnement définies. Les calculs de facteurs de caractérisations (FC), facteurs de sort (FF) et facteurs d'effet (EF) réalisés y sont également détaillés. Le Chapitre 4 est constitué de l'article soumis pour publication. Les principaux résultats sont présentés, décrits et discutés. Le chapitre suivant apporte des résultats supplémentaires qui ne sont pas présentés dans l'article. Il illustre les FF obtenus pour d'autres compartiments de réception que celui de l'eau douce, qui est étudié pour l'écotoxicité aquatique dont il est question dans ces travaux. Le Chapitre 6 consiste en la discussion des résultats obtenus en reprenant et en complétant les points abordés dans l'article. Les limites de l'étude y sont notamment abordées. Enfin, une conclusion et des recommandations sont faites (Chapitre 7).

CHAPITRE 2 REVUE DE LITTÉRATURE

Cette revue de littérature fait état des développements et des lacunes qui existent dans le domaine de l'évaluation de l'impact écotoxicité aquatique des mélanges d'hydrocarbures pétroliers dans un contexte d'Analyse du Cycle de Vie (ACV). L'ACV et ses limites sont présentées ainsi que la catégorie d'impact écotoxicité aquatique dans laquelle s'inscrit cette étude. Ensuite, la problématique des mélanges complexes est expliquée, ainsi que les méthodes de regroupement d'hydrocarbures développées en dehors de l'ACV pour une meilleure prise en compte des mélanges pétroliers. Enfin une conclusion de cette revue est faite afin de récapituler les manques présents en ACV vis-à-vis des mélanges complexes organiques.

2.1 L'Analyse du Cycle de Vie (ACV)

2.1.1 Définition de l'Analyse du Cycle de Vie

L'Analyse du Cycle de Vie (ACV) permet d'évaluer tous les impacts environnementaux potentiels associés aux différentes étapes du cycle de vie d'un produit, d'un service ou d'un procédé (adapté de (ISO, 2006a) et (Jolliet, *et al.*, 2005)). Les phases considérées dans le cycle de vie d'un produit, d'un service ou d'un procédé sont : l'extraction des matières premières, la production, la distribution, l'utilisation et la fin de vie (élimination des déchets ou recyclage) (Figure 2-1).

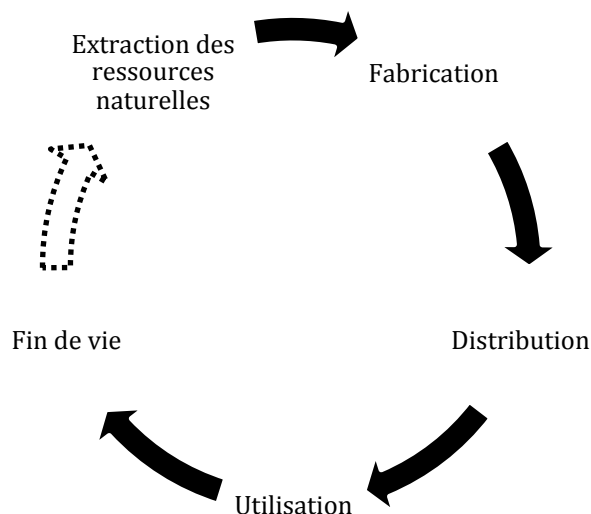


Figure 2-1: Différentes étapes du cycle de vie d'un produit, service ou procédé

Ce type d'outil permet d'identifier les améliorations possibles en termes d'efficacité environnementale, de développer de nouveaux produits, d'aider à la décision et de comparer deux produits, services ou procédés (ISO, 2006a, 2006b; Jolliet, *et al.*, 2005).

2.1.2 Méthodologie de l'Analyse du Cycle de Vie

La réalisation d'une Analyse du Cycle de Vie (ACV) se décompose selon ISO (ISO, 2006a, 2006b) en quatre principales phases : la définition des objectifs et du champ de l'étude, la phase d'inventaire, la phase d'évaluation des impacts et la phase d'interprétation. Cette dernière étape s'effectue tout au long de l'étude, comme l'illustre la Figure 2-2.

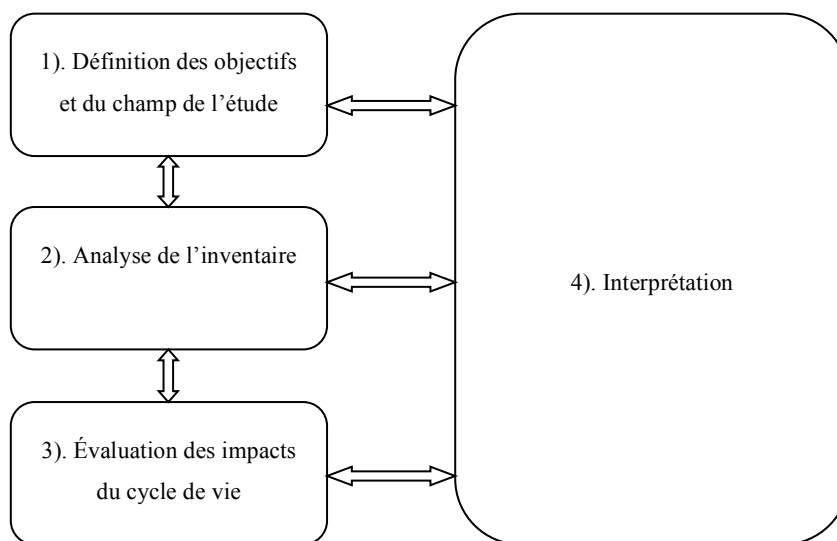


Figure 2-2 : Étapes constituant une analyse de cycle de vie (Adapté de ISO, 2006a)

Les différentes parties de l'ACV vont être à présent détaillées en mettant l'emphasis sur l'Évaluation des Impacts du Cycle de Vie. En effet, c'est dans cette phase de l'ACV que s'inscrit le projet à l'étude.

2.1.2.1 Définition des objectifs et du champ de l'étude

Cette première phase pose le problème et les caractéristiques de l'étude, ainsi que son but et le public visé (ISO, 2006a; Joliet, *et al.*, 2005).

Le champ de l'étude doit être clairement défini. Cela permet alors de s'assurer que le contenu de l'étude et son niveau de détail sont cohérents avec l'objectif fixé et permet de répondre à celui-ci. La définition du champ de l'étude doit définir les éléments suivants :

- Les fonctions du ou des systèmes de produit à l'étude.
- L'unité fonctionnelle (UF) : Elle représente la quantification de la fonction précédemment définie.
- Le système de produit : Il comprend tous les processus élémentaires constituant le cycle de vie du ou des produits à l'étude.

- Les frontières du système : Cette étape consiste à choisir quel niveau de détail va être considéré pour le système à l'étude.
- Le choix des catégories d'impact, de la méthode d'Évaluation des Impacts du Cycle de Vie (ÉICV) et d'interprétation. En choisissant la méthode d'ÉICV, les impacts considérés lors de la troisième étape de l'ACV sont fixés.
- Les hypothèses : Toutes les hypothèses posées et les simplifications réalisées lors de l'étude doivent être clairement énoncées et justifiées.
- La qualité des données : Cette spécification va permettre de se rendre compte de la fiabilité des résultats.
- Le type de revue critique : Interne ou externe, elle permet de vérifier et d'attester que les méthodes ont bien été appliquées et que les données utilisées sont cohérentes vis-à-vis de l'objectif fixé.

L'ACV est une méthode itérative. En effet, il est possible d'obtenir des informations nouvelles ou différentes tout au long de l'étude. Le champ de l'étude peut alors être modifié en fonction de ces nouvelles informations (Jolliet, *et al.*, 2005).

2.1.2.2 Inventaire du cycle de vie (ICV)

Cette deuxième phase de l'ACV consiste à recueillir des données et à quantifier les flux élémentaires (entrants et sortants) traversant le système de produit.

La collecte de données est une tâche fastidieuse. Afin d'améliorer les recherches, des bases de données existent. Les données recueillies directement auprès de l'entreprise ou du client sont des données primaires et constituent la meilleure information. Les informations prises dans les bases de données constituent des données secondaires et plus approximatives.

Préalablement aux calculs d'inventaire, les données doivent être vérifiées et validées (ISO, 2006b). Les calculs réalisés lors de l'ICV correspondent à la quantification des flux élémentaires (émissions dans l'air, l'eau et le sol et des extractions de ressources naturelles) et flux économiques (échanges entre les processus élémentaires) apparaissant dans le cycle de vie du ou des produits à l'étude. Les données recueillies doivent être rattachées aux processus élémentaires puis à l'unité fonctionnelle (Jolliet, *et al.*, 2005).

2.1.2.3 Évaluation des Impacts du Cycle de Vie (ÉICV)

L'Évaluation des Impacts du Cycle de Vie (ÉICV) constitue l'étape d'une ACV qui sera étudiée dans le cadre du projet. Les ressources extraites et les émissions dans l'eau, l'air et le sol des substances considérées ont été quantifiées lors de la phase précédente (paragraphe 2.1.2.2). L'ÉICV permet l'interprétation d'un point de vue environnemental des résultats de la phase d'inventaire et consiste à modéliser les différents mécanismes environnementaux décrivant le parcours d'une substance de son émission jusqu'à son impact final. C'est ce que l'on appelle la chaîne de cause à effet. Les résultats bruts de l'ICV ne sont pas directement comparables, car leurs unités diffèrent (kgCO_2 , kgCH_4). L'ÉICV va alors permettre de comparer ces résultats en les regroupant dans des catégories d'impacts qui ont chacune leur propre unité. Afin de pouvoir relier les résultats de l'ICV aux dommages finaux provoqués par les émissions de polluants, différentes étapes doivent être réalisées.

Selon ISO, il existe des étapes obligatoires et facultatives. Le présent projet s'inscrivant dans une des étapes obligatoires, elles vont être détaillées par la suite, tandis que les étapes facultatives ne seront que brièvement abordées.

2.1.2.3.1 Étapes obligatoires

La réalisation d'une ÉICV se compose obligatoirement du choix des catégories d'impact, de la classification et de la caractérisation.

2.1.2.3.1.1 Choix des catégories d'impact, des indicateurs de catégorie et des modèles de caractérisation

Cette étape consiste à choisir les catégories d'impact les plus cohérentes avec les objectifs et le champ de l'étude. Les indicateurs de catégorie, qui sont une représentation quantifiable des catégories d'impact, et les modèles de caractérisation sont alors aussi sélectionnés. Des exemples de catégories d'impact retrouvées en ACV sont : la toxicité humaine, la déplétion de la couche d'ozone, l'acidification aquatique, le réchauffement climatique, ainsi que l'écotoxicité aquatique qui est au cœur du projet de recherche. Un indicateur de catégorie peut se situer à n'importe quel endroit dans la chaîne de cause à effet, entre les résultats d'inventaire et les impacts finaux. Le Tableau 2-1 illustre par un exemple les termes précédemment utilisés.

Tableau 2-1: Illustration de termes utilisés (ISO, 2006b)

Terme	Exemple
Catégorie d'impact	Changement climatique
Résultats de l'inventaire	Quantité d'un gaz à effet de serre par unité fonctionnelle
Modèle de caractérisation	Modèle de base sur 100 ans élaboré par le Groupe d'Experts Environnemental sur l'Évolution du Climat
Indicateur de catégorie	Forçage radiatif infrarouge (W.m ²)
Facteur de caractérisation	Potentiel de réchauffement global (GWP ₁₀₀) pour chaque gaz à effet de serre (kg équivalents CO ₂ /kg gaz)
Résultat d'indicateur de catégorie	kg d'équivalents CO ₂ par unité fonctionnelle
Impacts finaux par catégorie	Récifs coralliens, forêts, récoltes

Chacune des catégories d'impact doit avoir des impacts finaux identifiés, des indicateurs de catégorie définis pour chaque impact final, des résultats de l'ICV affectés aux différentes catégories d'impact selon les indicateurs et un modèle et des facteurs de caractérisation.

2.1.2.3.1.2 Classification

Les différentes émissions et extractions des substances, étudiées lors de l'inventaire, sont affectées aux catégories d'impacts précédemment sélectionnées selon les problèmes environnementaux sur lesquels elles influent. Certaines émissions et extraction peuvent apparaître dans plusieurs catégories.

2.1.2.3.1.3 Caractérisation

Cette étape de l'ÉICV consiste à évaluer la contribution des émissions ou extractions (résultats d'inventaire) à une catégorie d'impact environnemental. Chaque catégorie d'impact possède une unité qui lui est propre. Le modèle de caractérisation précédemment choisi permet de modéliser les différents mécanismes environnementaux de la chaîne de cause à effet, pour chacune des catégories d'impact, à l'aide d'indicateurs de catégorie et de facteurs de caractérisation (FC). L'importance relative de l'impact de chaque émission ou extraction sur les catégories sélectionnées est alors évaluée. Les différentes catégories d'impact utilisées en ÉICV sont illustrées à la Figure 2-3.

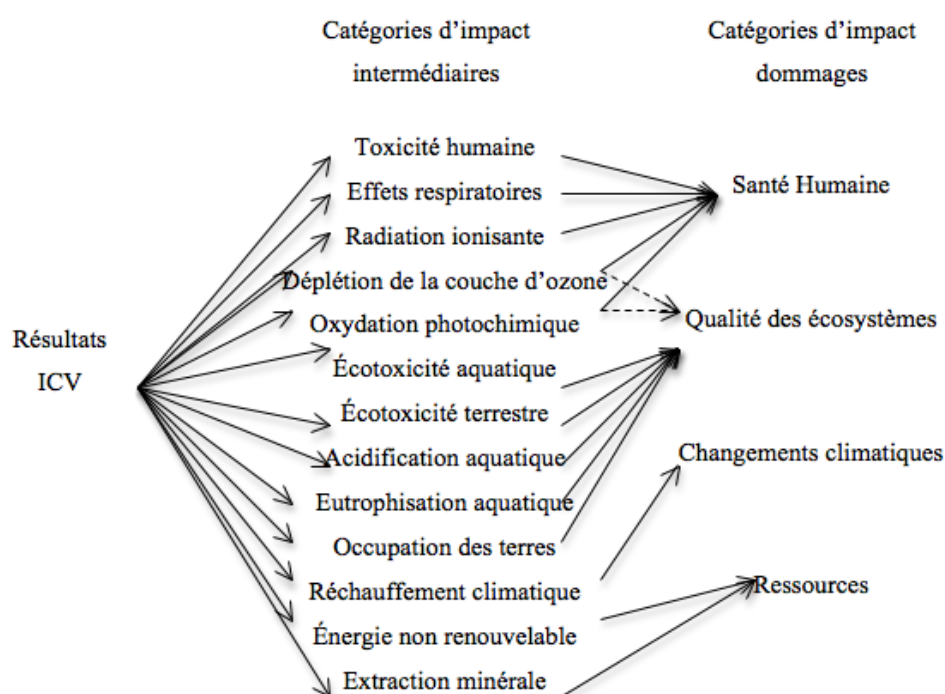


Figure 2-3: Les différentes catégories d'impact: intermédiaires et dommages (Adapté de Jolliet *et al.*, 2003)

Il existe deux types de catégorie d'impact : problèmes (midpoint) et dommages (endpoint). Les catégories midpoint font appel à des FC orientés problèmes et se situent n'importe où sur la chaîne de cause à effet. Les catégories endpoint utilisent des FC orientés dommages et se situent en bout de la voie d'impact. La caractérisation orientée dommages consiste à agréger les résultats orientés problèmes afin d'évaluer leur contribution aux catégories endpoint telles que la santé humaine, la qualité des écosystèmes, les ressources ou encore les changements climatiques.

Les calculs réalisés avec les FC sont détaillés à la section 2.2.

L'approche aboutissant aux catégories d'impact dommages permet une meilleure compréhension des résultats par le grand public. Cependant, l'agrégation de résultats entraîne une perte d'information et des incertitudes plus grandes. L'approche problèmes est plus pertinente d'un point de vue environnemental, car les mécanismes environnementaux sont représentés de manière plus précise. En revanche, l'interprétation est plus complexe et moins accessible au grand public au niveau midpoint.

2.1.2.3.2 *Étapes facultatives*

La normalisation consiste à calculer l'importance relative d'un indicateur de catégorie par rapport à une valeur de référence, qui n'est pas toujours la même selon les études. Cette étape est nécessaire pour réaliser le regroupement (classification des catégories d'impact) et la pondération. Cette dernière étape consiste à utiliser des facteurs de pondération, qui dépendent des valeurs sociales, politiques et éthiques données aux catégories d'impact, afin d'obtenir un score unique (Finnveden, 1997; Finnveden *et al.*, 2002).

2.1.2.3.3 *Limites de l'ÉICV*

L'ÉICV présente plusieurs limites. En effet, elle ne prend en compte que les impacts environnementaux choisis lors des objectifs et du champ de l'étude. De plus, elle ne permet pas toujours de mettre en évidence des différences entre les résultats des catégories d'impact lors de la comparaison de deux produits, procédés ou services. Ce phénomène peut s'expliquer par le fait que les modèles de caractérisation, les analyses d'incertitude et de sensibilité présentent eux aussi des limites. Toutes les décisions prises lors de la définition des frontières du système et les incertitudes des données récoltées peuvent également influencer sur la difficulté de tirer des conclusions.

L'ÉICV prend très rarement en compte certains aspects de l'écotoxicité (Hauschild & Pennington, 2002). Les changements spatiaux et temporels des écosystèmes ne sont pas pris en compte. De plus, les co-dépendances entre espèces d'un écosystème ne sont pas non plus considérées. La bioaccumulation des substances polluantes d'un maillon de la chaîne alimentaire à un autre n'est pas non plus prise en compte. Enfin, en ÉICV les concentrations présentes en bruit de fond sont très peu connues.

Enfin, peu données expérimentales ne sont à ce jour disponibles pour déterminer des indicateurs écotoxicologiques pour des espèces terrestre afin de modéliser l'écotoxicité terrestre (Rosenbaum *et al.*, 2008). Plus d'informations existent pour l'écotoxicité aquatique. Cette catégorie d'impact est modélisée, mais elle présente encore des lacunes, notamment en ce qui concerne les mélanges complexes d'hydrocarbures. En effet, pour une émission de ce type de polluant dans l'eau (fleuve, rivière), l'air ou encore les sols les données, qui permettent de déterminer l'effet et le sort environnemental de ces produits, manquent et par conséquent les facteurs de caractérisation ne sont pas disponibles.

2.1.2.4 Interprétation des résultats

Cette quatrième étape de l'ACV consiste à analyser les résultats obtenus lors des précédentes étapes et d'émettre des conclusions par rapport aux objectifs et au champ de l'étude fixés. Si plusieurs produits ou services sont à l'étude, c'est lors de cette phase qu'une comparaison sera effectuée. Les limites de l'étude réalisée sont aussi mises en évidence. La transparence de l'ACV est alors essentielle. Les points sensibles sont identifiés (Heijungs *et al.*, 1992) et la qualité et la robustesse des résultats sont testées par l'intermédiaire des analyses de sensibilité, les analyses d'incertitude et les contrôles de qualité. La mauvaise caractérisation des impacts sur les écosystèmes aquatiques doit alors être améliorée.

2.1.2.5 Les limites de l'ACV

L'ACV présente plusieurs limites auxquelles il faut faire attention lors de la réalisation de ce type d'étude. Tout d'abord, selon le niveau de détail et la disponibilité des données, la phase d'inventaire peut être très longue. Ensuite, si les règles de réalisation d'une ACV ne sont pas appliquées, les résultats peuvent changer selon les hypothèses posées et la méthode d'ÉICV choisie, ce qui les rend subjectifs. De plus, les résultats d'une ACV présentent pour le moment de fortes incertitudes. Les aspects sociaux et économiques ne sont pas analysés et les dimensions spatio-temporelles ne sont pas différenciées.

2.2 La catégorie d'impact écotoxicité aquatique

La catégorie d'impact *écotoxicité aquatique*, dont il est question dans ce projet, fait partie des catégories d'impact de niveau problèmes et après agrégation se retrouve dans la catégorie

d'impact *qualité des écosystèmes* au niveau dommages. La Figure 2-4 représente la chaîne de cause à effet pour la catégorie d'impact *écotoxicité aquatique*.

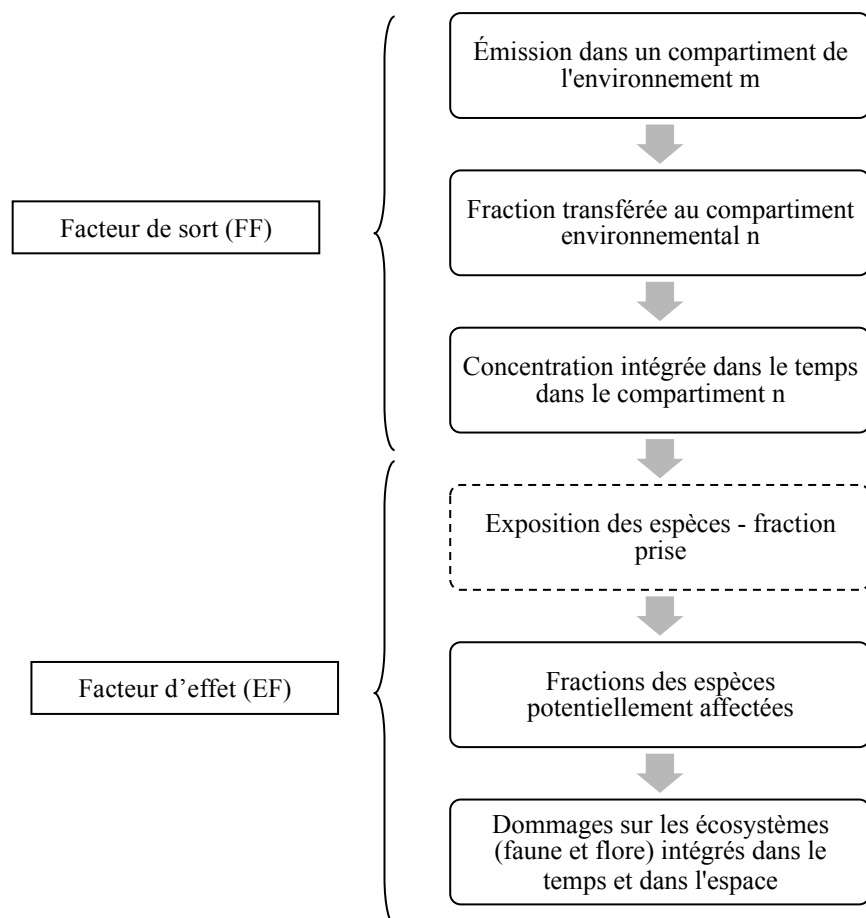


Figure 2-4: Chaîne de cause à effet pour la catégorie écotoxicité (Adapté de Hauschild & Pennington, 2002; Jolliet, *et al.*, 2003)

Le facteur de sort ou de devenir environnemental (FF) (j^1) et le facteur d'effet (EF) ($\text{PAF} \cdot \text{m}^3/\text{kg}$) permettent de calculer le facteur de caractérisation (FC) ($\text{PAF} \cdot \text{m}^3 \cdot \text{j}/\text{kg}$) selon l'équation (2.1).

$$FC_i^{m,n} = EF_i^m * FF_i^{n,m} \quad (2.1)$$

¹ jour

Où n est le compartiment de l'environnement qui reçoit une certaine quantité de polluant émis et m le compartiment d'émission de l'écosystème. Le facteur de sort (FF) représente le devenir dans l'environnement d'un contaminant et le facteur d'effet (EF) les effets négatifs ressentis par les écosystèmes suite à une exposition à une concentration de polluant. Le FC est ensuite utilisé pour déterminer les scores d'impact à partir des résultats de l'ICV (équation 2.2).

$$Score\ d'impact_i^{m,n} = FC_i^{m,n} * M_i^n \quad (2.2)$$

Où i est la substance à l'étude, M la masse de substance dans le compartiment de réception n et m le compartiment d'émission.

Les deux prochaines sous-sections présentent d'abord les différents modèles existants actuellement pour caractériser les impacts sur les écosystèmes aquatiques en ACV. Ensuite, pour le modèle le plus pertinent et choisi pour le projet seront détaillées les méthodes de calcul du sort et de l'effet (2.2.1 et 2.2.2).

2.2.1 Modèles d'Évaluation des Impacts du Cycle de Vie (ÉICV) existants

La modélisation multimédia pour le calcul du FF est reconnue en ÉICV et utilisée par la majorité des modèles. Ensuite, il existe quatre méthodes permettant de déterminer l'EF écotoxicologique. Tout d'abord, la méthode de l'espèce la plus sensible est basée sur des données de PNEC, qui manquent de robustesse et de représentativité des écosystèmes (Hauschild & Pennington, 2002). Ensuite, la méthode de la HC5 utilise des courbes SSD² représentant statistiquement la variation des effets négatifs (toxicité) sur un ensemble d'espèces (Hauschild & Pennington, 2002; Payet, 2005). La mesure de la HC5 se base sur la NOEC³ qui ne repose que sur une seule mesure à un temps donné, ce qui rend la valeur peu fiable. La méthode combi-PAF, elle, s'appuie également sur des courbes SSD mais la disponibilité des données est un de ses gros points faibles (Payet,

² Species Sensitivity Distribution

³ No Observed Effect Concentration

2005). Enfin, la méthode AMI⁴ utilise la $HC50_{EC50}$ (Payet, 2004), qui représente la concentration affectant 50% des espèces au-delà de leur EC_{50} chronique.

À ce jour, il existe plusieurs modèles permettant de déterminer le sort et l'effet des contaminants et par conséquent le calcul des FC. Dans la littérature, une étude récente a été menée sur sept modèles d'ÉICV afin de déterminer quels étaient les modèles les plus pertinents et complets afin de connaître quels éléments clés et caractéristiques avaient le plus d'influence sur les résultats d'un modèle d'ÉICV (Hauschild *et al.*, 2008). Sept modèles ont été utilisés pour cette étude car les experts qui les ont développés ont accepté d'y participer. Le présent projet est focalisé sur l'étude de la catégorie *écotoxicité aquatique*. Seuls trois des sept modèles cités seront alors présentés ici : EDIP, Impact 2002, USES-LCA. En effet, les quatre autres modèles ne prennent pas en compte l'écotoxicité aquatique (Brizio & Genon, 2005; Kuhn *et al.*, 2007; MacLeod *et al.*, 2001; Maddalena *et al.*, 1995; McKone & Hertwich, 2001; McKone & Enoch, 2002; McKone & MacLeod, 2003; Rosenbaum, *et al.*, 2008). Les trois modèles cités (EDIP, Impact 2002, USES-LCA) sont des modèles reconnus en ÉICV. Un autre modèle existant qui permet de déterminer le sort et l'effet dans l'eau douce existe dans la littérature : le modèle TRACI. Cependant, celui-ci utilise la PNEC. Il n'est donc pas considéré pour ce projet.

Le Tableau 2-2 présente les avantages et limites des trois modèles précédemment cités, qui ont été utilisés afin de développer un modèle consensus (détaillé dans la suite de cette partie) pour la caractérisation de l'impact écotoxique.

⁴ Assessment of the Mean Impact

Tableau 2-2: Comparaison des méthodes d'Évaluation des Impacts du Cycle de Vie qui ont servi à développer le modèle consensus USEtox (Adapté de De Koning *et al.*, 2002; Rosenbaum *et al.*; Rosenbaum *et al.*, 2007)

Modèle	Avantages	Inconvénients	Références
EDIP		<ul style="list-style-type: none"> - <u>Calcul du sort</u> : basé uniquement sur les paramètres clés des substances - <u>Calcul du facteur d'effet</u> : basé sur la PNEC⁵, qui manque de robustesse et de représentativité de l'écosystème - Évaluation semi-quantitative - Modèle pour l'Europe 	(Dreyer <i>et al.</i> , 2003; Rosenbaum, <i>et al.</i> , 2008; Wenzel <i>et al.</i> , 1997)
Impact 2002	<ul style="list-style-type: none"> - <u>Calcul du sort</u> : modélisation multimédia - <u>Calcul du facteur d'effet</u> : méthode AMI (détaillée à la section 2.2.2.2) 	<ul style="list-style-type: none"> - Modèle pour l'Europe - Pas de différenciation des types de sols 	(Pennington <i>et al.</i> , 2005; Rosenbaum, <i>et al.</i> , 2008)
USES-LCA	<ul style="list-style-type: none"> - <u>Calcul du sort</u> : modélisation multimédia - <u>Calcul du facteur d'effet</u> : basé sur la HC50 - Facteurs de caractérisation (FC) pour la toxicité humaine 	<ul style="list-style-type: none"> - Pas de différenciation des types de sol - Émissions considérées à l'intérieur de l'Europe de l'Ouest 	(Huijbregts <i>et al.</i> , 2005; Huijbregts <i>et al.</i> , 2000; Rosenbaum, <i>et al.</i> , 2008; van Zelm <i>et al.</i> , 2009)

⁵ Predicted No Effect Concentration

	et l'écotoxicité aquatique - Écotoxicité séparée en 5 catégories d'impact : eau douce, sédiments d'eau douce, milieu aquatique marin, sédiments marins et écotoxicité terrestre		
--	--	--	--

Les modèles cités dans le Tableau 2-2 ont été utilisés afin de développer un modèle « consensus » appelé USEtox (Rosenbaum, *et al.*, 2008) pour la caractérisation des impacts sur les écosystèmes aquatiques. Ce modèle forme la base des recommandations faites par la « UNEP-SETAC Life Cycle Initiative » pour l'obtention de FC (Hauschild *et al.*, 2007; Hauschild, *et al.*, 2008; Rosenbaum, *et al.*, 2008) et regroupe les mécanismes environnementaux des modèles du Tableau 2-2 qui ont le plus d'influence sur l'évaluation des impacts et les harmonise. En effet, ces modèles donnaient des résultats très éloignés les uns des autres (plusieurs ordres de grandeur). Le modèle consensus qu'est USEtox a alors permis d'harmoniser ces résultats et de les rendre plus robustes (Hauschild, *et al.*, 2007; Hauschild, *et al.*, 2008; Rosenbaum, *et al.*, 2008).

Le modèle USEtox utilise un modèle multimédia afin de déterminer le sort d'une substance et utilise la méthode AMI (voir partie 2.2.2.2) pour le calcul du facteur d'effet écotoxique, et non pas la PNEC. USEtox comporte deux échelles spatiales : continentale et globale. Elles comportent chacune un compartiment air rural, eau douce, eau de mer, sol industriel et sol agricole. L'échelle continentale comporte également un compartiment d'air urbain correspondant à une densité de population plus élevée que celle des compartiments continental et global. Cependant, USEtox ne modélise que les impacts dans l'eau douce, ceux dans l'océan sont mal pris en compte. L'écotoxicité terrestre n'est pas non plus modélisée dans USEtox.

Pour la caractérisation de l'impact sur les écosystèmes aquatiques, le facteur de caractérisation calculé par le modèle USEtox est exprimé en unités toxiques comparatives (CTUe) et permet de donner une estimation des fractions d'espèce potentiellement affectées (PAF) intégrées sur le temps et le volume par unité de masse de polluant émis ($PAF \cdot m^3 \cdot j/kg$) (Rosenbaum, *et al.*, 2008).

2.2.2 Calcul des facteurs de sort et d'effet dans USEtox

2.2.2.1 Le facteur de sort (FF)

Dans USEtox, le sort est évalué de manière similaire au modèle Impact 2002, il utilise une modélisation multimédia. Plusieurs compartiments d'émission et de réception sont considérés selon une échelle continentale qui se trouve à l'intérieur d'une échelle globale. Les FC pour la catégorie *écotoxicité aquatique* ne sont donnés que pour l'échelle continentale. Les différents compartiments de l'environnement considérés sont l'air urbain, l'air rural, l'eau douce, l'eau de mer, le sol naturel et le sol agricole (Rosenbaum, *et al.*, 2008). Le facteur de sort (FF) s'exprime en jour (j) et relie la masse se retrouvant dans un compartiment donné de l'environnement (kg) à une émission de polluant dans l'environnement (kg/j). Il prend en compte tous les transferts de contaminants entre les compartiments environnementaux ainsi que leur transformation comme la dégradation par exemple (Hertwich *et al.*, 2002; Rosenbaum, *et al.*, 2008).

2.2.2.2 Le facteur d'effet (EF) écotoxicologique

Le facteur d'effet (EF), pour la catégorie *écotoxicité aquatique* permet d'obtenir une représentation du changement dans la fraction d'espèces Potentiellement Affectées (PAF) suite à un changement dans la concentration en polluant (Huijbregts *et al.*, 2010). Le calcul du EF se fait alors à partir d'une concentration et non pas d'une dose ce qui implique la prise en compte implicite de l'exposition dans le facteur d'effet (PAF.m³/kg) (Jolliet, *et al.*, 2003).

La méthode AMI est celle utilisée dans USEtox pour le facteur d'effet (EF). La HC50_{EC50} est calculée en prenant la moyenne géométrique des EC₅₀ des espèces. L'EF s'exprime alors de la manière suivante (Payet, 2005; Rosenbaum, *et al.*, 2008) :

$$EF = \frac{0,5}{HC50_{EC50}} \quad (2.3)$$

2.3 La problématique des mélanges complexes

L'ACV est donc un outil cherchant à représenter les impacts potentiels d'un produit, service ou procédé de la manière la plus réaliste possible. L'ÉICV est l'étape permettant de quantifier ces impacts potentiels et de les regrouper selon des catégories d'impact (problèmes ou dommages). Cependant, l'ACV et l'ÉICV présentent des limites. Le présent projet vise à combler un manque présent pour la caractérisation de l'impact sur l'écosystème aquatique des mélanges complexes d'hydrocarbures pour lesquels des facteurs de caractérisation n'ont pas été développés par manque de données. Les parties suivantes introduisent et présentent le problème à l'étude.

Les mélanges complexes et toute la difficulté qui est liée à leur étude sont ici définis, puis les problèmes rencontrés en ÉICV pour leur caractérisation sont introduits.

2.3.1 Les mélanges complexes organiques

2.3.1.1 Description d'un mélange complexe

Les composés chimiques sont rarement rejetés ou retrouvés seuls dans l'environnement. Ils sont le plus souvent en présence d'autres substances formant alors des mélanges complexes. L'air, les biphényles polychlorés (BPC), l'essence ou encore les dioxines et furanes sont des exemples de ce type de mélange (Foster *et al.*, 2005; Kinerson, 1987). L'appellation « mélange complexe » est généralement utilisée pour désigner des combinaisons de plus de trois composés et dont la composition est inconnue (Kortenkamp *et al.*, 2009).

Selon les co-contaminants avec lesquels les composés sont en présence, leur évolution dans l'environnement peut changer. Ce phénomène a, par exemple, été mis en évidence pour l'huile de préservation de poteaux de bois au pentachlorophénol (PCP). Le PCP est dissout dans l'huile et contient des traces de dioxines et furannes. L'huile en elle-même est un mélange d'hydrocarbures issu de l'industrie pétrolière (Esso, 2003b). En l'absence d'huile, les dioxines et furannes ont tendance à rester à la surface du sol, alors que présentes dans le mélange, les dioxines et furannes migrent verticalement dans le sol (Bulle, 2008; Bulle *et al.*, 2008).

Les produits pétroliers, étudiés dans ce projet, sont des mélanges complexes composés d'hydrocarbures. Leur composition chimique peut changer au cours du temps et selon leur parcours dans l'environnement (Weisman, 1998), mais aussi en fonction de la source de pétrole

brut et du procédé industriel utilisé pour les obtenir (Foster, *et al.*, 2005; Potter & Simmons, 1998). Les propriétés physico-chimiques des hydrocarbures peuvent varier d'un composé à un autre. De plus, selon le compartiment de l'environnement dans lequel ces substances sont émises elles n'auront pas forcément le même devenir environnemental (MacLeod *et al.*, 2004; van de Meent *et al.*, 2009). En revanche, certains hydrocarbures possèdent un même mode d'action toxique (King *et al.*, 1996; MacLeod, *et al.*, 2004), qui a déjà été attribué aux produits pétroliers et qui peut être recommandé : la narcose (McGrath *et al.*, 2004; McGrath *et al.*, 2005), qui a déjà été utilisé par MacLeod et collaborateurs (2004) dans une étude sur le devenir environnemental d'hydrocarbures pétroliers. Cependant, il est important de noter que certains hydrocarbures comme le benzène et les hydrocarbures aromatiques polycycliques (HAP) peuvent se comporter différemment et possèdent plusieurs effets toxiques. En effet, des effets cancérogènes sont également observés pour ces derniers en plus de la narcose (USEPA, 2008).

2.3.1.2 Sources des mélanges pétroliers

Le pétrole est utilisé depuis plus d'un siècle. Il était au départ utilisé pour l'éclairage avant d'entrer en jeu dans la production énergétique au début du XX^e siècle (Bélorgeot, 2010; Perrodon, 2010). Les produits pétroliers sont également très présents dans le monde industriel. La distillation du pétrole brut conduit à différentes fractions d'hydrocarbures aux plages d'ébullition différentes. Ces fractions ont alors chacune leur usage : gaz de chauffage, solvant industriel, fioul pour véhicules, kérosène pour avion, diesel, lubrifiant, asphalte pour les routes (Bélorgeot, 2010; Masterton & Slowinski, 1977; USEPA, 1999). L'huile issue de l'industrie pétrolière, mélangée au pentachlorophénol (PCP), a par exemple été utilisée pour préserver les poteaux de bois utilisés au Canada et aux États-Unis pour les lignes téléphoniques ou encore électriques (Esso, 2003a; Stinson, 1992).

2.3.2 Analyse des mélanges complexes

L'analyse des mélanges complexes de contaminants organiques permet de connaître leur composition. Cela peut être nécessaire afin de réaliser une caractérisation pertinente et précise de ces mélanges pour la réalisation d'études (Eckert & Vanek, 2005; Foster, *et al.*, 2005). Cependant, la complexité des mélanges d'hydrocarbures rend les analyses chromatographiques⁶

⁶ Analyse sur colonne

traditionnelles insuffisantes : GC (capillary gas chromatography) ou GC-MS (GC couplée à une spectrométrie de masse) (Sutton *et al.*, 2005; Ventura *et al.*, 2008). En effet, des « pics » non résolus appelés en anglais « Unresolved Complex Mixtures » (UCMs) et correspondant à des « substances inconnues » (en réalité une combinaison de constituants du mélange) sont visibles de manière prononcée ou en série sur les chromatogrammes (Gough & Rowland, 1990). La mise en place de colonnes capillaires (GC) ne permettent donc pas de résoudre les UCMs (Ventura, *et al.*, 2008). La chromatographie bidimensionnelle en phase gazeuse (GCxGC) est une méthode en développement et encore peu utilisée permettant de résoudre l'identité de ces composés inconnus dans les analyses chromatographiques (Dallüge *et al.*, 2003; Liu & Phillips, 1991; Ventura, *et al.*, 2008). Cette méthode a déjà bien fonctionné lors de certaines études ayant pour but de séparer et d'identifier des biomarqueurs dans des huiles brutes (Frysiner & Gaines, 2001) ou encore pour identifier des UCMs dans des sédiments contaminés par ce même type d'huile (Frysiner *et al.*, 2003; Reddy *et al.*, 2002). Dans leur étude, Ventura et collaborateurs (2008) ont réussi à identifier des composés dans du goudron alors que la traditionnelle GC-MS avait échoué.

La GCxGC consiste à relier deux colonnes capillaires, ayant des temps stationnaires différents, par un modulateur. Ce modulateur crée des échantillons de substances à analyser lorsque l'effluent sort de la première colonne avant d'entrer dans la deuxième. Ces échantillons sont séparés dans la seconde colonne, permettant ainsi de mettre en évidence des composés qui ne l'aurait pas été dans la première (Ryan & Marriott, 2003; Ventura, *et al.*, 2008). Cette technique peut par exemple s'appliquer pour l'analyse d'échantillons pétrochimiques, de pesticides ou encore pour des hydrocarbures aromatiques polycycliques (HAP) présents dans des sédiments (Dallüge, *et al.*, 2003).

Ce type d'analyse aurait pu s'appliquer dans le cadre de ce projet, mais son utilisation n'est pas encore répandue. De plus, la composition des mélanges pétroliers étant variable d'un échantillon à un autre, une telle analyse n'aurait pas pu faire l'objet d'une généralisation. Pour finir, il ne serait pas réaliste d'effectuer de telles analyses pour chaque étude ACV nécessitant la caractérisation d'un mélange complexe. Il est donc essentiel d'arriver à mettre au point une méthode de caractérisation des mélanges d'hydrocarbures pétroliers qui permette de s'affranchir de ce type d'analyse.

2.3.3 Les mélanges complexes en Évaluation des Impacts du Cycle de Vie (ÉICV)

Les mélanges complexes sont mal caractérisés en ÉICV. En effet, il n'existe aucun FC dans les méthodes ÉICV actuelles. Aucun impact n'est alors considéré pour les mélanges d'hydrocarbures pétroliers lors d'une ACV par manque de FC.

Un autre problème est que, de manière générale, les interactions entre co-contaminants ne sont pas prises en compte. Elles sont négligées pour de faibles doses ou tout simplement ignorées (Hauschild & Pennington, 2002; Huijbregts, *et al.*, 2000; Kinerson, 1987). Jusqu'à présent afin d'évaluer les impacts potentiels associés à des émissions de tels mélanges, différentes méthodes ont été proposées pour palier à cette absence de FC.

Tout d'abord, seuls les facteurs de caractérisation (FC) le plus élevé et le plus faible des constituants du mélange sont considérés (Cadotte, 2005). Dans cette étude, l'étendue entre le plus faible et le plus élevé des FC étaient de huit ordres de grandeur pour la catégorie *écotoxicité aquatique* ($1,6 \cdot 10^{-4}$ et $5,3 \cdot 10^{+4}$ 2,4-Deq/kg_{émis}). Cette approche présente l'avantage d'être mise en œuvre facilement et de fournir une plage de FC. Cependant, elle possède plusieurs inconvénients. D'une part, la composition exacte du mélange doit être connue afin de déterminer quels sont les FC le plus faible et le plus élevé. D'autre part, elle ne fournit pas une distribution de tous les FC des composés constituant le mélange.

Dans une autre approche mentionnée, les impacts des différentes substances du mélange, ayant un même mode d'action, sont additionnés afin d'obtenir l'impact du mélange. Cette hypothèse est celle faite par les toxicologues, et elle n'est pas vraiment applicable à l'ÉICV, où les impacts considérés vont au-delà de la simple étude des organismes (Bare *et al.*, 1999). Cette méthode exige également la connaissance de la composition du mélange, qui est variable et difficile à obtenir.

Enfin, une autre méthode retrouvée dans la littérature est de considérer le mélange comme une ou plusieurs substances supposées être représentatives de celui-ci (Sanscartier, *et al.*, 2010). Par exemple, le CCME (Canadian Council of Ministers of the Environment, 2000) a établi quatre fractions selon le nombre x de carbone C : C₆-C₁₀ (fraction n°1), C_{>10}-C₁₆ (fraction n°2), C_{>16}-C₃₄ (fraction n°3) et C_{>34}-C₅₀ (fraction n°4). Ces fractions sont basées sur le travail du Total Petroleum Hydrocarbon Criteria Working Group (TPHWG) (Gustafson, *et al.*, 1997), dont les

méthodes sont expliquées plus en détail dans la suite de ce chapitre et appliquées dans ce projet. Sanscartier et collaborateurs ont fractionné un mélange d'hydrocarbures selon les fractions du CCME. Dans cette étude, une seule fraction a été retenue (fraction n°2), car c'était la seule susceptible de se volatiliser et de migrer hors du site contaminé au diesel. Le mélange a donc été caractérisé en ne considérant qu'une partie des composés.

Enfin, les méthodes de Cadotte (Cadotte, *et al.*, 2007), Bare et collaborateurs (1999) et Sanscartier et collaborateurs (2010) ne prennent pas en compte les interactions pouvant exister entre les constituants du mélange. Pourtant, tel que discuté précédemment (paragraphe 2.3.1.1), en la présence de co-contaminants certaines substances peuvent voir leur devenir environnemental et leur effet modifiés.

Un manque se fait donc actuellement ressentir quant à la caractérisation des impacts liés aux mélanges complexes de contaminants organiques en ÉICV. Les interactions potentielles entre polluants ne sont pas considérées dans les études réalisées. Les facteurs utilisés ne peuvent alors pas être représentatifs de la réalité.

2.4 Considération des mélanges complexes d'hydrocarbures hors du contexte de l'ACV

Hors du contexte de l'ACV, des méthodes ont été développées afin de mieux évaluer le sort et l'effet des mélanges dont les constituants ont des modes d'action similaires dans l'environnement (Gustafson, *et al.*, 1997; King, *et al.*, 1996; MacLeod, *et al.*, 2004; van de Meent, *et al.*, 2009). Une approche proposée par Foster et collaborateurs (2005) indique les étapes permettant de déterminer le sort de mélanges complexes. Leur stratégie s'appuie sur l'exemple de l'essence. Ils suggèrent de procéder selon différentes étapes : 1) détermination de la composition du mélange à l'étude ainsi que sa variabilité; 2) regroupement des constituants du mélange selon un choix de critères justifié; 3) collecte ou calcul des propriétés et données pertinentes de chacun des groupes et 4) évaluation du devenir environnemental de chacun des groupes. Les prochaines sous-sections discutent des étapes de l'approche proposée par Foster et collaborateurs.

2.4.1 Détermination de la composition du mélange

Tel que vu précédemment la première étape n'est pas forcément réalisable c'est pourquoi cette dernière ne sera pas détaillée plus qu'elle ne l'a été à la sous-section 2.3.2.

2.4.2 Groupement des constituants d'un mélange

Pour la réalisation de cette étape, les composés présentant des similarités peuvent alors être regroupés entre eux lorsqu'ils possèdent un mode d'action toxique commun afin de simplifier les calculs de sort ou d'effet. Cet aspect est bien illustré dans l'étude de cas faite par Macleod et collaborateurs (2004) mentionnée plus haut. Deux méthodes de groupement d'hydrocarbures ont été retenues dans la littérature pour le présent projet : la Hydrocarbon Block Method (HBM) et la méthode du Total Petroleum Hydrocarbon Criteria Working Group (TPHWG). Ce sont les seules méthodes de fractionnement trouvées à l'exception des fractions du CCME, qui sont elles-mêmes tirées des travaux du TPHWG.

2.4.2.1 La Hydrocarbon Block Method (HBM)

Une méthode de groupement a été développée par le groupe CONCAWE (CONservation of Clean Air and Water in Europe) : la Hydrocarbon Block Method (HBM) (King, *et al.*, 1996). La HBM a été mise en place afin de déterminer la toxicité des mélanges d'hydrocarbures. Elle consiste, lorsque la composition du mélange est connue, à regrouper les composés ayant des propriétés physico-chimiques et écotoxicologiques proches. Les données de toxicité sont calculées pour chacun des groupes puis additionnées proportionnellement pour obtenir celle du mélange (King, *et al.*, 1996). Cette méthode de fractionnement a été utilisée et adaptée par la suite pour le développement de facteurs de sort dans l'environnement et de fractions prises pour des mélanges d'hydrocarbures (van de Meent, 2008; van de Meent, *et al.*, 2009). Dans leurs travaux, van de Meent et collaborateurs utilisent une base de données contenant environ 1500 hydrocarbures et leurs propriétés physico-chimiques : la CONCAWE Library (Howard *et al.*, 2006). Des groupements selon la classe chimique des composés et leur température d'ébullition ont ensuite été faits de sept manières différentes. Le Tableau 2-3 présente les différents types de fractions mis en place par van de Meent et collaborateurs. Deux (aliphatiques et aromatiques) ou douze (paraffines normales, iso-paraffines, n-cyclopentanes, n-cyclohexanes, mononaphténiques, dinaphténiques, polynaphténiques, monoaromatiques, naphténiques monoaromatiques,

diaromatiques, naphténiques diaromatiques et polyaromatiques) classes chimiques et trois à 31 plages d'ébullition peuvent être considérées.

Tableau 2-3: Types de groupement établis par van de Meent *et al* (Adapté de van de Meent, *et al.*, 2009)

Numéro du type de fractionnement	Nombre de classes chimiques	Nombre de plage d'ébullition
1	2	3
2	2	7
3	2	13
4	2	31
5	12	3
6	12	7
7	12	13

Des calculs d'incertitude, par rapport au fait que les proportions massiques de chacune des fractions au sein du mélange sont inconnues, ont mis en évidence que chacun des types de groupements sont satisfaisants (van de Meent, *et al.*, 2009). À titre d'exemple, le Tableau 2-4 illustre le type de fractionnement numéro 2 du Tableau 2-3.

Tableau 2-4: Groupement selon 7 plages de température d'ébullition et 2 classes chimiques (Adapté de van de Meent, *et al.*, 2009)

Plages d'ébullition	Classes chimiques	
	Aliphatiques (nombre de composés)	Aromatiques (nombre de composés)
< 69	1	1
69 – 126	18	1
126 – 174	58	13
174 – 216	63	20
216 – 287	178	96
287 – 357	107	223
> 357	79	458

La HBM fournit donc une manière de fractionner les mélanges d'hydrocarbures selon une de leur propriété.

La sous-section suivante (2.4.2.2) présente une autre façon de procéder.

2.4.2.2 La méthode du Total Petroleum Hydrocarbon Criteria Working Group (TPHWG)

Les composés d'un mélange complexe peuvent être regroupés selon la méthode développée par le Total Petroleum Hydrocarbon Criteria Working Group (TPHWG) (Gustafson, *et al.*, 1997). Cette technique consiste à regrouper des hydrocarbures selon leur comportement (sort) dans l'environnement. En effet, ils proposent de déterminer des facteurs de lixiviation et de volatilisation (LF et VF respectivement), dépendamment des caractéristiques du sol contaminé. Le LF illustre la tendance d'un polluant à migrer d'un sol contaminé vers les eaux souterraines alors que le VF représente la capacité d'un contaminant à migrer du sol vers l'air. Les composés ayant des facteurs VF et LF proches sont alors rassemblés selon leur nombre de carbone équivalent (ECN) et leur classe chimique. Un exemple est donné par la Figure 2-5.

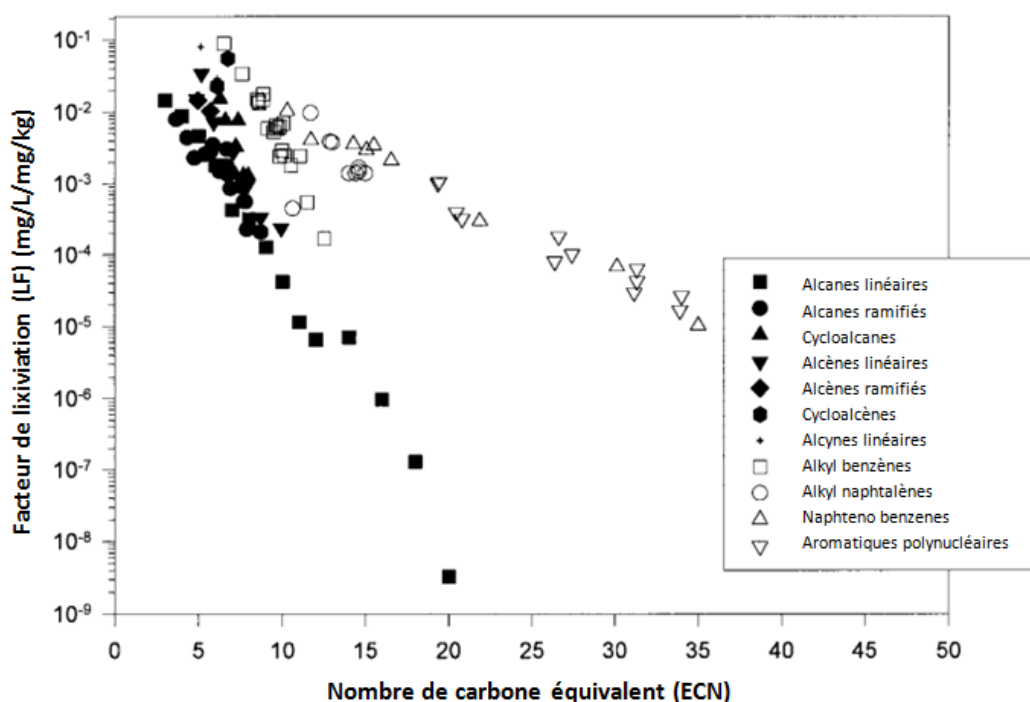


Figure 2-5: Exemple de la définition de groupements à partir du facteur de lixiviation (LF) (Adapté de Gustafson *et al.*, 1997).

Un graphique équivalent pour le VF a également été tracé par le TPHWG. À partir de ces deux graphiques, des fractions ont pu être établies. Chacun des graphiques (LF et VF) donnait les mêmes groupements. Un seul des deux facteurs peut alors être utilisé pour la définition de fractions. Les types de groupement obtenus par le TPHWG sont présentés au Tableau 2-5.

Tableau 2-5: Groupement de composés selon le nombre de carbone équivalent et la classe chimique (Adapté de Gustafson, *et al.*, 1997)

Classification	Aliphatiques					
Plage de nombre de carbone équivalent (ECN)	5-6	>6-8	>8-10	>10-12	>12-16	>16-35
Classification	Aromatiques					
Plage de nombre de carbone équivalent (ECN)	Benzène (6,5)	Toluène (7,6)	>8-10	>10-12	>12-16	>16-21 >21-35

Ces résultats ne sont valables que pour le sol sélectionné par Gustafson et collaborateurs pour leur étude. Les calculs du LF et VF dépendent de ces données de sol (équation (2.4)).

$$LF = \frac{\rho_s}{(\theta_{ws} + k_s * \rho_s + H * \theta_{as}) * (1 + \frac{U_{gw} * \delta_{gw}}{I * W})} \quad (2.4)$$

Les différentes variables sont :

- U_{gw} : vitesse d'écoulement de Darcy des eaux souterraines (cm/année)
- δ_{gw} : épaisseur de la zone de mélange des eaux souterraines (cm)
- I : taux d'infiltration de l'eau à travers le sol (cm/année)
- W : profondeur de la zone source parallèle à la direction d'écoulement de l'eau souterraine (cm)
- ρ_s : masse volumique du sol (g/cm^3)
- θ_{ws} : contenu en eau de la zone vadose du sol (cm^3/cm^3)
- k_s : coefficient de partition sol-eau (cm^3/g)
- H : constante de Henry (cm^3/cm^3)
- θ_{as} : contenu en air de la zone vadose du sol (cm^3/cm^3)

Le LF prend donc en compte la partition d'un composé entre le sol et l'eau en considérant toute la composition du sol.

Il est à noter que ces méthodes sont utilisées pour les analyses de risque, telle que celle du TPHWG, ou bien pour calculer des facteurs de sort et fractions prises dans le cas de la HBM, dans un contexte d'analyse de risque. Elles n'ont pas encore été appliquées pour le calcul de facteurs de caractérisation (FC) dans le cas d'une ACV. En revanche, elles fournissent un moyen de réaliser des fractions afin de faciliter le calcul de sort pour des mélanges complexes aux composés ayant des modes d'action similaires.

2.4.3 Détermination des propriétés physico-chimiques

Les différents groupements une fois établis, leurs propriétés physico-chimiques doivent être déterminées. Cette étape est essentielle au calcul du sort et de l'effet et par conséquent du facteur de caractérisation du mélange complexe. La méthode de la HBM ne nécessite pas de calcul de propriété pour ses fractions car l'agrégation en fraction se fait au niveau des facteurs (voir partie 2.5).

2.4.3.1 La banque de données CONCAWE

Tel que dit précédemment (paragraphe 2.4.2.1), van de Meent et collaborateurs utilisent la banque de données CONCAWE pour leurs travaux (van de Meent, *et al.*, 2009). Cette base de données regroupe les informations suivantes pour environ 1500 hydrocarbures :

- Point de fusion (°C)
- Point d'ébullition (°C)
- Coefficient de partition octanol-eau (K_{ow}) (adimensionnel)
- Constante de Henry ($\text{atm.m}^3/\text{mol}$)
- Pression de vapeur (mmHg)
- Temps de demi-vie dans l'air (h)
- Temps de demi-vie dans l'eau (j)
- Temps de demi-vie dans les sédiments (j)
- Temps de demi-vie dans le sol (j)

Les propriétés de la banque de données CONCAWE proviennent du calculateur SPARC (CONCAWE, 2007) (paragraphe 2.4.3.1.2). Van de Meent et collaborateurs (2009) utilisent directement les propriétés de chacun des composés pour leur calcul. En effet, la fraction prise d'un groupement est obtenue en prenant la moyenne arithmétique de la fraction prise de chacun des constituants de celui-ci (van de Meent, 2010; van de Meent, *et al.*, 2009).

Il est à noter que toutes les données nécessaires au calcul des FC à l'aide de l'outil USEtox ne se trouvent pas dans la banque de données CONCAWE. Ces données manquantes concernent les données de toxicité (EC_{50}). Les coefficients de partition octanol-eau (K_{ow}) de la base de données

CONCAWE possèdent des valeurs incohérentes (voir partie 2.4.3.1.2). Il faut donc connaître les méthodes qui permettent de déterminer les valeurs de ces propriétés selon d'autres algorithmes. Les prochains paragraphes discutent de méthodes de la littérature ayant pour but le calcul de ces propriétés manquantes.

2.4.3.1.1 Calcul de EC_{50}

Les hydrocarbures agissent selon un même mode d'action toxique qui est la narcose (King, *et al.*, 1996). La base de données CONCAWE ne fournit pas les données de toxicité (EC_{50}) requises par USEtox pour le calcul du facteur de caractérisation (FC). Les travaux publiés par Veith et collaborateurs (1990) sur la narcose permettent de déterminer des EC_{50} pour des hydrocarbures à partir du coefficient de partition octanol/eau (K_{ow}) des composés pour trois espèces : Fathead minnow (*Pimephales promelas*), Guppy (*Poecilia reticulata*) et *Daphnia magna*. Une autre méthode a été développée pour déterminer des données de EC_{50} à partir du K_{ow} (Di Toro *et al.*, 2000; McGrath, *et al.*, 2005). Les corrélations de ces publications permettent alors d'obtenir des données d'écotoxicité supplémentaires pour la narcose. Il est ensuite possible de calculer la donnée d'entrée de USEtox (moyenne du logarithme des EC_{50}) (Huijbregts, *et al.*, 2010).

Ce sont les seuls travaux qui ont été trouvés afin de développer des données d'écotoxicité pour la narcose.

2.4.3.1.2 Coefficient de partition octanol-eau (K_{ow})

Il existe différentes méthodes afin de déterminer le coefficient de partition octanol-eau (K_{ow}) d'une substance.

Tout d'abord, un moyen de calculer le K_{ow} est d'utiliser le volume de van der Waals de la substance dissoute et N, un nombre entier représentant les différents groupes polaires présents au sein de la molécule (Edward, 1998). Cette méthode ne fonctionne pas toujours bien, dû au fait que l'entier N peut ne pas être représentatif lorsque des groupes polaires sont trop proches les uns des autres dans le composé.

Ensuite, des corrélations relient le facteur de biotransfert (BTF) d'un polluant à son K_{ow} . Une relation différente existe selon si le BTF est celui du bœuf, du lait ou de la végétation (Travis & Arms, 1988). Ces corrélations développées dans les années 80 ont été améliorées afin de procurer des résultats plus réalistes dans la modélisation multimédia (Rosenbaum *et al.*, 2009). Ces

nouvelles relations font appel à plusieurs données telles que le taux de digestion métabolique dans l'intestin. Ces informations ne sont pas forcément accessibles pour tous les composés d'intérêt.

Il existe également plusieurs calculateurs permettant de déterminer le K_{ow} d'une substance. Les deux les plus utilisés et accessibles gratuitement sont ceux de l'USEPA (United States Environmental Protection Agency) (Arp *et al.*, 2010) : EPI Suite et SPARC.

EPI Suite contient plusieurs programmes permettant de déterminer les propriétés physico-chimiques d'une substance (USEPA). L'un d'entre eux, KOWWIN, permet d'estimer le $\log K_{ow}$ d'un composé par une méthode de contribution de fragments d'atomes d'une molécule. Cette démarche consiste à additionner les coefficients de contribution de tous les fragments d'atomes de la structure moléculaire étudiée. Un facteur de correction peut être utilisé pour des structures complexes telles que les cycles présents dans les composés aromatiques (Meylan & Howard, 1995).

SPARC est un calculateur plus récent et beaucoup utilisé par les agences de modélisation ayant besoin des propriétés physico-chimiques de différents composés (Hilal *et al.*, 2007). À la différence d'EPIWIN, SPARC permet de déterminer les données nécessaires au calcul de partition dans des phases organiques biologiques, industrielles ou encore environnementales. De plus, les propriétés accessibles dans SPARC sont beaucoup plus nombreuses que celles d'EPIWIN (Arp, *et al.*, 2010). Ce calculateur se base strictement sur la structure moléculaire afin de déterminer les propriétés physico-chimiques d'une substance. Ses calculs se font à partir de l'activité pour une dilution infinie (extrapolation permettant de réduire la concentration d'un soluté à zéro (Dohrman)) de la molécule d'intérêt dans différentes phases liquides (Hilal *et al.*, 2003). Les calculs du K_{ow} se font selon l'équation (2.5):

$$\log K_{ow} = \log \gamma_w^\infty - \log \gamma_o^\infty + \log R_m \quad (2.5)$$

Où γ_w représente l'activité à une dilution infinie dans l'eau, γ_o l'activité à une dilution infinie dans l'octanol (adimensionnelles) et R_m le rapport des molarités des phases eau et octanol (adimensionnel).

Certains résultats de $\log K_{ow}$ obtenus par les calculateurs EPI Suite et SPARC ont des valeurs étonnamment élevées (jusqu'à $\log K_{ow}=14,42$ pour le 2,4,6,10,14-pentaméthyl-2-decalin)

comparées au critère pour les substances toxiques et persistantes ($\log K_{ow} > 5$) (Barra, 2007) et aux K_{ow} des dioxines et furanes qui sont connus pour leurs valeurs extrêmes ($\log K_{ow}$ de 6,10 à 8,78) (Gouvernement du Canada, 1990). Les valeurs de K_{ow} trouvées par SPARC ne paraissent alors pas réalistes. De plus, le détail des calculs appliqués par SPARC publié par Hilal et collaborateurs (2004) semble présenter des erreurs (annexe de la publication). Les mêmes résultats n'ont pas pu être retrouvés pour le $\log K_{ow}$ donné en exemple dans leur annexe.

Une dernière méthode afin de calculer le $\log K_{ow}$ d'une substance est d'utiliser les équations suivantes :

$$\log K_{oc} = \log K_{ow} - 0,21 \quad (2.6)$$

Où K_{oc} est le coefficient de partition du carbone organique du sol (adimensionnel) et K_{ow} le coefficient de partition entre l'octanol et l'eau (adimensionnel).

$$\log K_{oc} = -0,62 * \log S_w (mg/L) + 3,95 \quad (2.7)$$

Où S_w correspond à la solubilité aqueuse. L'équation (2.6) a été développée par Karickhoff et collaborateurs pour des composés hydrophobes (Karickhoff *et al.*, 1979) et l'équation (2.7) par Hassett et Banwart pour des substances organiques (Hassett & Banwart, 1989).

Une autre corrélation entre le K_{oc} et le K_{ow} a été mise en place par Karickhoff (Karickhoff, 1981), dont les résultats ne diffèrent pas significativement de l'équation (2.6). Karickhoff et collaborateurs ont également développé une relation liant S_w et le K_{oc} pour les composés hydrophobes (Karickhoff, *et al.*, 1979), dont les résultats obtenus sont identiques à ceux obtenus par l'équation (2.7).

D'après les différents avantages et inconvénients discutés dans cette sous-section, le calcul du K_{ow} et du K_{oc} selon les équations (2.6) et (2.7) semble le plus approprié. En effet, la méthode qui prend en compte le volume de van der Waals présente des dysfonctionnements et celle qui repose sur les BTF fait face à un manque de données. De plus, les calculateurs présentés fournissent des résultats irréalistes.

2.4.3.2 Les fractions selon la méthode du TPHWG

Tout d'abord, une application directe des fractions originelles du TPHWG utilise uniquement les propriétés développées dans leurs travaux pour un certain nombre d'hydrocarbures (Gustafson, *et al.*, 1997). Ensuite, une application plus détaillée de leur méthode implique le développement de corrélations.

Le TPHWG calcule ces propriétés pour chacune des fractions à l'aide du nombre de carbone équivalent (ECN) (Gustafson, *et al.*, 1997). En effet, des corrélations sont déterminées pour les différentes propriétés recherchées (solubilité aqueuse, température d'ébullition, pression de vapeur, constante de Henry, coefficient de partition K_{oc}). Chacune des propriétés donne lieu à un graphique représentant la propriété d'intérêt en fonction du nombre de carbone équivalent. La Figure 2-6 illustre l'exemple de la solubilité aqueuse :

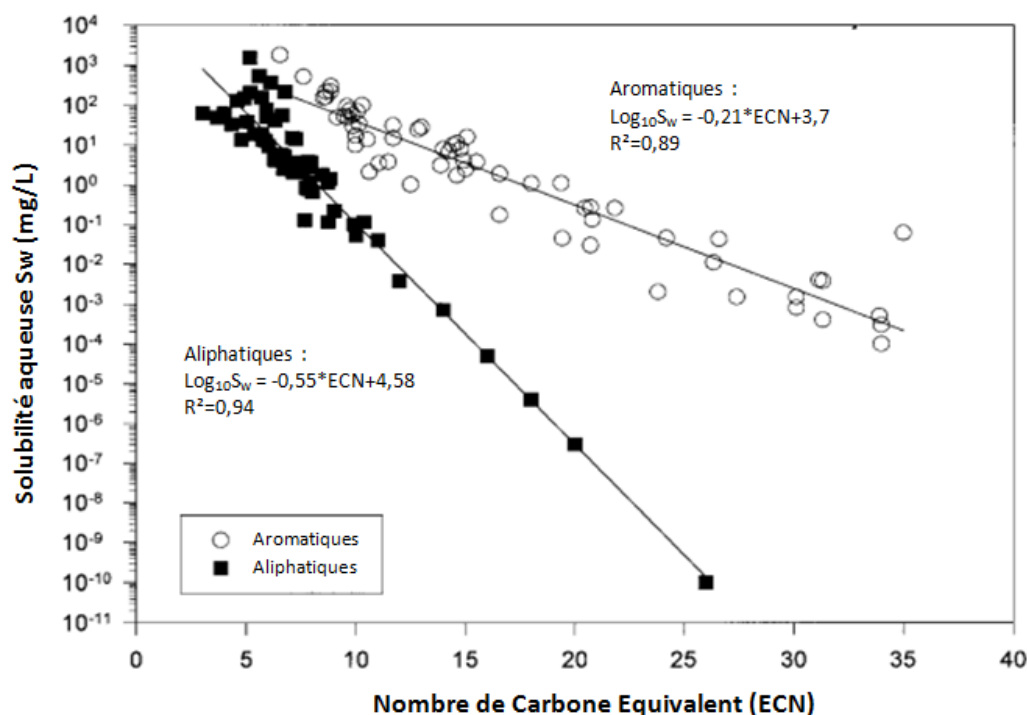


Figure 2-6: : Exemple du développement de corrélation pour déterminer les propriétés des groupements (Adapté de Gustafson, *et al.*, 1997)

Des corrélations peuvent alors être définies pour chaque classe chimique afin de calculer les propriétés de chaque fraction constituée. Dans l'étude du TPHWG, la solubilité aqueuse peut par exemple être déterminée pour les aromatiques par la relation suivante : $\log_{10} S_w = -0,21 \cdot \text{ECN} + 3,7$. Le calcul de la propriété d'intérêt est ensuite effectué en prenant l'ECN moyen de la fraction. Le même raisonnement est appliqué pour toutes les propriétés qu'il est nécessaire de déterminer. Cette approche est privilégiée par le TPHWG car si la définition des fractions change il ne sera pas nécessaire de recalculer ou de refaire la moyenne des propriétés pour tous les composés de chaque groupe.

Enfin, l'application de la HBM requiert seulement les propriétés de chacun des composés du mélange. En effet, le calcul du sort se fait directement à partir du sort des constituants à l'intérieur de chaque fraction, en prenant leur moyenne arithmétique.

2.5 Calcul du sort environnemental pour les fractions établies selon la HBM

Van de Meent et collaborateurs (2009) ont mis en place une méthode de calcul du facteurs de devenir environnemental pour les fractions établies en suivant la HBM. Le facteur de devenir environnemental d'une fraction est calculé en prenant la moyenne arithmétique des facteurs de chacun des constituants de la fraction.

$$Facteur\ devenir\ environnemental_i = \frac{1}{n} \sum_j Facteur\ devenir\ environnemental_j \quad (1.8)$$

Où n représente le nombre de composés j dans la fraction i.

2.6 Conclusion de la revue de littérature

L'ACV est un bon outil afin d'évaluer les impacts potentiels liés à l'émission de contaminants. Cependant, la catégorie d'impact *écotoxicité aquatique* présente un gros manque quant à la modélisation des impacts pour des mélanges d'hydrocarbures, comme par exemple pour un déversement de produits pétroliers dans un fleuve. Ce type de polluant est pourtant très présent au

sein de l'activité industrielle de notre société. Les dommages sur les écosystèmes aquatiques sont toutefois mal considérés.

Afin d'améliorer la robustesse et la représentativité des études ACV il est alors important de mieux prendre en compte les mélanges complexes d'hydrocarbures. Les approches actuellement appliquées en ACV afin de remédier aux manques de FC pour des mélanges pétroliers ne prennent pas en compte les différentes interactions entre co-contaminants et nécessitent la connaissance de la composition précise du mélange à l'étude. Il est alors intéressant de confronter les méthodes théoriques actuelles (constituants séparément, minimum et maximum des composés du mélange, fractionnement du mélange) à des facteurs issus de mesures expérimentales afin de combler les lacunes présentes en ÉICV. Une telle comparaison permet alors de mettre en perspective des facteurs tenant compte des interactions et d'autres ne les considérant pas afin de déterminer la pertinence des approches théoriques existantes. Les deux méthodes de fractionnement ressortant de cette revue de littérature sont la HBM et la méthode du TPHWG, qui ont été développées en-dehors du contexte de l'ACV.

L'outil USEtox apparaît comme le modèle le plus pertinent à ce jour afin de calculer les FC, et par conséquent les FF et EF, car c'est un modèle consensus et utilise le modèle le plus pertinent pour le calcul du EF.

Le chapitre suivant présente alors la problématique du présent projet, les hypothèses posées et les objectifs réalisés afin de répondre au problème posé.

CHAPITRE 3 MÉTHODOLOGIE

Ce chapitre présente la méthodologie mise en place pour répondre aux objectifs de ce projet. Il est important de préciser que ce travail est réalisé en prenant le cas de l'huile de traitement de poteau (CAS 68921-07-3), qui est un mélange complexe d'hydrocarbures issu des procédés de distillation de l'industrie pétrolière (Esso, 2003b). La justification d'un tel choix et les détails de la partie 3.1 sont précisés dans la partie « Material and Methods » du Chapitre 4 de ce mémoire. Ce chapitre présente donc comment des facteurs de caractérisation (FC) pour des mélanges organiques complexes d'hydrocarbures pétroliers ont été développés pour la catégorie *écotoxicité aquatique*.

3.1 Développement méthodologique pour le calcul de facteurs de caractérisation pour l'écotoxicité aquatique pour des mélanges d'hydrocarbures

Cette partie décrit les différentes étapes nécessaires pour l'obtention des FC pour l'écotoxicité aquatique pour des mélanges d'hydrocarbures. La méthode utilisée pour la détermination de la composition potentielle de l'huile de traitement des poteaux en bois est d'abord expliquée. Ensuite, la définition de fractions de composés et des propriétés nécessaires au calcul de l'impact est détaillée. Enfin, les méthodes de calcul et de comparaison des FF, facteurs d'effet (EF) et FC ainsi que les étapes effectuées pour la réalisation des analyses de sensibilité sont présentées.

3.1.1 Détermination des constituants potentiels de l'huile de traitement des poteaux

La composition réelle de l'huile de traitement des poteaux est inconnue. Le but étant de développer une méthodologie applicable à l'ACV, une analyse précise du mélange à l'étude ne serait pas réaliste, car sa composition est très variable d'un échantillon à un autre (cf Chapitre 2). La composition précise de l'huile n'a donc pas été déterminée expérimentalement par des analyses mais a été estimée à partir de la littérature en utilisant la base de données 'CONCAWE'. Tous les hydrocarbures de cette base de données qui ont une température d'ébullition comprise

dans la plage d'ébullition de l'huile de traitement (199°C à 350°C, (Esso, 2003b)) sont supposés être potentiellement présents dans le mélange.

3.1.2 Définition de fractions

Les constituants potentiels de l'huile ont ensuite été regroupés en différentes fractions selon les méthodes HBM et du TPHWG.

Selon la méthode HBM et en se basant sur les travaux de van de Meent et collaborateurs, dix-huit groupes de composés ont été définis selon quatre classes chimiques (aliphatiques, aromatiques, composés soufrés, oléfines) et cinq plages d'ébullition (van de Meent, *et al.*, 2009). Quatre classes chimiques ont été sélectionnées, car la base de données CONCAWE sépare les hydrocarbures selon ces classes. Il a donc été décidé de les conserver pour l'étude.

La méthode du TPHWG regroupe les composés possédant des LF proches (Gustafson, *et al.*, 1997). Les fractions originelles du TPHWG, qui sont définies dans leur rapport, ont été utilisées telles quelles puis adaptés au mélange à l'étude dans le présent projet. Un LF a alors été calculé pour chacun des composés potentiels de l'huile de traitement, dans le cadre du projet de recherche. Les facteurs obtenus ont ensuite été tracés en fonction de leur ECN (Figure 3-1).

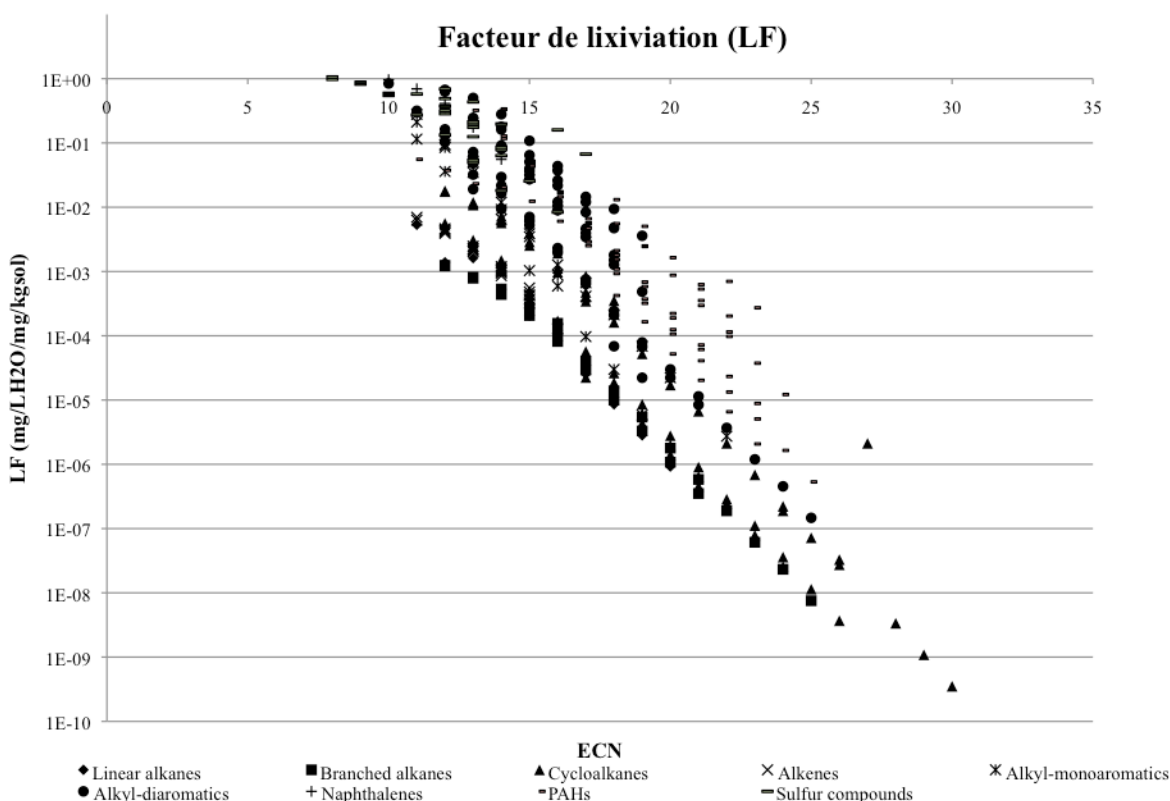


Figure 3-1: Représentation du LF en fonction des ECN pour tous les constituants potentiels de l'huile de traitement

En observant les nuages de points, il est choisi de regrouper tous les composés qui ont des LF proches compris entre deux ordres de grandeur (10^{+2}). Pour l'huile étudiée, dix-huit fractions ont finalement été définies selon quatre classes chimiques et huit plages d'ECN.

3.1.3 Détermination des propriétés nécessaires au calcul de l'impact

Une fois les composés potentiels et les fractions définies, leurs propriétés physico-chimiques, qui sont nécessaires aux calculs des FC, EF et FF, ainsi que celles de l'huile de traitement ont du être déterminées.

3.1.3.1 Propriétés physico-chimiques requises pour le calcul des FC

Les FC pour la catégorie écotoxicité aquatique sont calculés avec la version 1.01 du modèle USEtox (Rosenbaum, *et al.*, 2008). Toutes les entrées nécessaires pour ces calculs sont précisées dans la section « Material and methods » du Chapitre 4.

3.1.3.2 Propriétés des constituants potentiels de l'huile de traitement

Les propriétés de chaque constituant potentiel du mélange à l'étude ont directement été prises dans la base de données CONCAWE, sauf les coefficients de partition octanol-eau (K_{ow}) et les données de toxicité (EC_{50}). Les propriétés de certains composés ont ensuite pu être comparées aux valeurs fournies par le TPHWG dans leur rapport (Gustafson, *et al.*, 1997). Les K_{ow} ont été recalculés selon les équations (4.1) et (4.2) du Chapitre 2. Tel que discuté dans la revue de littérature, les travaux de Veith et Broderius (1990) ont été utilisés pour déterminer les EC_{50} . Ces travaux ont permis de développer des corrélations en supposant, comme effet commun à tous les hydrocarbures, la narcose (Tableau 3-1).

Tableau 3-1: Corrélations pour la détermination des données de toxicité: EC_{50} (Veith & Broderius, 1990)

Fathead minnow (<i>Pimephales promelas</i>)	$\log EC_{50} = -0,0047 * (\log K_{ow})^4 + 0,0127 * (\log K_{ow})^3 + 0,503 * (\log K_{ow})^2 - 3,8447 * \log K_{ow} + 2,9845$
Guppy (<i>Poecilia reticulata</i>)	$\log EC_{50} = -0,86 * \log K_{ow} - 1,11$
<i>Daphnia magna</i>	$\log EC_{50} = -0,91 * \log K_{ow} - 1,26$

EC_{50} (concentration pour laquelle 50% de la population d'espèce est affectée) représente la donnée de toxicité en mmol/L et K_{ow} le coefficient de partition octanol-eau qui est adimensionnel.

Les relations permettant d'obtenir la EC_{50} à partir du K_{ow} de Di Toro et collaborateurs (2000) et McGrath et collaborateurs (2005) ont également été utilisées (équation (3.1)).

$$\log EC_{50} = -0,945 * \log(K_{ow}) + \Delta c_1 + \log(C_L^*) \quad (3.1)$$

Δc_1 (adimensionnel) représente un facteur de correction selon la classe chimique et C_L^* (mmol/kg_{octanol}) « species-specific critical target lipid body burdens ». Les composés aliphatiques et aromatiques ont un facteur de correction de 0 et les Hydrocarbures Aromatiques Polycyclique (HAP) de -0,263. Le C_L^* dépend de l'espèce : 61,7 mmol/kg pour *Oncorhynchus mykiss*, 111 mmol/kg pour *Daphnia magna* et 46,8 mmol/kg pour *Selenastrum capricornutum* (McGrath, *et al.*, 2005).

3.1.3.3 Propriétés des fractions des méthodes HBM et du TPHWG

Selon la méthode HBM, les propriétés physico-chimiques des constituants potentiels de l'huile de traitement sont utilisées directement pour les calculs, étant donné que l'agrégation pour les fractions se fait une fois les facteurs déterminés (Table 4-2) (van de Meent, *et al.*, 2009). Les propriétés des fractions originelles du TPHWG ont été directement prises dans leur rapport (Gustafson, *et al.*, 1997) afin d'effectuer les calculs. En revanche, les propriétés des différents groupements adaptés de la méthode du TPHWG doivent être déterminées afin de pouvoir calculer les FF, EF et FC. Des corrélations reliant la propriété recherchée à l'ECN ont alors été développées pour chaque classe chimique utilisée (aliphatique, aromatique, composé soufré et oléfine) (Gustafson, *et al.*, 1997). Tous les graphiques correspondants sont présentés à l'annexe 1 de ce mémoire. Afin d'effectuer le calcul de chacune des propriétés de chaque fraction, la valeur moyenne des ECN des substances composant les groupements est déterminée et remplacée dans les corrélations.

3.1.3.4 Données expérimentales de l'huile de traitement

Les propriétés de l'huile de traitement de poteaux proviennent de mesures expérimentales en laboratoire. Les protocoles de mesure du coefficient de partition sol-eau (K_{sw}), de la solubilité aqueuse (S_w), de la pression de vapeur (P_{vap}) et de la constante de dégradation dans les sols (k_{degSol}) se trouvent dans la partie « Material and Methods » du Chapitre 4. Le K_{ow} a été déterminé à partir du K_{sw} en utilisant la teneur en carbone organique du sol (f_{oc}) selon les équations (4.1) et (4.2). La masse molaire du mélange a été estimée par la moyenne des toutes les masses molaires (MW) des constituants potentiels, alors que la constante de Henry (K_H) a été calculée avec la P_{vap} selon l'équation (4.8). Les valeurs par défaut du modèle USEtox ont été

utilisées pour la détermination des constantes de dégradation dans l'air (k_{degA}), l'eau (k_{degW}) et les sédiments (k_{degSed}).

3.1.4 Calcul et comparaison des FF, EF et FC pour l'écotoxicité aquatique

Toutes les propriétés précédemment déterminées ont ensuite été entrées dans le modèle USEtox afin de calculer les FF, EF et FC pour : 1) chacun des constituants potentiels de l'huile de traitement en utilisant les données de la base de données CONCAWE, 2) chacune des fractions selon la méthode HBM en prenant la moyenne arithmétique des FC des composés potentiels formant chacune des fractions (Table 4-2), 3) chacune des fractions originelles du TPHWG et leurs propriétés issues de leur rapport, 4) chacun des groupements adaptés de la méthode du TPHWG en utilisant les résultats des corrélations et 5) pour l'huile de traitement comme un seul composé avec les données expérimentales. Ce projet de recherche se concentre sur la catégorie d'impact *écotoxicité aquatique*. Dans USEtox, la matrice de sort est multipliée par celle représentant l'effet. Or, le seul compartiment d'émission pour lequel il existe un EF est l'eau douce continentale. Dans un premier temps l'effort a donc été concentré sur le sort dans le compartiment de réception de l'eau douce.

Les FC selon la méthode HBM ont été obtenus directement par la moyenne arithmétique des FC des composés au sein de chaque fraction et non pas par la multiplication de la moyenne arithmétique du sort et de celle de l'effet. Ces deux dernières ont été utilisées à des fins de comparaison. Le maximum, le minimum et la moyenne géométrique des facteurs obtenus par les calculs 1, 2, 3 et 4 ont été comparés entre eux et aux facteurs expérimentaux de l'huile de traitement (calcul 5).

La moyenne géométrique est privilégiée car les FC obtenus semblent suivre une loi log normale (annexe 2).

Des FF ont été également obtenus pour tous les compartiments de réception, en plus de l'eau douce, et d'émission.

3.1.5 Analyse de sensibilité

Une variation de plus et moins 50% a été appliquée à chacune des propriétés (MW , K_{oc} , K_{ow} , K_H , P_{vap} , S_w , EC_{50} , k_{degA} , k_{degW} , k_{degSed} , k_{degSol}) afin de déterminer son influence sur les résultats.

CHAPITRE 4 DÉVELOPPEMENT MÉTHODOLOGIQUE POUR LE CALCUL DE FACTEURS DE CARACTÉRISATION POUR L'ÉCOTOXICITÉ AQUATIQUE POUR DES MÉLANGES D'HYDROCARBURES EN ACV

4.1 Présentation de l'article

Ce chapitre présente le manuscript intitulé: "Methodological development for aquatic ecotoxicological characterization factor calculation for hydrocarbon mixtures in life cycle assessment", soumis au journal Environmental Toxicology and Chemistry en Novembre 2010. Cet article présente le développement méthodologique pour le calcul de facteurs de caractérisation pour l'écotoxicité aquatique pour des mélanges d'hydrocarbures en ACV.

Ce manuscript a été rédigé en collaboration avec Cécile Bulle (École Polytechnique de Montréal) et Louise Deschênes (École Polytechnique de Montréal).

4.2 Methodological development for aquatic ecotoxicological characterization factor calculation for hydrocarbon mixtures in life cycle assessment

4.2.1 Abstract

Most pollutants are released into the environment in the presence of co-contaminants, creating complex mixtures. Current life cycle assessment (LCA) methods do not include characterization factors (CFs) to evaluate the potential impacts of the complex organic mixture on aquatic ecosystems. This study aims to develop new CFs for a specific petroleum mixture within the context of an LCA. Petroleum products are an example of mixtures whose constituents have a common toxic mode of action: the narcosis effect. CFs were calculated for each potential constituent of a specific petroleum mixture. They were also evaluated for different fractions developed by using the hydrocarbon block (HBM) and Total Petroleum Hydrocarbon Criteria Working Group (TPHWG) methods as well as for the mixture itself by using experimental property measurements and estimations. The K_{sw} , S_w , $k_{degsoil}$ and P_{vap} were measured while the

MW, K_H , K_{ow} , K_{oc} , k_{degair} , $k_{degwater}$ and $k_{degdeposit}$ were estimated from the measurements or data available in the literature. The highest CFs in freshwater were obtained for an emission to freshwater (10^{+5} PAF.m³.d/kg). Experimental CFs are, on average, two orders of magnitude (10^{+2}) higher than the theoretical ones obtained from the literature. Even if the theoretical CFs are slightly lower than the experimental ones, the CFs developed from literature methods are good approximations for characterizing petroleum mixtures in LCA.

Key words: Life cycle assessment, petroleum products, characterization factor.

4.2.2 Introduction

Contaminants are rarely released independently into the environment. Most are emitted in the presence of other substances, and these substances can then interact as complex mixtures (Kinerson, 1987). These co-contaminants can influence each other's fate and effect.

The characterization of the ecotoxicological impacts of complex mixtures is a significant challenge in life cycle assessment (LCA), which aims to assess the potential impacts of a product, process or service throughout its life cycle, from the extraction of raw materials to its end of life (Jolliet *et al.*, 2005). An LCA study is made up of four stages: goal and scope definition, life cycle inventory, life cycle impact assessment (LCIA) and interpretation (Organisation Internationale de Normalisation, 2006). LCIA is a crucial phase, since it assesses potential environmental impacts by modelling each pollutant route from its emission to its final impact (the cause-effect chain). Characterization factors (CFs) are used to obtain the potential impacts associated with each contaminant emission. The quantities of contaminants released into the environment during the life cycle are multiplied by these CFs to obtain an impact score for different impact categories such as climate change, human toxicity or ecotoxicity (Jolliet, *et al.*, 2005). For the ecotoxic impact category, the CF is calculated by multiplying the fate factor (FF) by the effect factor (EF) for a given emission and receiving environmental compartments.

Current LCIA methods cannot assess the impacts of complex mixtures, and no CFs were developed for such contaminants (Cadotte *et al.*, 2007; Sanscartier *et al.*, 2010). For example, when diesel or any other petroleum product is emitted into the environment during the life cycle of a product, conventional LCIA methods do not account for any impacts. The first important

issue regarding such mixtures is the variability of their constituent physico-chemical properties, which influence their environmental behaviour (van de Meent *et al.*, 2009). However, some petroleum hydrocarbons may have similar modes of action in the environment and may present comparable properties (King *et al.*, 1996). Another issue regarding petroleum hydrocarbon mixtures is the variability in their composition depending on their sources and the industrial processes required to produce them (Canadian Council of Ministers of the Environment, 2000; Foster *et al.*, 2005). To assess the exact composition of these mixtures, analyses such as GCxGC (comprehensive two-dimensional gas chromatography) can be used. GCxGC consists in gas chromatography that combines two columns, with the second column allowing for the decomposition of unresolved peaks from the first (Dallüge *et al.*, 2003; Ventura *et al.*, 2008). However, seeing as such analytical tools are uncommon, little data is available on petroleum hydrocarbon mixture composition. This lack of information combined with composition variability must be accounted for when developing CFs for these mixtures.

In light of the lack of CFs for petroleum mixtures, approaches were advanced to include the impacts in certain LCA studies. Bare *et al.* detailed the option of assessing the impacts of each individual constituent of the mixture and adding them in order to determine the final impact (Bare *et al.*, 1999). This method has several drawbacks, including the fact that the exact composition of the mixture must be known even though the information is difficult to obtain and variable. It does not seem realistic to carry out a complete analysis of a mixture each time a CF is required for an LCA study. Another drawback is the fact that the approach does not account for interactions between compounds since it considers the behaviour of each component separately. In a comparative LCA study, Cadotte *et al.*, used the highest and lowest CFs of the individual constituents of diesel to determine the potential impact range of the mixture (Cadotte, *et al.*, 2007). This approach has the advantage of being easily implemented and providing a CF range. However, it does not indicate any CF distributions. The exact constituents of the product (but not their distribution) must also be known to determine the highest and the lowest compound CFs. Finally, Sanscartier *et al.* proposed to fraction the mixture into the four groups recommended in the CCME standards for analyzing petroleum hydrocarbons using hydrocarbon equivalent carbon numbers (ECN) (Canadian Council of Ministers of the Environment, 2000; Sanscartier, *et al.*, 2010). These recommended fractions are based on the findings of the Total Petroleum Hydrocarbon Criteria Working Group (TPHWG) (Edwards *et al.*, 1997; Gustafson *et al.*, 1997).

The fractions are defined in ECN as follows: F1: $6 < \text{ECN} < 10$, F2: $10 < \text{ECN} < 16$, F3: $16 < \text{ECN} < 34$, F4: $\text{ECN} > 34$. Aliphatic and aromatic sub-fractions are handled separately. Then, the properties of each fraction, as defined by the TPHWG, are used to perform the assessment. Sanscartier *et al.* considered only the fraction F2, since it was the most likely to volatilize and migrate off-site in a diesel-contaminated site. This method still does not take the interactions between co-contaminants into account. In addition, the mixture was simplified to one fraction (F2), which is not representative of the actual product.

Outside the field, several fractioning methods have been developed for risk assessment but have yet to be applied in LCA. They rely on the similarities in physico-chemical properties and, consequently, in environmental behaviour, of certain components. Two of these methods were found to be applicable in the context of an LCIA: the hydrocarbon block method (HBM) (King, *et al.*, 1996), which fractions substances according to their chemical structures (aliphatic, aromatic) and their boiling points, and the TPHWG method (Gustafson, *et al.*, 1997), which bases grouping on the chemical structures (aliphatic, aromatic) and ECN of the components. Calculation principles are provided to define hydrocarbon fractions and calculate their fate and effect in the environment.

This study aims to develop new CFs for a specific petroleum mixture within the context of an LCA by using the aforementioned methodologies from the literature. To do so, each potential mixture constituent CF was determined (as mentioned by Bare *et al.*). Then, the minimum and maximum of these CFs were assessed (as done by Cadotte *et al.*). The HBM approach was used to define fractions for the studied mixture. The original fractions of the TPHWG as defined in its study (Gustafson, *et al.*, 1997) were also applied, and the TPHWG method was then refined and adapted to the compounds in this study. None of the approaches take the interactions between the mixture components into account. Consequently, the study also aims to calculate an “experimental CF” obtained from physico-chemical data laboratory measurements for the studied petroleum mixture and compare it with the results from the theoretical methods. The purpose is to recommend a way of handling CFs for petroleum mixtures within the context of an LCA. A sensitivity analysis was also conducted to determine the properties that must be defined carefully because of their influence on the calculation results.

4.2.3 Materials and methods

4.2.3.1 Choice of petroleum mixture

This work pertains to pole-treating oil (CAS 68921-07-3), which is a hydrocarbon mixture from petroleum industry distillation processes (Esso, 2003). The mixture was obtained from Stella Jones (Delson, Canada) and is manufactured by ESSO. It is a good example of a petroleum mixture of an unknown specific composition. Certain experimental physico-chemical data (e.g. water solubility, partition coefficients, half life in soil) was available for the mixture (Bulle *et al.*, 2008) and completed for this study.

4.2.3.2 Determination of the potential constituents of the pole-treating oil

As is the case for many petroleum products, the actual composition of pole-treating oil is unknown. Seeing as the purpose is to develop a methodology applicable in LCA, the real composition of the mixture was not measured but assumed using the CONCAWE library, which is the largest and most complete hydrocarbon library available and contains physico-chemical properties for approximately 1 500 hydrocarbon compounds (Howard *et al.*, 2006; Redman, 2009; van de Meent, *et al.*, 2009). These properties were not measured but estimated using the SPARC calculator (Arp *et al.*, 2010; Hilal *et al.*, 2003; Redman, 2009). Because pole-treating oil is a petroleum distillate obtained with a boiling point (BP) range between 199°C and 350°C (Esso, 2003), all of the components from the CONCAWE library with a BP within this range were assumed to be potentially present in the studied mixture. The composition of pole-treating oil has never been assessed before. The most similar complex mixture is probably fuel oil #2 (CAS 68476-30-2), for which some analytical data are available in the literature (Gustafson, *et al.*, 1997). However, the composition of pole-treating oil may differ slightly from fuel oil #2 seeing as the physico-chemical properties reported in their material safety data sheets are not exactly the same (annex 3 - S1 in the supporting information document).

4.2.3.3 Fraction definition

The potential constituents of the pole-treating oil were fractionated using the HBM and TPHWG methods.

Different fraction resolutions can be used to apply the HBM: two (aliphatic and aromatic) to twelve (normal paraffins, iso-paraffins, n-cyclopentanes, n-cyclohexanes, mononaphtenics, dinaphtenics, polynaphtenics, monoaromatics, naphthenic monoaromatics, diaromatics, naphthenic diaromatics and polyaromatics) chemical classes and seven to thirty-one boiling point (BP) ranges (van de Meent, *et al.*, 2009). Based on uncertainty analyses, van de Meent *et al.* concluded that all of the proposed blocking schemes are suitable (van de Meent, *et al.*, 2009). Based on their fractioning schemes, four chemical classes and five BP ranges were used and eighteen blocks were determined. Four chemical classes were selected because the CONCAWE library distinguishes the components as aliphatics, aromatics, olefins and sulfur compounds. It was decided that these classes would be kept for the purposes of this study. The thirteen boiling point ranges from van de Meent *et al.* (van de Meent, *et al.*, 2009) were used – eight of them were empty since no potential pole-treating oil constituents had a boiling point in their ranges.

The TPHWG method fractions the components according to their chemical structures and ECN by considering their behaviour in the environment using a leaching factor (LF) ($\text{mg/L}_{\text{H}_2\text{O}}/\text{mg/kg}_{\text{soil}}$) (Gustafson, *et al.*, 1997). This factor consists in the individual quantification of a chemical's ability to leach from soil to groundwater, resulting from the application of a simple-screening-level partitioning model based on the ASTM Standard Guide for Risk-Based Corrective Action Applied at Petroleum Release Sites (RBCA) (ASTM, 1995). The LF depends on soil characteristics. In the TPHWG study of petroleum hydrocarbon mixtures, the LF ranges from 10^{-9} to 10^{-1} $\text{mg/L}_{\text{H}_2\text{O}}/\text{mg/kg}_{\text{soil}}$ for aliphatics and 10^{-4} to 10^{-2} $\text{mg/L}_{\text{H}_2\text{O}}/\text{mg/kg}_{\text{soil}}$ for aromatics (Gustafson, *et al.*, 1997). The thirteen TPHWG fractions as defined in the group's work were applied first (Gustafson, *et al.*, 1997). Then, the method was refined and adapted in order to be coherent with the studied potential components. In this study, an LF was calculated for each potential constituent of the pole-treating oil and plotted based on ECN (Figure 4-1).

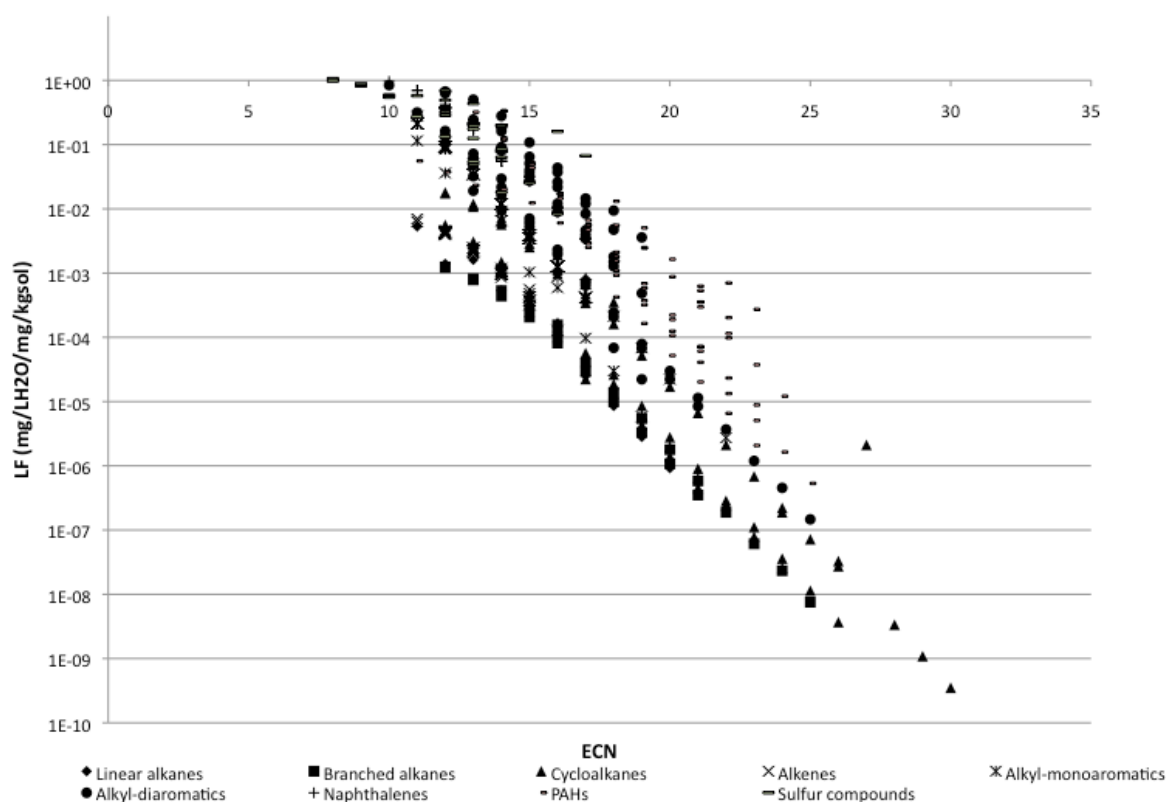


Figure 4-1: Diagram of the leaching factor (LF) based on the equivalent carbon number (ECN) to define the fraction according to the TPHWG method

In this paper, the LFs of the potential pole-treating oil constituents range from 10^{-10} to 10^{+00} mg/L_{H₂O}/mg/kg_{soil}. Components with an LF within two orders of magnitude were grouped together in a fraction. The same HBM chemical classes were used since the CONCAWE library separates hydrocarbons into aliphatics, aromatics, sulfur compounds and olefins. Furthermore, Figure 4-1 indicates that all olefins and sulphur components have respective LFs within a range of two orders of magnitude, validating the decision to make two separate groups for olefins and sulphur compounds. Finally, potential pole-treating oil constituents were grouped according to four chemical classes (aliphatics, aromatics, olefins and sulfur compounds) and eight ECN ranges (see Table 4-1), except for olefins and sulfur compounds, which form two distinct fractions. In total eighteen fractions were obtained.

Table 4-1: Distribution of the assumed constituents within each determined fraction

Component distribution in each fraction														
HBM (18 fractions)					TPHWG (13 fractions)				TPHWG refined (18 fractions)					
					AL		AR		AL		AR		S	OL
BP ^a ranges (°C)	AL ^b	AR ^c	S ^d	OL ^e	ECN ranges	Component nb ^f	ECN ranges	Component nb	ECN ranges	Component nb	ECN ranges	Component nb	Component nb	Component nb
< 216	32	9	2	9	5 - 6	0	5 - 7	0	11-14	76	10-12	15	37	37
216- 254	117	42	4	17	>6 - 8	0	>7 - 8	0	14-17	124	12-14	74		
254-	61	53	4	11	>8 -	0	>8 -	2	17-18	15	14-16	77		

287					10		10							
287-330	58	135	17	0	>10 - 12	43	>10 - 12	52	18-21	42	16-18	68		
> 330	35	61	10	0	>12 - 16	194	>12 - 16	147	21-23	20	18-19	22		
					>16 - 35	68	>16 - 21	86	23-25	15	19-22	31		
							>21 - 35	10	25-27	7	22-23	5		
									27-30	3	23-25	4		

a: Boiling Point b: Aliphatic

c: Aromatic

d: Sulfur compounds

e: Olefins

f: Number

4.2.3.4 Determination of the properties required for impact assessment

4.2.3.4.1 Properties needed to calculate the CFs

Freshwater aquatic ecotoxicological characterization factors (CFs) were calculated using USEtox model version 1.01 (Rosenbaum *et al.*, 2008), which requires the following input data to determine a compound FF and, consequently, a CF: molar weight (MW), octanol-water partitioning coefficient (K_{ow}), water solubility (S_w), Henry's Law constant (H), organic carbon-water partitioning coefficient (K_{oc}), vapour pressure (P_{vap}) and half-lives in air, water, sediment and soil. Seeing as the AMI method is used in USEtox to calculate the EFs (Payet, 2005; Rosenbaum, *et al.*, 2008), EC_{50} toxicity values (the concentration at which 50% of the population of a specific species is affected) are required as an input to determine the $HC50_{EC50}$ (the geometric mean of the EC_{50}).

4.2.3.4.2 Potential pole-treating oil constituents

The properties of the potential pole-treating oil constituents needed to calculate the FF with USEtox were taken from the CONCAWE library. For some potential constituents, certain properties were compared with empirical ones in literature reported by the TPHWG (Gustafson, *et al.*, 1997). It was noted that some K_{ow} values from the CONCAWE library were surprisingly high (up to around $\log K_{ow}=14$ for the 2,4,6,10,14-pentamethyl-2-decalin for example) when compared to both TPHWG values and the regulatory criteria for persistent toxic substances (PTS) ($\log K_{ow} > 5$) (Barra, 2007). This was also the case when compared to K_{ow} values for compounds known to be extremely hydrophobic such as dioxins and furans ($\log K_{ow}$ between 6 and 9) (Bulle, 2008; Mackay *et al.*, 1992; Marple *et al.*, 1986). In addition, calculated $\log K_{ow}$ above 6 were stated as possibly overestimated (Lyman *et al.*, 1990), those above 7 could be considered as suspect and estimated or measured, and $\log K_{ow}$ above 8 were to be used cautiously (Mackay *et al.*, 1993). Properties in the CONCAWE library are calculated with the SPARC calculator (Arp, *et al.*, 2010; Hilal, *et al.*, 2003). The algorithm used to calculate K_{ow} comes from Hilal *et al.*, which uses a correlation based on activities at infinite dilution (Hilal *et al.*, 2004). The correlation used for the $\log K_{ow}$ is not clear, and there seems to be discrepancies between the calculations in the appendix and the main text. Following the steps described in the paper, it was impossible to find the same $\log K_{ow}$ given as an example in the appendix. For these various reasons, K_{ow} values

from the CONCAWE library were deemed unreliable. To obtain more realistic values, K_{ow} (L/kg) were recalculated with the organic carbon-water partitioning coefficient (K_{oc}) (L/kg) according to the following equations:

$$\log K_{oc} = \log K_{ow} - 0.21 \quad (4.1)$$

$$\log K_{oc} = -0.62 * \log S_w (mg/L) + 3.95 \quad (4.2)$$

Equation (4.1) developed by Karickhoff *et al.* (Karickhoff *et al.*, 1979) seems relevant for this study seeing as it was developed for hydrophobic compounds. Equation (4.2) was proposed by Hassett and Banwart for organic chemicals (Hassett & Banwart, 1989). Another correlation between the K_{oc} and the K_{ow} was defined by Karickhoff (Karickhoff, 1981), whose results do not differ significantly from those from equation (4.1). Karickhoff *et al.* also developed another correlation between the S_w with the K_{oc} for hydrophobic pollutants (Karickhoff, *et al.*, 1979), which yielded results similar to those from equation (4.2). New calculations of $\log K_{ow}$ using the two equations led to more realistic values ($\log K_{ow}$ between 2,7 and 9,59) than CONCAWE library values ($\log K_{ow}$ between 3,03 and 13,58). These new values were therefore used for this study.

The toxicity data needed in USEtox are not available in the CONCAWE library, and a literature review was therefore carried out to find appropriate figures. All hydrocarbon compounds were deemed to have the same toxic mode of action: narcosis, as established previously in a study by MacLeod *et al.* (King, *et al.*, 1996; MacLeod *et al.*, 2004). However, it should be noted that this assumption has certain limits since some hydrocarbons present in pole-treating oil (e.g. polycyclic aromatic hydrocarbons (PAHs)) are also carcinogens (www.epa.gov, access in September 2010) and combine several modes of action. Veith *et al.* developed empirical correlations for three species (*Pimephales promelas*, *Poecilia reticulata* and *Daphnia magna*) between K_{ow} and EC_{50} for petroleum hydrocarbon compound narcosis (Veith & Broderius, 1990). EC_{50} values were determined using these correlations (equations (4.3), (4.4), (4.5)). The following correlations were calculated from the diagrams available in the Veith *et al.* study.

$$\log EC_{50} = -0.0047 * (\log K_{ow})^4 + 0.0127 * (\log Kow)^3 \quad (4.3)$$

$$+ 0.503 * (\log K_{ow})^2 - 3.8447 * \log K_{ow} + 2.9845$$

$$\log EC_{50} = -0.86 * \log K_{ow} - 1.11 \quad (4.4)$$

$$\log EC_{50} = -0.91 * \log K_{ow} - 1.26 \quad (4.5)$$

EC₅₀ is the toxicity data in mmol/L and K_{ow} is the octanol-water partition coefficient (adimensional). Equation (4.3) is for the *Pimephales promelas*, equation (4.4) for *Poecilia reticulata* and equation (4.5) for *Daphnia magna*.

Another relationship linking the EC₅₀ to the K_{ow} was illustrated by McGrath *et al.* and Di Toro *et al.* for petroleum products (Di Toro *et al.*, 2000; McGrath *et al.*, 2005). The correlation described in their papers (equation (4.6)) was therefore used to calculate more EC₅₀ data.

$$\log EC_{50} = -0.945 * \log K_{ow} + \Delta c_1 + \log C_L^* \quad (4.6)$$

Where Δc_1 (adimensional) and C_L^* (mmol/kg_{octanol}) represents a class correction factor and the species-specific critical target lipid body burdens, respectively. Aliphatics and aromatics have a class correction factor of 0, and the polycyclic aromatic hydrocarbons (PAHs) have a class correction factor of -0.263. C_L^* depending on the species: 61.7 mmol/kg for the *Oncorhynchus mykiss*, 111 mmol/kg for the *Daphnia magna* and 46.8 mmol/kg for the *Selenastrum capricornutum* (McGrath, *et al.*, 2005).

4.2.3.4.3 The HBM and TPHWG methods

With regards to the HBM method, the properties previously determined for each potential constituent were used directly because the aggregation into fractions only occurs at the CF level. All of the steps in the calculations performed in this study are presented in Table 4-2.

Table 4-2: Method differences in CF determination

	HBM	TPHWG	TPHWG refined
Definition of the fraction properties	<ul style="list-style-type: none"> - No property calculations - Direct use of the potential constituent properties 	<ul style="list-style-type: none"> - Taken from the TPHWG report (volume 3) 	<ul style="list-style-type: none"> - Development of correlations between each property and the equivalent carbon number (ECN) - Use of the correlations and the average ECN of each fraction to define the block property
CF calculation	$CF_i = \frac{1}{n} * \sum_j CF_j$ <p>n: number of constituents in the fraction i</p> <p>j: compounds within the group i</p>	<ul style="list-style-type: none"> - USEtox 1.01 with the properties previously defined - Multiplying the FF and the EF 	<ul style="list-style-type: none"> - USEtox 1.01 with the properties previously calculated - Multiplying the FF and the EF
FF calculation	$FF_i = \frac{1}{n} * \sum_j FF_j$ <p>n: number of constituents in the fraction i</p> <p>j compounds within the group</p>	USEtox 1.01	USEtox 1.01

	i		
EF calculation	$EF_i = \frac{1}{n} * \sum_j EF_j$ <p>n: number of constituents in the fraction i</p> <p>j: compounds within the group i</p>	USEtox 1.01	USEtox 1.01

For the direct application of the TPHWG fractions, the properties of each fraction were taken from the TPHWG report (Gustafson, *et al.*, 1997). For the refined TPHWG fractions, properties needed to be calculated to represent the behaviour of each fraction. To do so, a correlation was established for each property needed as input data in USEtox between the considered property and the ECN for each chemical class. For example, Figure 4-2 shows the correlations between water solubility and ECN for the four chemical classes occurring in pole-treating oil in this work.

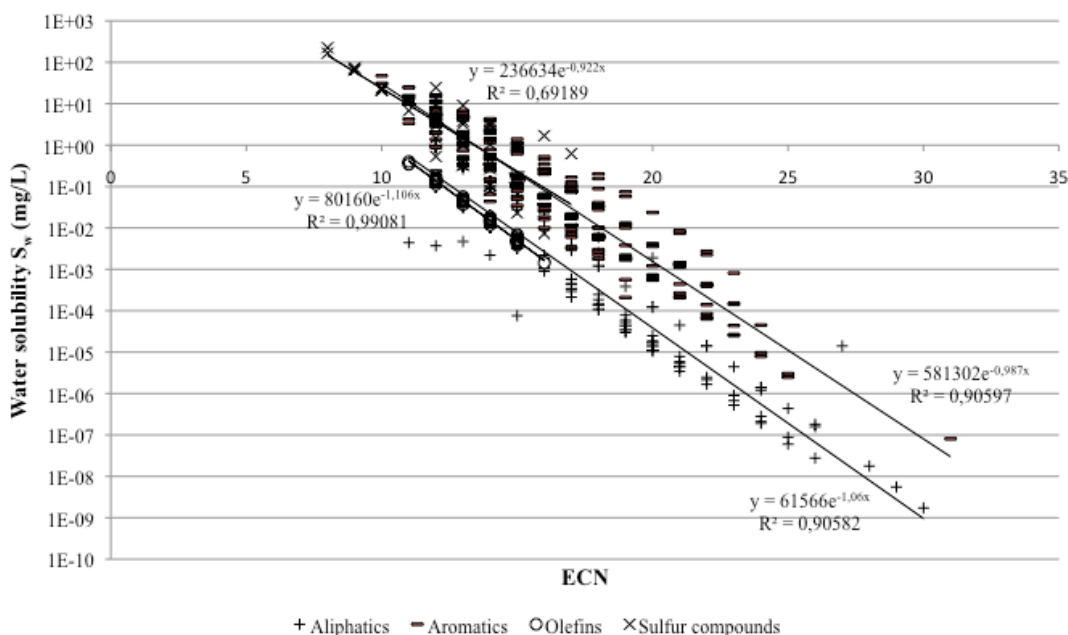


Figure 4-2: Correlations developed for the calculation of the water solubility of the fractions from the TPHWG method

Once this correlation is established for a given property, the average ECN of the potential pole-treating oil constituents classified in each fraction is determined. It is then used to apply the correlation and determine the corresponding value of the property for each fraction. This value does not correspond to any specific constituent of the fraction but rather represents the environmental behaviour of all of them.

4.2.3.4.4 Experimental data for pole-treating oil

Finally, the properties of the pole-treating oil as a whole component were measured in the laboratory.

The partition coefficient for oil between soil and water (K_{sw}) was determined experimentally using the ASTM Standard Method D 5285-92 (ASTM, 1997) with sandy soil (0.38% (w/w) total organic carbon content, pH of 7 and 4.1% (w/w) water content). The K_{ow} was determined from the K_{sw} , knowing the organic carbon content of the soil (f_{oc} , % (w/w)) and using equations (4.1) and (4.7).

$$K_{sw}(L/kg) = f_{oc}(\% (w/w)) * K_{oc}(L/kg) \quad (4.7)$$

Where K_{oc} is the organic carbon-water partition coefficient. Equation (4.7) was developed by Karickhoff *et al.* (Karickhoff, 1981).

S_w was determined according to the Standard Test Method for Measurements of Aqueous Solubility E1148-02 replacing centrifugation by decantation (ASTM, 2004; Bulle, *et al.*, 2008), and P_{vap} was measured according to the ASTM standard method E1194-07 (ASTM International Standards WorldWide). The biodegradation kinetic constant in soil was also measured in the laboratory (Bulle, *et al.*, 2008) using a sandy soil (0.38% (w/w) total organic carbon content, pH of 7 and 4.1% (w/w) water content). For all assays, the pole-treating oil concentrations in water and soil were analyzed by gas chromatography using a Varian model C-3380 equipped with a flame ionization detector, as per CEAEQ's analytical method for petroleum hydrocarbons (C10-C50) in water (CEAEQ, 2001). The oil MW was not measured but estimated by the geometric mean of the potential constituents from the CONCAWE library. The Henry Law constant was determined using P_{vap} and S_w (Equation (4.8)).

$$K_H = \frac{P_{vap} * MW}{S_w} * 10^{-3} \quad (4.8)$$

Where K_H (Pa.m³/mol) is the Henry Law constant, P_{vap} (Pa) the vapor pressure, MW (g/mol) the molecular weight and S_w (g/L) the water solubility.

Finally, the toxicity data for the pole-treating oil were evaluated using K_{ow} in the equations (4.3), (4.4) and (4.5). No measurements were determined for the degradation constants in air, water or sediment. The default values from USEtox model version 0.994 were used instead.

4.2.3.5 FFs, EFs and CFs: Calculation and comparison

The determined properties were then used in the USEtox model to calculate the FFs, EFs and CFs for: 1) each of the potential pole-treating oil constituents, 2) each HBM fraction using the arithmetic mean of the CFs of all of the potential components present in the fraction (see Table 4-2) (van de Meent, *et al.*, 2009), 3) each TPHWG fraction based on the properties given in the TPHWG work, 4) each TPHWG refined fraction using the fraction representative properties and 5) the oil as a whole component using experimental data.

FFs and CFs were calculated for six different emission compartments: urban air, continental air, freshwater, natural soil and agricultural soil. This study focuses on the aquatic ecotoxicity impact category since USEtox only calculates the EF values for the freshwater emission compartment. Thus, only the FFs in the freshwater receiving compartment of the FF matrix were relevant here.

The proportions of the different potential constituents and fractions were not used to weight the arithmetic means. Seeing as they are not known, each fraction and constituent was given the same weight. However, because the composition of the petroleum mixture is usually unknown and variable from one sample to the next, the situation is quite representative of real life. It would not necessarily be relevant to analyze a precise mixture composition to determine these proportions, which would differ from one sample to the next. Moreover, it is important to evaluate how reliably CFs can be estimated without knowing the composition of the mixture.

The HBM method was not meant to be used to determine FFs and EFs for each fraction. However, for this study, FFs and EFs were needed for interpretation purposes. They were calculated using the FF and EF arithmetic means for all of the potential constituents in each fraction. However, CFs were obtained by following the original HBM method (using the arithmetic mean of the CFs of the potential constituents) and not by multiplying the fraction FFs and EFs.

The maximum, minimum and geometric mean of the factors obtained from the calculations 1, 2, 3 and 4 were compared to each other and to the experimental factors from the oil measurements (calculation 5). The geometric mean was chosen since the CF distribution seemed to be log normal.

4.2.3.6 Sensitivity analysis

Determining the different properties is a key part of CF evaluation in this paper. Because some were estimated from correlations and then compared to experimental data, it was important to determine which had the greater influence on the factors (FFs, EFs and CFs) obtained. To do so, a sensitivity analysis was carried out. A change of plus and minus 50% was applied to each of the physico-chemical properties used in the USEtox calculations. The variation percentage in the results was then observed.

4.2.4 Results and discussion

4.2.4.1 Determination of the potential pole-treating oil constituents and fraction definition

In keeping with the proposed methodology, 677 potential constituents were identified for pole-treating oil. The list of these constituents is available in the supporting information document (annex 4 - S2). Table 4-1 shows the fractions developed and the constituent distribution in each fraction for both the HBM and TPHWG methods. It should be noted that certain fractions contain over one hundred compounds while others count less than ten components. The potential constituent distributions in the fractions are variable.

4.2.4.2 Determination of the required properties for impact assessment

All of the potential constituent and fraction properties (only TPHWG and refined TPHWG) are available in the supporting information document (annex 4 - S2, annex 5 - S3 and annex 6 - S4).

The properties of thirty potential constituents out of the 677 were compared to the empirical and calculated data from the TPHWG report. Most of the differences were observed for the $\log K_{oc}$ and the $\log K_{ow}$. The $\log K_{ow}$ used in this study generally differed by one order of magnitude as compared to the empirical ones reported in the TPHWG report. Some $\log K_{ow}$ values reported in the TPHWG work were then estimated from algorithms. The calculated ones differ more from the values used in this study. However, some estimated $\log K_{ow}$ values from the TPHWG study are also above 8 (as in the CONCAWE library) and should therefore be considered with caution (Mackay, *et al.*, 1993).

Table 4-3 shows the minimum, maximum and geometric means of the properties of 1) the potential constituents of the pole-treating oil, 2) the original TPHWG fractions, 3) the refined TPHWG fractions and 4) the experimental and estimated properties of the pole-treating oil.

Table 4-3: Maximum, minimum and geometric mean of the potential constituent and fraction properties and properties of the pole-treating oil

	Max	Min	Geometric mean
MW (g/mol)			
Potential components	4,21E+02	1,28E+02	2,10E+02
TPHWG method	2,70E+02	7,80E+01	1,39E+02
Refined TPHWG method	3,97E+02	1,45E+02	2,47E+02
Oil	2,05E+02		
Sw (mg/L)			
Potential components	2,25E+02	1,73E-09	2,70E-02
TPHWG method	1,80E+03	2,50E-06	8,85E-01
Refined TPHWG method	1,12E+01	4,67E-09	1,00E-03
Oil	1,43E+01		
Koc (L/kg)			
Potential components	2,42E+09	3,10E+02	8,37E+04
TPHWG method	6,31E+08	7,94E+01	1,96E+04
Refined TPHWG method	1,30E+09	1,99E+03	8,30E+05
Oil	3,42E+04		
Kow (-)			
Potential components	3,23E+09	4,15E+02	1,12E+05
TPHWG method	8,44E+08	1,06E+02	2,62E+04

Refined TPHWG method	1,74E+09	2,67E+03	8,62E+05
Oil	8,32E+04		
EC ₅₀ (mg/L)			
Potential components	2,44E-01	5,30E-08	6,22E-03
TPHWG method	1,47E+00	5,03E-07	1,54E-02
Refined TPHWG method	1,21E-01	1,84E-07	1,05E-03
Oil	4,49E-04		
K _H (Pa.m ³ /mol)			
Potential components	3,77E+07	1,50E-01	1,58E+04
TPHWG method	1,20E+07	1,62E+00	5,81E+03
Refined TPHWG method	2,03E+07	6,52E+00	1,75E+04
Oil	2,56E+02		
P _{vap} (Pa)			
Potential components	1,77E+02	2,65E-07	5,89E-01
TPHWG method	3,55E+04	4,46E-05	3,71E+01
Refined TPHWG method	3,59E+01	2,39E-04	7,09E-02
Oil	1,75E+01		
k _{degA} (s ⁻¹)			
Potential components	3,51E-04	2,25E-06	1,53E-05
TPHWG method	3,52E-06	3,52E-06	3,52E-06

Refined TPHWG method	3,24E-04	9,38E-06	1,93E-05
Oil	3,52E-06		
$k_{degW} (s^{-1})$			
Potential components	7,89E-06	1,54E-10	3,01E-07
TPHWG method	1,30E-07	1,30E-07	1,30E-07
Refined TPHWG method	1,72E-06	1,81E-08	1,40E-07
Oil	1,30E-07		
$k_{degSed} (s^{-1})$			
Potential components	1,97E-06	3,85E-11	7,52E-08
TPHWG method	6,58E-11	6,58E-11	6,58E-11
Refined TPHWG method	4,91E-07	5,18E-09	4,09E-08
Oil	6,58E-11		
$k_{degSoil} (s^{-1})$			
Potential components	7,89E-06	1,54E-10	3,01E-07
TPHWG method	6,58E-10	6,58E-10	6,58E-10
Refined TPHWG method	1,72E-06	1,81E-08	1,40E-07
Oil	5,09E-08		

First, the properties taken directly from TPHWG work appear to be slightly outside the range of those of the potential constituents (either lower or higher). Table 4-3 indicates that the mixture properties, which are directly estimated from laboratory measurements, vary slightly as compared to the geometric mean of the single component property. This is normal seeing as the distribution

of the potential constituents is not known and potential interactions can occur between pole-treating oil constituents. However, the oil properties are generally in the range of the constituents'. The only two properties for which the measured oil data is significantly displaced from the centre of the constituent distribution (and in both cases was close to the maximum value) are S_w and P_{vap} . Even if Raoult's Law states that the solubility of a compound is lower when the substance is in the presence of another (Santé Canada, 2006), this does not seem to be the case here. This occurrence can be explained by the fact that the ASTM method was developed to determine the individual substance S_w and not a mixture. Consequently, the experimental results could be distorted. In keeping with the CEAEQ's methodology for hydrocarbon mixtures analysis, GC-FID was used to determine oil concentration in water once solubilised using standard pole-treating oil solutions. In doing so, the assumption is that the constituent distribution in water is the same as in the standard reference solution. This, however, is not the case here. In fact, during the experiment, the constituents of the oil were solubilised up to their individual S_w (or slightly under, as stated by Raoult's Law). Consequently, the most soluble compounds (dihydro-benzo(b)thiophene (2,25E+02 mg/L)) were solubilised to a higher extent than the less soluble ones (2,4,6,10,14-pentamethyldodecyl-2-decalin (1,73E-09 mg/L)) as compared to the original pole-treating oil. The shape of the chromatograph of the solubilised pole-treating oil is then no longer the same as the original shape of the pole-treating oil chromatograph (the reference standard solution). This phenomenon could explain the superiority of the oil S_w as compared to its potential constituents, mainly driven by the most soluble of them. Exactly the same artefact explains a higher P_{vap} than could be expected.

4.2.4.3 Fate factor (FF) comparison

The FFs obtained for continental freshwater as the receiving compartment as per the different approaches are presented and compared in

Figure 4-3 for emissions to continental air, continental freshwater and continental natural soil. Other FFs in continental freshwater as the receiving compartment for an emission to other environmental compartments (urban air, seawater, agricultural soil) present similar results and can be found in supporting information document (annex 7 - S5).

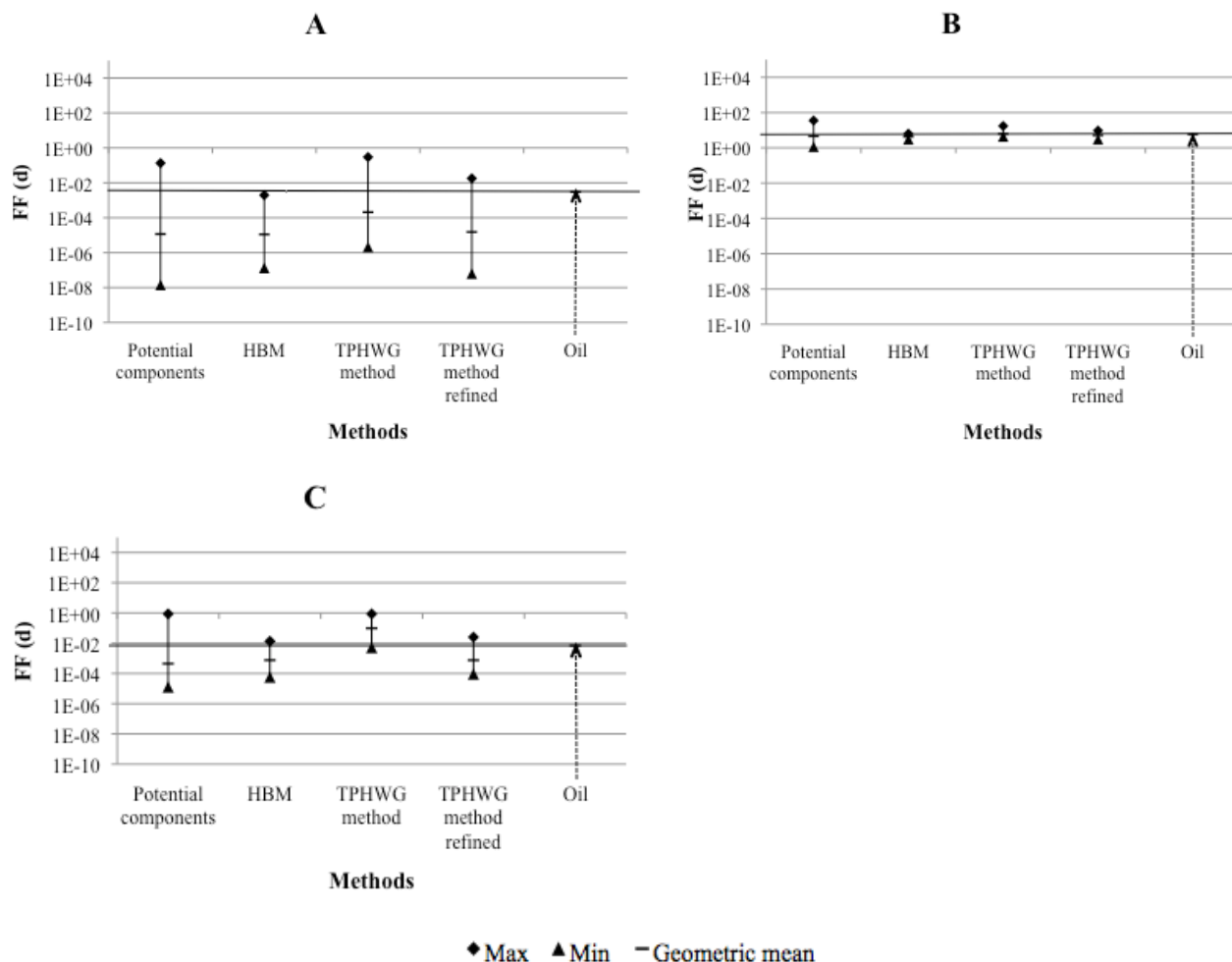


Figure 4-3: Fate factors (FFs) for three different emission compartments with continental freshwater as the receiving compartment. The TPHWG method corresponds to the fractions directly taken from TPHWG work, while the refined TPHWG method corresponds to the fractions that were redefined by applying the entire TPHWG methodology to the study constituents. A: Emission to continental air; B: Emission to continental freshwater and C: Emission to continental natural soil.

First, the highest FFs are observed for a direct emission to continental freshwater because the USEtox calculations do not consider any direct transfer from water to soil. Pollutants could leave the freshwater compartment only via the air, and the potential oil constituents are not very volatile.

The FF ranges of the original TPHWG fractions directly taken from the TPHWG paper are, in general, slightly outside the ranges of the other methods. This could be explained by the fact that part of the components used in the TPHWG work to elaborate fractions and determine their properties are not representative of pole-treating oil. Then, the experimental oil FF (FF_{exp}) is generally higher than the theoretical ones (

Figure 4-3 and annex 7 - S5), irrespective of the emission compartment. The significant superiority of the oil S_w and the slight inferiority of its K_{oc} and K_{ow} could explain this general trend (Table 4-3). Even if there are some differences between the resulting factors, the methods from the literature lead to reasonable FFs as compared to the experimental ones, with generally a maximum of one order of magnitude between the FF_{exp} and the arithmetic mean of the theoretical FF. As a matter of fact, the FF_{exp} is within the range of the theoretical ones.

4.2.4.4 Effect factor (EF) comparison

The EFs obtained for the potential constituents, HBM fractions, TPHWG fractions and refined TPHWG fractions are presented in Figure 4-4.

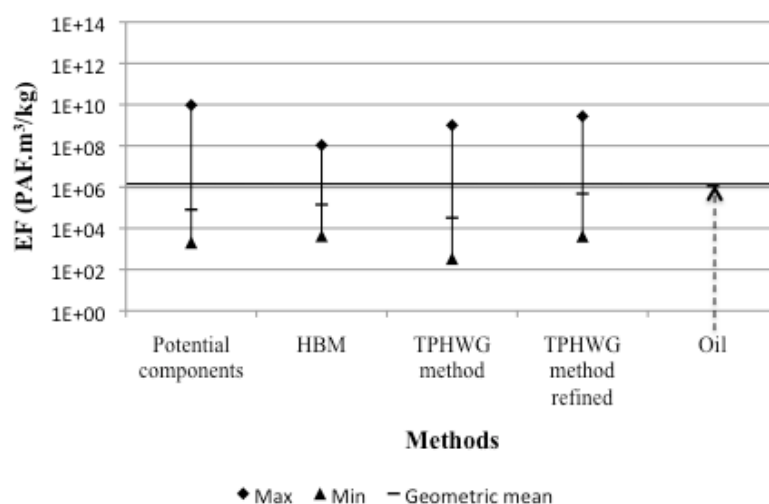


Figure 4-4: Effect factors (EFs) of the potential constituents and theoretical methods as compared to the experimental CF of the oil. The TPHWG method corresponds to the fractions directly taken from TPHWG work, while the refined TPHWG method corresponds to the fractions that were redefined by applying the entire TPHWG methodology to the study constituents.

The EF range of the original fractions from the TPHWG study is partly outside the ranges of the potential constituents, the refined TPHWG fractions and the HBM fractions. The oil effect factor (EF_{exp}) is quite close to the EFs of the theoretical methods (Figure 4-4). Consequently, the methods from the literature seem to adequately approximate the EF of the studied petroleum mixture. However, it must be stated that the aquatic ecotoxic effects were estimated (and not measured) using the same correlation for the pole-treating oil, its fractions and its potential constituents. Consequently, the trend of the EF_{exp} depends directly on the K_{ow} , whose values are not completely reliable. EF estimation could be improved by using experimental values for the EC_{50} instead of theoretical calculations depending on K_{ow} . This would show the potential interactions between co-contaminants, but it is quite unrealistic to collect experimental data for all 677 potential constituents and the pole-treating oil as a whole component. However, experimental effect factors for pole-treating oil would be stronger and more reliable than those found in this study.

4.2.4.5 Characterization factor (CF) comparison

The CFs for an emission to continental air, freshwater and natural soil with freshwater as receiving compartment are presented in Figure 4-5, while the results for the three other emission compartments can be found in the supporting information (annex 8 - S6).

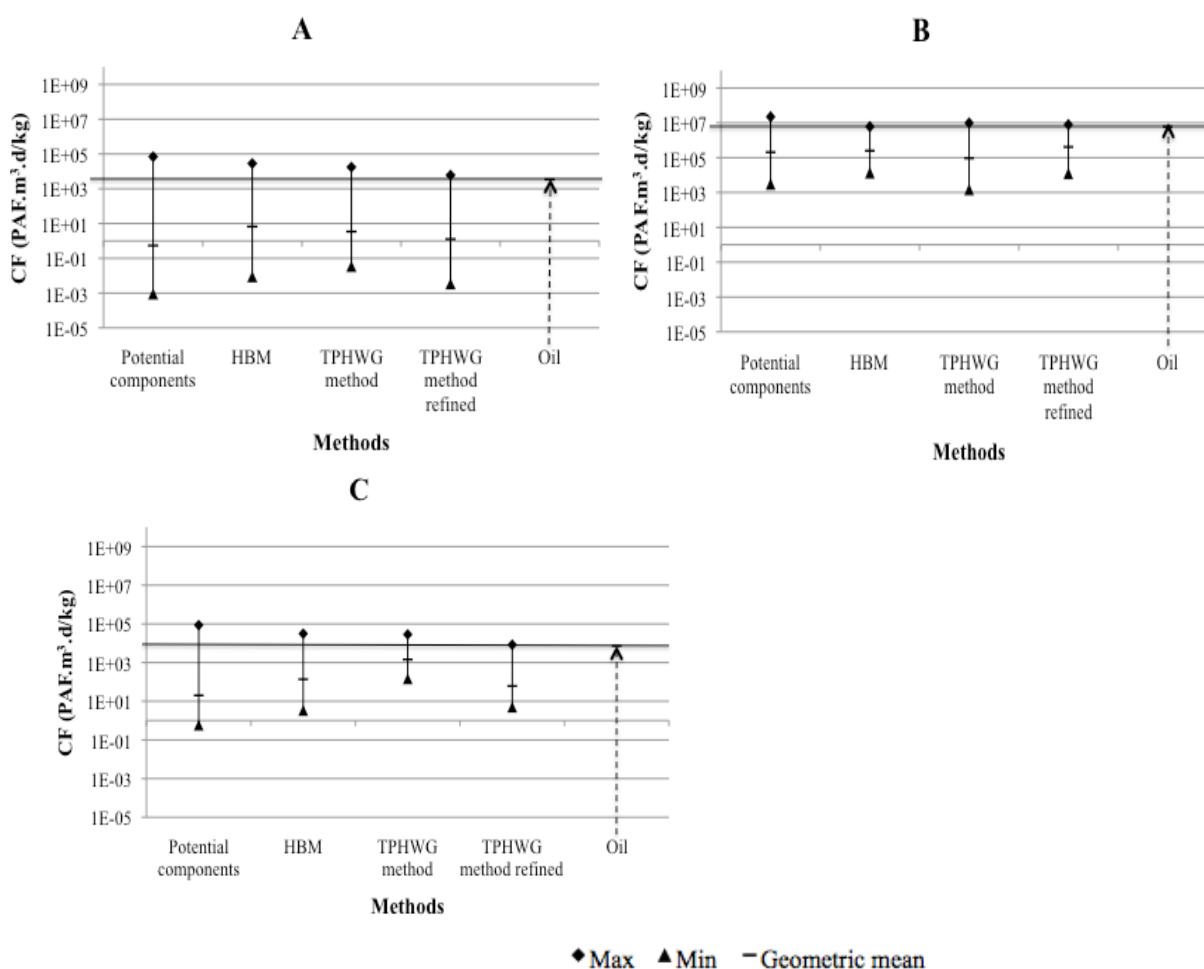


Figure 4-5: Characterization factors (CFs) obtained for three different emission compartments with continental freshwater as the receiving compartment. The TPHWG method corresponds to the fractions directly taken from TPHWG work, while the refined TPHWG method corresponds to the fractions that were redefined by applying the entire TPHWG methodology to the study constituents. A: Emission to continental air; B: Emission to continental freshwater and C: Emission to continental natural soil.

First, the potential constituents and fraction CFs can vary, as is the case for the properties. The highest CFs are observed for an emission to continental freshwater because of the high fate factors (FFs) for the potential constituents and the fractioning methods (Figure 4-4 and

Figure 4-3). Similarly to what was observed for FF and EF, the TPHWG original fraction CF range is either partly outside or much smaller than that of the potential constituents or fraction CFs since it is not entirely representative of pole-treating oil. The refined fractions are more representative of the contaminants studied as part of this paper.

The experimental CF (CF_{exp}) seems to be generally underestimated by the theoretical methods for the six emission compartments studied. Because the CF is obtained by multiplying the EF and the FF, the superiority of the CF_{exp} is the result of the superiority of the FF_{exp} . However, most of the theoretical and experimental CFs differ by two orders of magnitude. Modelling uncertainty for ecotoxicological CFs in an LCIA is considered to be of some two orders of magnitude (Rosenbaum, *et al.*, 2008). Consequently, pole-treating oil CFs are adequately approximated by the methods from the literature that were applied in this study. The significant superiority of the S_w and the slight inferiority of the K_H of the pole-treating oil once again explain this general trend. A better estimation of the mixture S_w will probably lead to an experimental CF that is even closer to the theoretical values.

If the results are compared to those in the literature, the CF_{exp} for an emission to soil ($7,3 \cdot 10^{+03}$ PAF.m³.d/kg) is included in the aquatic ecotoxicological CF range used by Cadotte *et al.* for diesel emissions to soil (minimum: $2,91 \cdot 10^{-02}$ PAF.m³.d/kg, maximum: $9,65 \cdot 10^{+06}$ PAF.m³.d/), and the CF_{exp} for an emission to air ($3,41 \cdot 10^{+03}$ PAF.m³.d/kg) is seven orders of magnitude higher than the Sanscartier *et al.* aquatic ecotoxicological CF for an emission to air ($2,6 \cdot 10^{-04}$ PAF.m³.d/kg) – a significant difference. Cadotte *et al.*'s approach includes the CF_{exp} , which takes potential contaminant interactions into account by taking the range of CFs of all the known compounds present in diesel. However, their diesel CF variability is higher than the one obtained in this study for the potential constituents of pole-treating oil, since their CF range (10^{-02} to 10^{+06} PAF.m³.d/kg) is wider than the CF range in this work (10^{-01} to 10^{+04} PAF.m³.d/kg). As compared to the CF_{exp} found in this study, Sanscartier *et al.*'s method largely underestimates the aquatic ecosystems impact of a diesel emission into the air. This is probably due to the fact that only the

most volatile fraction impact was chosen to represent the mixture's impact, possibly leading to an underestimation as compared to the result obtained using the other methods in this study.

The studied mixture could be made up of more or less constituents than what was assumed in this study. The estimations of the proportions of the different components or fractions in the mixture were considered to be beyond the scope of this paper since petroleum mixture composition is very variable. However, in future work, the distributions of the components or fractions could be determined to assess the extent to which a better estimation of oil composition would change the estimation of the CFs. The uncertainty related to the lack of information on the exact composition of the mixture would also be assessed.

Finally, this study focuses on a mixture in which constituents are quite similar, both in terms of physico-chemical properties and toxic mode of action. However, other mixtures are present in the environment and may be composed of substances that behave quite differently. For example, the pole-treating oil in this study is usually used as a solvent for pentachlorophenol (PCP) to treat wood poles under pressure. It is generally emitted into the environment with PCP, dioxins and furans, which are technical PCP impurities. Dioxins and furans do not behave like the hydrocarbons in the environment, and their fate can be influenced by hydrocarbon compounds. This type of complex mixture constitutes another issue with regards to CF estimation and will be the subject of further work.

4.2.4.6 Sensitivity analysis

The results of the sensitivity analysis are presented in Table 4-4 and indicate that the K_H has a non-negligible influence on the final results of the calculations.

Table 4-4: Sensitivity analysis of the results depending on the properties values (Boxes in grey represent the most sensitive parameters)

Property	Property change	Result change (approximately)		
		CF	FF	EF
MW	+ 50%	12%	11%	0%

	- 50%	19%	17%	0%
S_w	+ 50%	0%	0%	0%
	- 50%	0%	0%	0%
K_{oc}	+ 50%	3%	0%	0%
	- 50%	10%	0%	0%
K_{ow}	+ 50%	0%	0%	0%
	- 50%	0%	0%	0%
EC₅₀	+ 50%	68%	0%	68%
	- 50%	217%	0%	217%
K_H	+ 50%	33%	34%	0%
	- 50%	101%	101%	0%
P_{vap}	+ 50%	0%	0%	0%
	- 50%	0%	0%	0%
k_{degA}	+ 50%	32%	32%	0%
	- 50%	87%	85%	0%
k_{degW}	+ 50%	21%	19%	0%
	- 50%	38%	30%	0%
k_{degSed}	+ 50%	0%	0%	0%
	- 50%	0%	0%	0%

$k_{degSoil}$	+ 50%	7%	7%	0%
	- 50%	9%	9%	0%

The K_H was determined using the S_w (equation (4.8)), whose experimental determination was discussed previously as being a possible source of overestimation. Because the experimental oil S_w is an uncertain parameter and influent for FF and CF calculations, it will be important for further work to find a better way of measuring it for a mixture.

The FFs and CFs that are obtained are also sensitive to changes in the EC_{50} value, which, in this study, strongly depends on the K_{ow} . The K_{ow} is a property that is not well known, and its values change based on the algorithm that is applied. An alternative to avoid the use of the K_{ow} would be to use measured EC_{50} value or to measure the K_{ow} itself. The results are also sensitive to the degradation constant in the air. This value was defined based on a default value from USEtox. Though the degradation constant is not representative of the studied mixture, it still has a non-negligible influence on the factors that are obtained. Consequently, the S_w , K_{ow} and degradation constant in the air should be improved for more robust results. Experimental measurements would be a good alternative, but would entail many measurements for the 677 potential constituents.

4.2.5 Conclusion

Depending on the method (separated constituent geometric mean, fractioning methods or experimental measurements), the results of this study are slightly different for the CFs, FFs and EF. However, they lead to relatively similar factors because their geometric means are within the usual model uncertainty range in terms of ecotoxicological impact assessment in LCIA. Compared to the theoretical methods from the literature, experimental measurements aim to take the potential interactions between the co-contaminants in the mixture into account and are therefore supposed to be closer to reality. However, it was shown that these experimental CFs are unreliable because of the analytical limitations in determining pole-treating oil properties. Consequently, it is still difficult to definitely determine the most suitable theoretical calculations to calculate CFs for complex mixtures. However, the methods applied in this paper yield similar

results and, as such, can all be recommended as suitable preliminary approximations of petroleum mixture CFs. The factor minimums and maximums, HBM fractions and refined TPHWG fractions could be applied to characterize a complex petroleum hydrocarbon mixture in an LCA. Even the original TPHWG fractions led to relevant results. This method has the advantage of being the easiest to implement in order to calculate CFs for other petroleum mixtures for which TPHWG fractions are already known. Thus, this relatively simple method seems complete enough to provide a reliable first approximation to account for this type of complex hydrocarbon mixture in LCIA instead of assuming a lack of impact in light of the lack of CFs.

4.2.6 Acknowledgements

The authors acknowledge the financial support of the industrial partners of the International Chair in Life Cycle Assessment (a research unit of CIRAIG): Alcan, Arcelor-Mittal, Bell Canada, Cascades, Éco Entreprises Québec/RECYC-QUÉBEC, Groupe EDF/GDF-SUEZ, Hydro-Québec, Johnson&Johnson, Mouvement des caisses Desjardins, RONA, Total and Veolia Environnement. We thank J. Poulet for helping us to obtain experimental data and D. Sanscartier for sharing his knowledge of existing methods.

4.2.7 References

- ARP, H. P. H., DROGE, S. T. J., ENDO, S., GIGER, W., GOSS, K.-U., HAWTHORNE, S. B., et al. (2010). More of EPA's SPARC Online Calculator—The Need for High-Quality Predictions of Chemical Properties. *Environmental Science & Technology*, 44(12), 4400-4401.
- ASTM. (1995). Standard Guide for Risk-Based Corrective Action Applied at Petroleum Release Sites: E 1739-95. In American Society for Testing and Materials (Ed.). West Conshohocken, PA.
- ASTM. (1997). Standard Method D 5285-92
- ASTM. (2004). Standard Test Method for Measurements of Aqueous Solubility E1148-02. In *Water and Environmental Technology*, (Vol. 11.05, pp. 330-332).

- ASTM INTERNATIONAL STANDARDS WORLDWIDE. Standard Test Method for Vapor Pressure, E1194-07.
- BARE, J. C., PENNINGTON, D. W., & UDO DE HAES, H. A. (1999). Life Cycle Impact Assessment Sophistication. *International Journal Life Cycle Assessment*, 4(5), 299-306.
- BARRA, R. (2007). *Criteria for the selection of persistent toxic substances for the development of the Data Base on Persistent Toxic Substances and Heavy Metals*.
- BULLE, C. (2008). *Modelisation du devenir environnemental d'un melange organique complexe: Influence de l'huile de traitement des poteaux au PCP sur la migration verticale des dioxines et furanes dans les sols* (Ecole Polytechnique, Montreal (Canada), Canada).
<http://proquest.umi.com/pqdwweb?did=1500079851&Fmt=7&clientId=43390&RQT=309&VName=PQD> (UMI No. Ph.D.)
- BULLE, C., BERTRAND, F., SAMSON, R., & DESCHÊNES, L. (2008). Sensitivity study of an OCDD environmental fate screening model in soils in the presence of PCP wood-preserving oil. *Chemosphere*, 73(1, Supplement 1), S149-S157.
- CADOTTE, M., DESCHÊNES, L., & SAMSON, R. (2007). Selection of a Remediation Scenario for a Diesel-Contaminated Site Using LCA. *International Journal Life Cycle Assessment*, 12(4), 239-251.
- CANADIAN COUNCIL OF MINISTERS OF THE ENVIRONMENT. (2000). *Canada-Wide Standards for Petroleum Hydrocarbons (PHCs) in Soil: Scientific Rationale - Supporting Technical Document*.
- CEAEQ. (2001). Méthode d'analyse Dosage des hydrocarbures pétroliers (C10 à C50) dans l'eau. MA 400 – Hyd 1.0.
- DALLÜGE, J., BEENS, J., & BRINKMAN, U. A. T. (2003). Comprehensive two-dimensional gas chromatography: a powerful and versatile analytical tool. *Journal of Chromatography A*, 1000(1-2), 69-108.
- DI TORO, D. M., MCGRATH, J. A., & HANSEN, D. J. (2000). Technical basis for narcotic chemicals and polycyclic aromatic hydrocarbon criteria. I. Water and tissue. *Environmental Toxicology and Chemistry*, 19(8), 1951-1970.

- EDWARDS, D. A., ANDRIOT, M. D., AMORUSO, M. A., TUMMEY, A. C., BEVAN, C. J., TVEIT, A., et al. (1997). *Development of Fraction Specific Reference Doses (RfDs) and Reference Concentration (RfCs) for Total Petroleum Hydrocarbons (TPH)*.
- ESSO. (2003). *Imperial Oil, Material Safety Datasheet*.
- FOSTER, K. L., MACKAY, D., PARKERTON, T. F., WEBSTER, E., & MILFORD, L. (2005). Five-stage environmental exposure assessment strategy for mixtures: Gasoline as a case study. *Environmental Science and Technology*, 39(8), 2711-2718.
- GUSTAFSON, J. B., TELL, J. G., & OREM, D. (1997). *Selection of Representative TPH Fractions Based on Fate and Transport Considerations*.
- HASSETT, J. J., & BANWART, W. L. (1989). The Sorption of Nonpolar Organics by Soils and Sediments. In *Reactions and Movement of Organic Chemicals in Soils*. Madison, USA: Soil Science Society of America and American Society of Agronomy.
- HILAL, S. H., KARICKHOFF, S. W., & CARREIRA, L. A. (2003). *PREDICTION OF CHEMICAL REACTIVITY PARAMETERS AND PHYSICAL PROPERTIES OF ORGANIC COMPOUNDS FROM MOLECULAR STRUCTURE USING SPARC* National Exposure Research Laboratory, Office of Research and Development, U.S. Environmental Protection Agency.
- HILAL, S. H., KARICKHOFF, S. W., & CARREIRA, L. A. (2004). Prediction of the Solubility, Activity Coefficient and Liquid/Liquid Partition Coefficient of Organic Compounds. *QSAR and Combinatorial Science*, 23, 709-720.
- HOWARD, P., MEYLAN, W., ARONSON, D., STEWART, S., PARKERTON, T., & COMBER, M. (2006). *Prediction of Environmental Fate and Transport Properties in Support of the Hydrocarbon Block Approach to Risk Assessment*. Paper presented at the Society of Environmental Toxicology and Chemistry, The Hague, The Netherlands.
- JOLLIET, O., SAADÉ, M., & CRETIAZ, P. (2005). *Analyse du Cycle de Vie, Comprendre et réaliser un écobilan*: Presses Polytechniques et Universitaires Romandes.
- KARICKHOFF, S. W. (1981). Semi-empirical estimation of sorption of hydrophobic pollutants on natural sediments and soils. *Chemosphere*, 10(8), 833-846.

- KARICKHOFF, S. W., BROWN, D. S., & SCOTT, T. A. (1979). Sorption of hydrophobic pollutants on natural sediments. *Water Research*, 13, 241-248.
- KINERSON, R. S. (1987). *Modelling the Fate and Exposure of Complex Mixtures of Chemicals in the Aquatic Environment*.
- KING, D. J., LYNE, R. L., GIRLING, A., PETERSON, D. R., STEPHENSON, R., & SHORT, D. (1996). *environmental risk assessment of petroleum substances: the hydrocarbon block method*. Brussels: CONCAWE Petroleum Products Ecology Group.
- LYMAN, W. J., REEHL, W. F., & ROSENBLATT, D. H. (1990). *Handbook of Chemical Property Estimation Methods: Environmental Behaviour of Organic Compounds*. New-York.
- MACKAY, D., SHIU, W. Y., & MA, K. C. (1992). *Illustrated Handbook of Physical-Chemical Properties and Environmental Fate of Organic Chemicals. Volume 2: PAHs, PCDD/Fs* (Vol. 2): Lewis Publishers.
- MACKAY, D., SHUI, W. Y., & MA, K. C. (1993). *Illustrated Handbook of Physical-Chemical Properties and Environmental Fate for Organic Chemicals* (Vol. I - IV). Chelsea, MI: Lewis Publishers.
- MACLEOD, M., MCKONE, T. E., FOSTER, K. L., MADDALENA, R. L., PARKERTON, T. F., & MACKAY, D. (2004). Applications of contaminant fate and bioaccumulation models in assessing ecological risks of chemicals: A case study for gasoline hydrocarbons. *Environmental Science and Technology*, 38(23), 6225-6233.
- MARPLE, L., BERRIDGE, B., & THROOP, L. (1986). Measurement of the water-octanol partition coefficient of 2,3,7,8-tetrachlorodibenzo-p-dioxin. *Environmental Science & Technology*, 20(4), 397-399.
- MCGRATH, J. A., PARKERTON, T. F., HELLWEGGER, F. L., & DI TORO, D. M. (2005). Validation of the narcosis target lipid model for petroleum products: gasoline as a case study. *Environmental Toxicology and Chemistry*, 24(9), 2382-2394.
- ORGANISATION INTERNATIONALE DE NORMALISATION. (2006). ISO 14040 Management environnemental - Analyse du cycle de vie - Principes et cadre.

- PAYET, J. (2005). Assessing Toxic Impacts on Aquatic Ecosystems in LCA. *The International Journal of Life Cycle Assessment*, 10(5), 373-373.
- REDMAN, A. (2009). *PETROTOX v.3.01 Users Guide*: HydroQual, Inc. for Conservation of Clean Air and Water in Europe, CONCAWE.
- ROSENBAUM, R. K., BACHMANN, T. M., GOLD, L. S., HUIJBREGTS, M. A. J., JOLLIET, O., JURASKE, R., et al. (2008). USEtox—the UNEP-SETAC toxicity model: recommended characterisation factors for human toxicity and freshwater ecotoxicity in life cycle impact assessment. *International Journal Life Cycle Assessment*(13), 532-546.
- SANSCARTIER, D., MARGNI, M., REIMER, K., & ZEEB, B. (2010). Comparison of the Secondary Environmental Impacts of Three Remediation Alternatives for a Diesel-contaminated Site in Northern Canada. *Soil and Sediment Contamination: An International Journal*, 19(3), 338-355.
- SANTÉ CANADA. (2006, 30-03-2006). *Annexe 4 - Division des lieux contaminés: Rapport annuel 2004-2005*. Consulté le 07-2010, tiré de http://www.hc-sc.gc.ca/ewh-semt/pubs/contamsite/04-05-contam_program/annex-annexe-4-fra.php.
- VAN DE MEENT, D., HOLLANDER, A., COMBER, M., & PARKERTON, T. (2009). Environmental Fate Factors and Human Intake Fractions for Risk Assessment of Petroleum Products. *Integrated Environmental Assessment and Management*, 6(1), 135-144.
- VEITH, G. D., & BRODERIUS, S. J. (1990). Rules for Distinguishing Toxicants That cause Type I and Type II Narcosis Syndromes. *Environmental Health Perspectives*, 87, 207-211.
- VENTURA, G. T., KENIG, F., REDDY, C. M., FRYISINGER, G. S., NELSON, R. K., MOOY, B. V., et al. (2008). Analysis of unresolved complex mixtures of hydrocarbons extracted from Late Archean sediments by comprehensive two-dimensional gas chromatography (GC×GC). *Organic Geochemistry*, 39(7), 846-867.

CHAPITRE 5 DÉVELOPPEMENT DE FACTEURS DE SORT (FF) POUR TOUS LES COMPARTIMENTS DE RÉCEPTION

Ce chapitre présente les facteurs de sort (FF) obtenus en plus de ceux présentés dans le Chapitre 4 (pour le compartiment eau douce). En effet, des FF ont été calculés pour chaque compartiment d'émission et de réception soit pour l'air urbain, l'air continental (rural), l'eau de mer, le sol naturel et le sol agricole.

De manière générale, les FF les plus élevés ont été obtenus pour une émission dans le compartiment de réception considéré, par exemple le FF dans l'air urbain pour une émission dans l'air urbain. En effet, le modèle USEtox implique que pour une émission dans un compartiment, les polluants ont tendance à rester en majorité dans ce même compartiment environnemental. Dans les sections suivantes, la description des transferts directs et indirects provient des calculs du modèle USEtox.

Les FF obtenus en utilisant les fractions originelles du TPHWG sortent un peu des plages obtenues par les autres méthodes. Cela peut s'expliquer par le fait que les fractions du TPHWG ne sont pas totalement représentatives du mélange à l'étude dans le présent projet. Cependant, les résultats obtenus pour ces fractions restent proches de ceux des autres méthodes.

5.1 FF dans l'air urbain

Les FF de l'huile de traitement des poteaux de bois (FF_{exp}) dans l'air urbain sont généralement plus élevés que ceux obtenus avec les méthodes théoriques (constituants potentiels, fractions HBM, fraction TPHWG). La Figure 5-1 met en évidence cette supériorité, exceptée pour une émission dans l'air urbain dû aux calculs du modèle USEtox (un polluant émis dans un compartiment x tend à rester dans ce même compartiment x). La pression de vapeur de l'huile de traitement est plus élevée ($1,75 \cdot 10^{+01}$ Pa) que celles des composés potentiels (moyenne géométrique = $5,89 \cdot 10^{-01}$ Pa). Le mélange à l'étude aura donc plus tendance à se volatiliser et à se retrouver dans l'air que les constituants potentiels. Le FF de l'huile est alors sous-estimé par les méthodes théoriques.

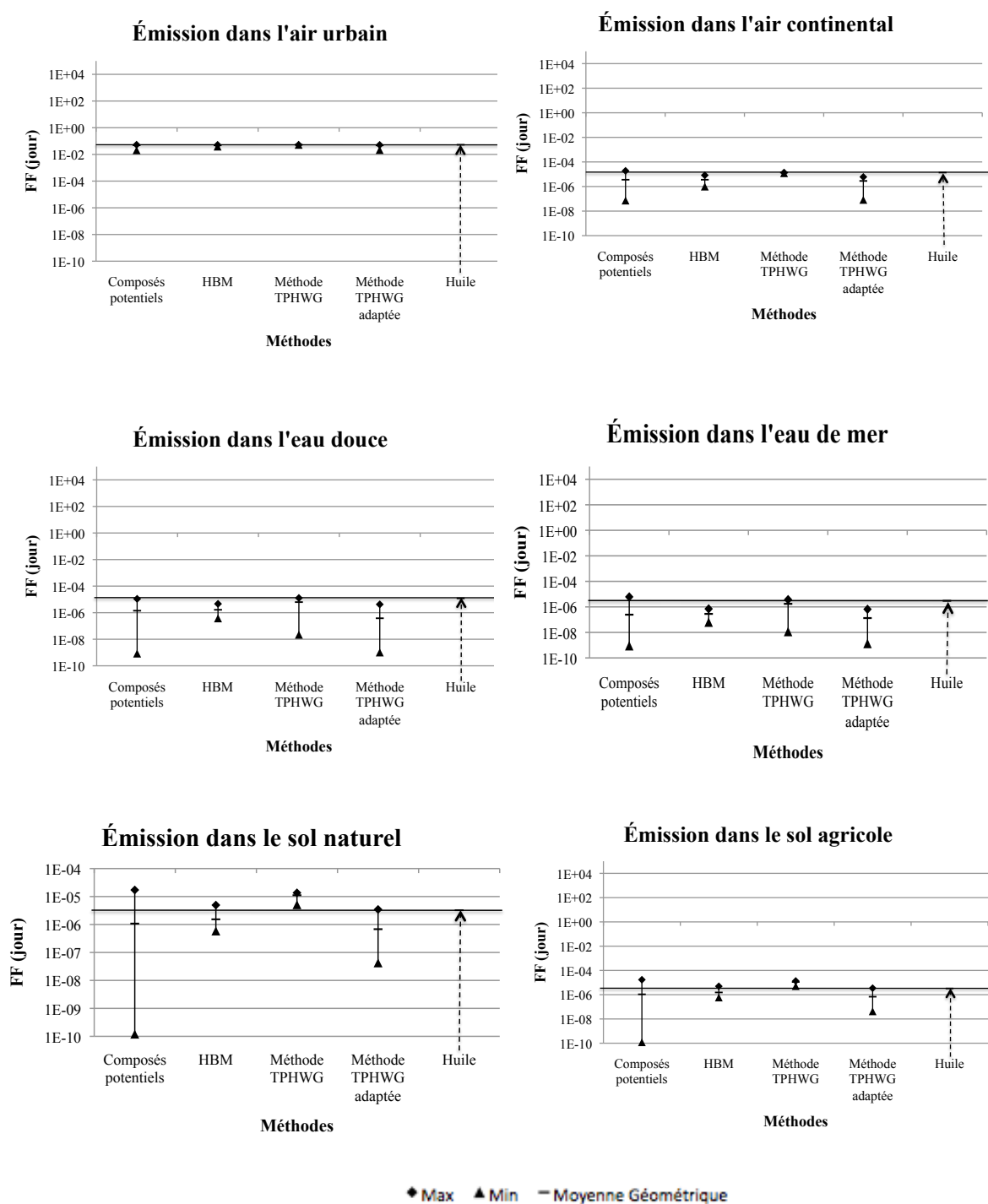


Figure 5-1: Représentation graphique des facteurs de sort (FF) pour le compartiment de réception air urbain

5.2 FF dans l'air continental (rural)

Les mêmes observations que pour la partie 5.1 peuvent être faites (Figure 5-2). Le FF_{exp} est supérieur aux valeurs obtenues par les méthodes théoriques à cause de la supériorité de la pression de vapeur de l'huile. Cependant, les FF dans l'air continental ont de manière générale des valeurs plus élevées que dans l'air urbain. Ce phénomène peut s'expliquer par l'absence de transfert direct de polluants de l'eau douce, l'eau de mer, le sol naturel et le sol agricole vers l'air urbain. Un composé ne peut atteindre l'air urbain que par une émission directe dans ce compartiment ou via l'air continental. De plus, il existe des transferts directs de chacun des compartiments d'émission vers l'air continental en plus des transferts indirects.

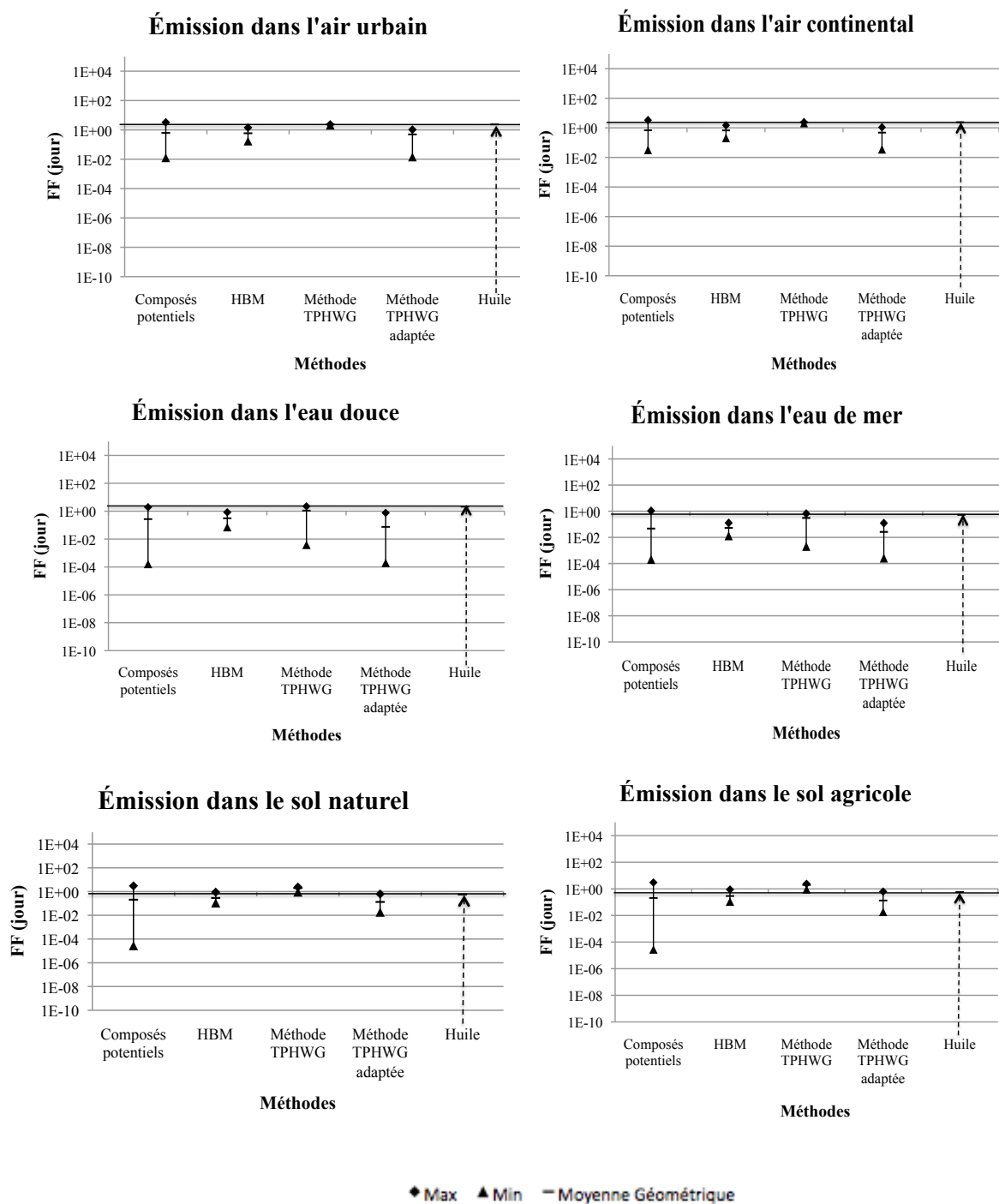


Figure 5-2: Représentation graphique des facteurs de sort (FF) pour le compartiment de réception air continental

5.3 FF dans l'eau de mer

Les FF_{exp} dans l'eau de mer sont supérieurs à ceux des méthodes théoriques (Figure 5-3). La solubilité aqueuse de l'huile ($1,43.10^{+01}$ mg/L) est significativement supérieure à celle des composés potentiels (moyenne géométrique = $2,7.10^{-02}$ mg/L). L'huile a donc une plus forte tendance à se retrouver dans l'eau que les constituants potentiels ou les fractions utilisées. De plus, la constante de Henry de l'huile de traitement est plus faible ($2,56.10^{+02}$ Pa.m³/mol) que celles des constituants supposés de l'huile (moyenne géométrique = $1,58.10^{+04}$ Pa.m³/mol) et il n'existe pas de transfert direct de l'eau vers le sol. Cela renforce alors le fait que le mélange étudié se retrouve plus dans le compartiment eau.

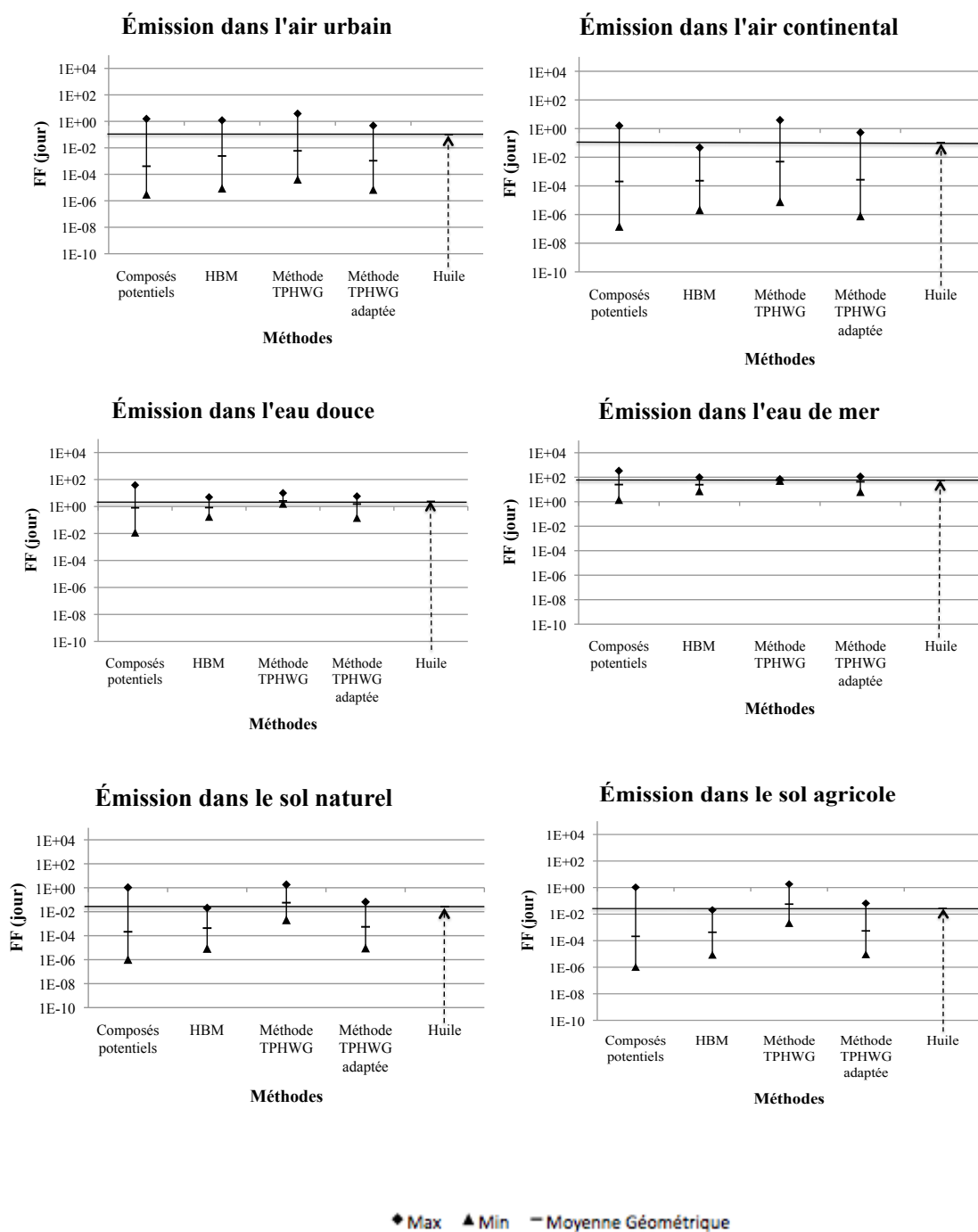


Figure 5-3: Représentation graphique des facteurs de sort (FF) pour le compartiment de réception eau de mer

5.4 FF dans le sol naturel et le sol agricole

Les FF_{exp} sont encore une fois supérieurs à ceux obtenus par les méthodes théoriques (Figure 5-4). Les coefficients d'adsorption sur la matière organique et de partition octanol-eau de l'huile ($K_{oc,huile} = 3,42.10^{+04}$ L/kg, $K_{ow,huile} = 8,32.10^{+04}$) et des constituants potentiels (moyenne géométrique $K_{oc,composés\ potentiels} = 8,37.10^{+04}$ L/kg, moyenne géométrique $K_{ow,composé\ potentiels} = 1,12.10^{+05}$) ont des valeurs très proches. Ensuite, il n'existe aucuns transferts directs de l'eau, de l'air urbain et du sol agricole vers le sol naturel. Les contaminants ne peuvent atteindre le compartiment sol naturel que par l'intermédiaire de l'air continental et donc par déposition. Or, la pression de vapeur de l'huile est plus élevée ($1,75.10^{+01}$ Pa) que celle de ses composés potentiels (moyenne géométrique = $5,89.10^{-01}$ Pa). L'huile se retrouvera donc plus dans le sol naturel, ce qui entraîne un sort supérieur à celui des composés seuls.

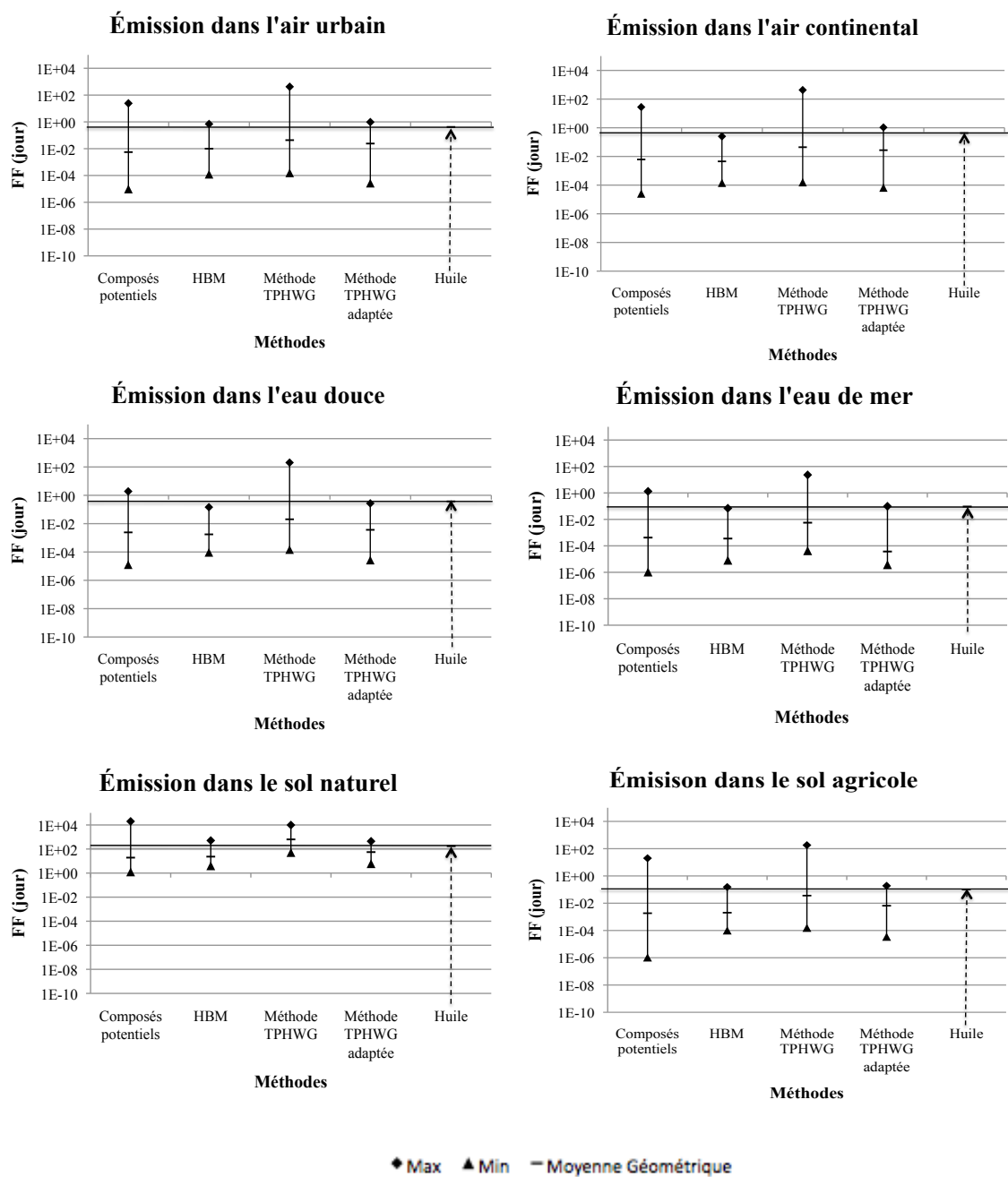


Figure 5-4: Représentation graphique des facteurs de sort (FF) pour le compartiment de réception sol naturel

Les observations et explications pour le sol agricole sont les mêmes que pour le sol naturel (Figure 5-5).

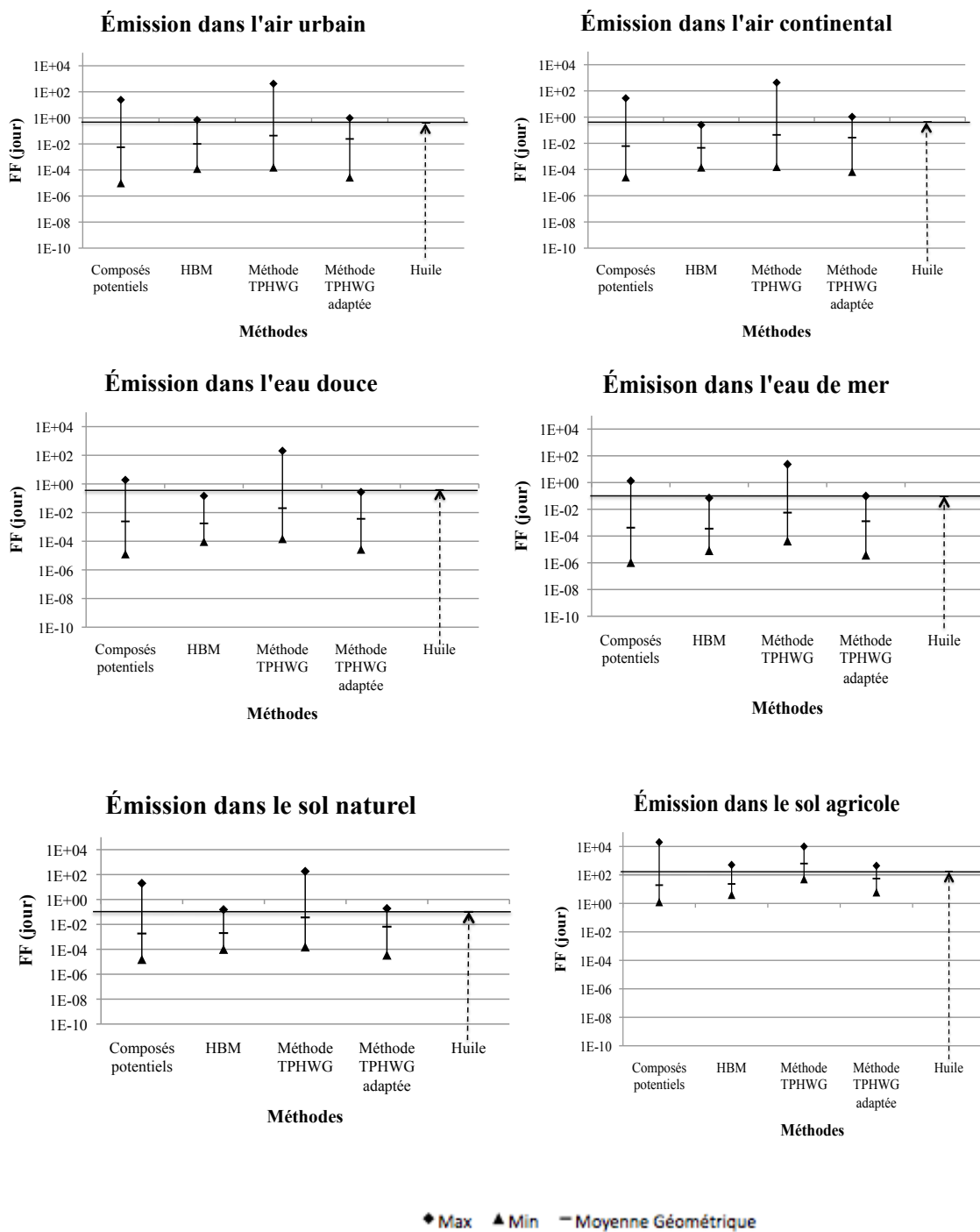


Figure 5-5: Représentation graphique des facteurs de sort (FF) pour le compartiment de réception sol agricole

De manière générale, le FF de l'huile de traitement des poteaux est légèrement sous-estimé par les méthodes théoriques ($FF_{\text{exp}} > FF_{\text{théoriques}}$). De plus, les fractions originelles du TPHWG conduisent à quelques facteurs sortant de la plage des FF des constituants potentiels et des autres fractions mises en place. Cependant, chacune des méthodes issues de la littérature permet d'obtenir des FF raisonnables comparativement aux facteurs expérimentaux.

CHAPITRE 6 DISCUSSION GÉNÉRALE

Ce chapitre a pour but de préciser et compléter les points de discussion abordés dans le Chapitre 4 pour les résultats obtenus. Les points forts et les points faibles des méthodes et choix mis en place sont alors discutés tout en proposant des améliorations possibles. L'objectif de développer des FC pour l'huile de traitement des poteaux a bien été rempli. Les méthodes de la littérature (composés potentiels, méthodes HBM et TPHWG) permettent de fournir des FF et des FC tout à fait corrects pour une utilisation en ACV. Les calculs réalisés présentent tout de même des points critiquables. Ils ont été établis selon différentes étapes (Chapitre 3), au cours desquelles des choix et des considérations ont été faits. Ces phases sont discutées dans la suite de cette section.

6.1 Détermination des constituants potentiels

La base de données CONCAWE permet de déterminer une composition potentielle du mélange à l'étude à partir de ses caractéristiques et propriétés physico-chimiques, comme la température d'ébullition, sans effectuer d'analyses en laboratoire. Cependant, la composition réelle de l'huile de traitement peut contenir plus ou moins de constituants que les 677 utilisés dans ce projet. De plus, les proportions de chacun des composés au sein du mélange ne sont pas connues. La distribution des constituants au sein de l'huile n'a donc pas été utilisée. En effet, le manque de données lié aux mélanges complexes ne permet pas d'utiliser leur composition réelle lors d'une ACV. Ces lacunes peuvent s'expliquer, d'une part, par la complexité des analyses expérimentales et leur rare utilisation à ce jour (Dallüge, *et al.*, 2003; Ventura, *et al.*, 2008) et, d'autre part, par la variabilité des mélanges d'un échantillon à un autre (Potter & Simmons, 1998; van de Meent, *et al.*, 2009; Weisman, 1998). La composition d'un mélange est très variable, il n'aurait alors pas été très pertinent d'appliquer ces proportions. Cependant, dans le futur, elles pourraient être appliquées pour vérifier la validité des résultats obtenus. Cela constituerait une analyse de sensibilité supplémentaire afin de déterminer si la connaissance des proportions des constituants du mélange changerait les résultats obtenus.

Malgré les points faibles mis en évidence, il est souvent nécessaire de connaître la composition d'un mélange afin de réaliser un fractionnement de ses composés pour leur étude (Foster, *et al.*, 2005). Cependant, cela peut ne pas être le cas lorsque les fractions originelles du TPHWG sont utilisées, par exemple.

Enfin, un mélange dont la composition était inconnue a été choisi afin de réaliser ce projet de recherche. Cette décision a été prise car dans la réalité lors de l'étude de mélanges d'hydrocarbures, la composition du produit est rarement connue. De plus, il n'a pas été trouvé dans la littérature de mélange de polluants rencontré dans des cas de contamination réelle et dont la composition était connue et donnée. Il fallait donc réussir à réaliser ces travaux en étant confronté à cette problématique ainsi qu'au manque de données associé. Cependant, il pourrait être intéressant d'utiliser un mélange constitué en laboratoire dont chaque composé est ajouté en quantité connue afin de déterminer l'influence de la connaissance des constituants et de leur distribution sur les résultats finaux.

6.2 Définition des fractions

La définition de fractions permet de prendre en compte le comportement des contaminants présents dans un mélange organique complexe, au lieu de ne considérer que certaines substances dites les plus représentatives ou correspondant aux facteurs minimum et maximum (Cadotte, *et al.*, 2007; Sanscartier, *et al.*, 2010). En effet, la définition de groupements nécessite les propriétés des composés à l'étude, qui sont ensuite utilisées pour les calculs. Ces derniers sont par ailleurs simplifiés par l'utilisation de fractions. En effet, le regroupement de contaminants qui possèdent des caractéristiques similaires permet de réduire la complexité et la quantité de calculs à effectuer (677 à 18 dans le cas de ce projet). De plus, la mise en place de fractions permettent d'éviter une analyse précise du mélange, des plages d'ECN ou de température d'ébullition peuvent être suffisantes.

Les méthodes de fractionnement présentent, cependant, des points faibles tant d'un point de vue général qu'au sein de ce projet de recherche. Dans un premier temps, même si le comportement de chacun des constituants est pris en compte, les interactions pouvant exister entre contaminants ne sont pas représentées dans ces calculs théoriques. Ensuite, les fractions définies selon la méthode du TPHWG peuvent être critiquables. En effet, les fractions originelles du TPHWG ne sont pas complètement représentatives de l'huile à poteaux, car elles considèrent des composés qui peuvent ne pas être présents dans le mélange étudié. De plus, les constituants potentiels qui avaient une valeur de LF rapprochée, à l'intérieur de deux ordres de grandeurs, étaient regroupés alors que la méthode du TPHWG préconisait de les regrouper selon des valeurs de LF rapprochées à un ordre de grandeur près (Gustafson, *et al.*, 1997). Les nuages de point tracés, qui

peuvent être observés sur la figure obtenue (Figure 3-1) pour ce projet, ne permettraient pas d'appliquer ce critère, il a donc été adapté.

Enfin, des fractions expérimentales pourraient être développées afin d'améliorer les faiblesses précédemment soulevées.

6.3 Calcul des propriétés

Le calcul des propriétés nécessaires au calcul des FC présente également des forces et des faiblesses.

Tout d'abord, les mesures expérimentales de certaines propriétés physico-chimiques de l'huile de traitement de poteaux prennent en compte les interactions pouvant exister au sein du mélange. Cela permet alors de combler les lacunes quant à la considération des influences entre co-contaminants. En revanche, les méthodes ASTM peuvent induire un biais dans les résultats, car elles ont été développées pour des mesures sur des substances seules et non pas en présence d'autres composés. La mesure de la solubilité aqueuse est, notamment, représentative des constituants de l'huile de traitement les plus solubles, qui vont se retrouver préférentiellement dans l'eau. Une mesure plus adaptée aux mélanges rendrait les résultats plus robustes et encore plus représentatifs de la réalité. Le même raisonnement peut être appliqué à la pression de vapeur. Ensuite, certaines propriétés utilisées pour les facteurs expérimentaux ne sont pas représentatives du mélange : la masse molaire (MW) et les constantes de biodégradation (kdeg) dans l'air, l'eau et les sédiments. En effet, la MW est la moyenne de celles des constituants potentiels du mélange et les kdeg dans l'air, l'eau et les sédiments sont des valeurs par défaut du modèle USEtox. Une mesure expérimentale de ces paramètres pourrait alors améliorer les facteurs déterminés dans cette étude et les rendre plus pertinents.

Ensuite, un des avantages des propriétés physico-chimiques utilisées dans ce projet est qu'elles permettent d'évaluer les FF et FC sans effectuer la mesure expérimentale des onze propriétés nécessaires pour les 677 constituants potentiels. Cela serait effectivement très long et coûteux. Néanmoins certaines propriétés, qui ont été déterminées à partir de la littérature, sont critiquables. Les données de toxicité ont été calculées avec le K_{ow} . Or, celui-ci a dû être de nouveau calculé pour les constituants potentiels au cours de ces travaux de recherche. Les valeurs obtenues sont certes plus réalistes que celles de la base de données CONCAWE, mais elles ne sont pas

totallement robustes. Dans tous les cas, une mesure expérimentale directement de la toxicité, au moins pour l'huile de traitement des poteaux, améliorerait la fiabilité des résultats comparativement aux corrélations théoriques. D'autres données présentant des faiblesses sont les constantes de dégradation dans l'air, l'eau et les sédiments. En effet, celles-ci sont des valeurs par défaut prises dans le modèle USEtox. Elles sont calculées par le modèle lorsqu'elles ne sont pas fournies en entrée. Les valeurs utilisées permettent tout de même de combler le manque de données existant.

L'hypothèse faite quant au mode d'action toxique qui est commun à tous les hydrocarbures (la narcose) est aussi à nuancer. En effet, tel que mentionné dans l'article (Chapitre 4), certains hydrocarbures comme les HAP et le benzène cumulent plusieurs effets, cancérigènes (USEPA, 2008), en plus de la narcose. Cela pourrait alors influencer sur les fractions définies et les calculs effectués.

Enfin, le développement des corrélations pour le calcul des propriétés selon la méthode du TPHWG permet d'éviter de tout recalculer si les fractions sont modifiées (Gustafson, *et al.*, 1997). Cependant, certaines corrélations mises en place sont mauvaises ($R^2 < 0,5$ par exemple). Des fractions plus fines pourraient être développées en utilisant les propriétés des constituants. Des groupes de composés se détachent effectivement bien (droites de points) sur les graphiques des différentes propriétés en fonction des ECN (annexe 1). Les corrélations seraient alors meilleures.

6.4 Calculs des FC et FF

Les résultats obtenus montrent que les fractions développées permettent de réduire la variabilité des FC (Figure 4-5 et annex 8) mais aussi des FF obtenus (

Figure 4-3 et annex 7, Figure 5-1, Figure 5-2, Figure 5-3, Figure 5-4, Figure 5-5). Toutefois, les facteurs trouvés par chacune des méthodes théoriques varient de plusieurs ordres de grandeurs entre le minimum et le maximum. De plus, tel que dit précédemment, les proportions de chacun des constituants ou chacune des fractions ne sont pas connues. Le calcul des FF, EF et FC n'est alors pas pondéré en fonction de la fréquence d'apparition des différents constituants au sein du mélange. Cependant, la différence entre les FC théoriques et expérimentaux reste en moyenne de deux ordres de grandeurs, ce qui ne représente pas une différence significative par rapport à la

grande variation des FC (environ 12 ordres de grandeurs) des composés organiques qui peuvent être retrouvés dans les ACV (Rosenbaum, *et al.*, 2008).

Des FF ont été développés pour tous les compartiments de réception et d'émission. Des FC pour les mélanges organiques complexes pourraient alors être développés pour les autres catégories d'impact comme l'écotoxicité terrestre lorsque les données de toxicité pour le calcul du EF seront disponibles. Toutefois, les calculs effectués par le modèle USEtox présentent des limites. Certains coefficients de transfert entre compartiments environnementaux, tel que celui de l'eau vers le sol, sont nuls. De plus, l'eau de mer est modélisée comme un évier, ce qui n'est pas totalement représentatif de la réalité.

Un dernier aspect à noter est que les FC sont ici calculés pour un mélange donné à un temps donné. Or, les mélanges d'hydrocarbures changent dans le temps et dans l'espace. Les constantes de biodégradation prennent en compte la dégradation des contaminants au cours du temps, mais d'autres phénomènes, tels que la dégradation d'un composé en sous-composés, ne sont pas pris en compte. Il pourrait alors être intéressant de considérer cette variabilité et de voir à quel point cela influencerait sur les résultats.

CHAPITRE 7 CONCLUSION ET RECOMMANDATIONS

Les travaux de recherche de ce projet fournissent des résultats importants pour l'évaluation des impacts des mélanges complexes d'hydrocarbures sur les écosystèmes aquatiques. En effet, ce type de contaminant n'est pas caractérisé en ACV lorsqu'il est question d'évaluer les dommages pouvant être causés aux écosystèmes suite à un déversement pétrolier ou encore pour comparer des méthodes de réhabilitation de sols contaminés.

L'objectif principal de ce projet a permis d'obtenir des facteurs de caractérisation (FC) pour évaluer les impacts potentiels sur les écosystèmes aquatiques des mélanges pétroliers, dont les constituants, qui sont les hydrocarbures, possèdent un mode d'action toxique commun. Des facteurs de sort (FF) ont également été obtenus pour différents compartiments environnementaux. Les sous-objectifs ont permis de développer et de confronter des facteurs expérimentaux, qui prennent en compte les interactions potentielles du mélange, et des facteurs théoriques déterminés à partir de méthodes de la littérature. Il a alors été montré que les facteurs (FF, FC) calculés de manière théorique conduisent à des résultats assez similaires aux facteurs issus de mesures expérimentales. Les méthodes théoriques appliquées peuvent donc être utilisées dans le contexte de l'ACV afin de définir des FC pour des mélanges complexes d'hydrocarbures. L'objectif principal et les sous-objectifs sont alors remplis et l'hypothèse de recherche validée. Le type de contaminant étudié dans ce projet peut alors à présent être caractérisé pour la catégorie *écotoxicité aquatique* lors des études ACV incluant une émission de mélange d'hydrocarbure dans l'environnement.

La réalisation de ces travaux amène des recommandations quant à la prise en compte des mélanges complexes d'hydrocarbures en ACV. Les méthodes (HBM, TPHWG) utilisées dans le cadre de ce projet devraient être utilisées afin de développer des FC pour les mélanges pétroliers et les intégrer dans les études ACV. Les impacts potentiels de ces polluants seraient alors évalués au lieu de ne pas être considérés ou mal représentés. Ensuite, l'amélioration des mesures expérimentales (solubilité aqueuse) et la mesure de propriétés supplémentaires (EC_{50}) permettraient d'obtenir de meilleurs résultats et certainement de valider définitivement les approches présentées dans ce projet de recherche. Enfin, il faudra ensuite étudier les cas des mélanges organiques complexes dont les constituants se comportent de manière totalement différente dans l'environnement. Par exemple, l'huile de traitement de poteau au

pentachlorophénol (PCP), les dioxines et furannes contenues dans le PCP ont des comportements environnementaux différents des hydrocarbures et leur devenir environnemental est modifié par la présence de ces hydrocarbures. Il faudra alors prendre en compte et modéliser ces phénomènes pour développer une autre approche pour le calcul de FC pour cet autre type de mélange complexe.

RÉFÉRENCES

- ARP, H. P. H., DROGE, S. T. J., ENDO, S., GIGER, W., GOSS, K.-U., HAWTHORNE, S. B., et al. (2010). More of EPA's SPARC Online Calculator—The Need for High-Quality Predictions of Chemical Properties. *Environmental Science & Technology*, 44(12), 4400-4401.
- BARE, J. C., PENNINGTON, D. W., & UDO DE HAES, H. A. (1999). Life Cycle Impact Assessment Sophistication. *International Journal Life Cycle Assessment*, 4(5), 299-306.
- BARRA, R. (2007). *Criteria for the selection of persistent toxic substances for the development of the Data Base on Persistent Toxic Substances and Heavy Metals*.
- BÉLORGEOT, C. (2010). *Pétrole - Encyclopédie Universalis*. Consulté le 2 Juillet 2010, tiré de <http://www.universalis.fr/encyclopedie/petrole/>.
- BRIZIO, E., & GENON, G. (2005). The influence of different mixing heights on the ECOSENSE model results at a local scale. *Environmental Modelling & Software*, 20(7), 917-933.
- BULLE, C. (2008). *Modélisation du devenir environnemental d'un mélange organique complexe: Influence de l'huile de traitement des poteaux au PCP sur la migration verticale des dioxines et furanes dans les sols* (Ecole Polytechnique, Montreal (Canada), Canada). <http://proquest.umi.com/pqdweb?did=1500079851&Fmt=7&clientId=43390&RQT=309&VName=PQD> (UMI No. Ph.D.)
- BULLE, C., BERTRAND, F., SAMSON, R., & DESCHÊNES, L. (2008). Sensitivity study of an OCDD environmental fate screening model in soils in the presence of PCP wood-preserving oil. *Chemosphere*, 73(1, Supplement 1), S149-S157.
- CADOTTE, M. (2005). *Etude des impacts environnementaux primaires et secondaires lors de la remédiation des sols contaminés en utilisant une analyse de cycle de vie* (Msc.A., Ecole Polytechnique de Montréal, Université de Montréal, Montréal). (UMI No. Maîtrise ès sciences appliqués)
- CADOTTE, M., DESCHÊNES, L., & SAMSON, R. (2007). Selection of a Remediation Scenario for a Diesel-Contaminated Site Using LCA. *International Journal Life Cycle Assessment*, 12(4), 239-251.

- CANADIAN COUNCIL OF MINISTERS OF THE ENVIRONMENT. (2000). *Canada-Wide Standards for Petroleum Hydrocarbons (PHCs) in Soil: Scientific Rationale - Supporting Technical Document*.
- CONCAWE. (2007). *PETROTOX User's Guide, User Defined Model, Version 2.01, PETROTOX-UDM_ver2.01.xls*.
- DALLÜGE, J., BEENS, J., & BRINKMAN, U. A. T. (2003). Comprehensive two-dimensional gas chromatography: a powerful and versatile analytical tool. *Journal of Chromatography A*, 1000(1-2), 69-108.
- DE KONING, A., GUINÉE, J., PENNINGTON, D., SLEESWIJK, A., HAUSCHILD, M., MOLANDER, S., et al. (2002). *Methods and typology report Part A: Inventory and classification of LCA characterisation methods for assessing toxic releases*.
- DI TORO, D. M., MCGRATH, J. A., & HANSEN, D. J. (2000). Technical basis for narcotic chemicals and polycyclic aromatic hydrocarbon criteria. I. Water and tissue. *Environmental Toxicology and Chemistry*, 19(8), 1951–1970.
- DOHRMAN, P. *Definition of infinite dilution* Consulté le 23 Juillet 2010, tiré de http://www.ehow.com/about_5459313_definition-infinite-dilution.html.
- DREYER, L., NIEMANN, A., & HAUSCHILD, M. (2003). Comparison of Three Different LCIA Methods: EDIP97, CML2001 and Eco-indicator 99. *The International Journal of Life Cycle Assessment*, 8(4), 191-200.
- DUMAS, A. (2010). *Marée noire dans le Golfe du Mexique: efficacité et impact sur l'environnement des dispersants - notre-planète.info*. Consulté le 25 octobre 2010, tiré de http://www.notre-planete.info/actualites/actu_2437_maree_noire_dispersants.php.
- ECKERT, E., & VANEK, T. (2005). New approach to the characterisation of petroleum mixtures used in the modelling of separation processes. *Computers & Chemical Engineering*, 30(2), 343-356.
- EDWARD, J. T. (1998). Calculation of octanol-water partition coefficients of organic solutes from their molecular volumes. *Canadian Journal of Chemistry*, 76(9), 1294–1303.
- ENBRIDGE. (2007). *Fiche technique pour le gaz naturel*.

- ESSO. (2003a). *Fiche technique, Huile Impérial de conservation des poteaux, huile de procédé.*
- ESSO. (2003b). *Imperial Oil, Material Safety Datasheet.*
- FINNVEDEN, G. (1997). Valuation methods within LCA - Where are the values? . *The International Journal of Life Cycle Assessment*, 2(3), 163-169.
- FINNVEDEN, G., HOFSTETTER, P., BARE, J. C., BASSON, L., CIROTH, A., METTIER, T., et al. (2002). Normalisation, Grouping, and weighting in Life-Cycle Assessment. In H. A. Udo de Haes, G. Finnveden, M. Goedkoop, M. Hauschild, E. G. Hertwich, P. Hofstetter, O. Jolliet, W. Klöpffer, W. Krewitt, E. Lindeijer, R. Müller-Wenk, S. I. Olsen, D. W. Pennington, J. Potting & B. Steen, (Éds.), *Life-Cycle Impact Assessment: Striving Towards Best Practice*: Society of Environmental Toxicology and Chemistry (SETAC).
- FOSTER, K. L., MACKAY, D., PARKERTON, T. F., WEBSTER, E., & MILFORD, L. (2005). Five-stage environmental exposure assessment strategy for mixtures: Gasoline as a case study. *Environmental Science and Technology*, 39(8), 2711-2718.
- FRYSINGER, G. S., & GAINES, R. B. (2001). Separation and identification of petroleum biomarkers by comprehensive two-dimensional gas chromatography. *Journal of Separation Science*, 24(2), 87-96.
- FRYSINGER, G. S., GAINES, R. B., XU, L., & REDDY, C. M. (2003). Resolving the Unresolved Complex Mixture in Petroleum-Contaminated Sediments. *Environmental Science & Technology*, 37(8), 1653-1662.
- GOUGH, M. A., & ROWLAND, S. J. (1990). Characterization of Unresolved Complex Mixtures of Hydrocarbons in Petroleum. *Nature*, 344(6267), 648-650.
- GOUVERNEMENT DU CANADA. (1990). *Canadian Environmental Protection Act; Priority Substances List Assessment Report n°1: Polychlorinated Dibenzodioxins and Polychlorinated Dibenzofurans*: Ministers of Environment and of National Health and Welfare.
- GUSTAFSON, J. B., TELL, J. G., & OREM, D. (1997). *Selection of Representative TPH Fractions Based on Fate and Transport Considerations.*

- HASSETT, J. J., & BANWART, W. L. (1989). The Sorption of Nonpolar Organics by Soils and Sediments. In *Reactions and Movement of Organic Chemicals in Soils*. Madison, USA: Soil Science Society of America and American Society of Agronomy.
- HAUSCHILD, M., BACHMANN, T. M., HUIJBREGTS, M., JOLLIET, O., KÖLHER, A., LARSEN, H. F., et al. (2007). *International consensus model for comparative assessment of chemical emissions in LCA* Paper presented at the SETAC Europe, Porto, Portugal.
- HAUSCHILD, M., & PENNINGTON, D. W. (2002). Indicators for Ecotoxicity in Life-Cycle Impact Assessment. In H. A. Udo de Haes, G. Finnveden, M. Goedkoop, M. Hauschild, E. G. Hertwich, P. Hofstetter, O. Jolliet, W. Klöpffer, W. Krewitt, E. Lindeijer, R. Müller-Wenk, S. I. Olsen, D. W. Pennington, J. Potting & B. Steen, (Éds.), *Life-Cycle Impact Assessment: Striving Towards Best Practice*: Society of Environmental Toxicology and Chemistry (SETAC).
- HAUSCHILD, M. Z., HUIJBREGTS, M., JOLLIET, O., MACLEOD, M., MARGNI, M., VAN DE MEENT, D., et al. (2008). Building a Model Based on Scientific Consensus for Life Cycle Impact Assessment of Chemicals: The Search for Harmony and Parsimony. *Environmental Science & Technology*, 42(19), 7032-7037.
- HEIJUNGS, R., GUINÉE, J. B., HUPPES, G., LANKREIJER, R. M., UDO DE HAES, H. A., & SLEESWIJK, A. W. (1992). *ENVIRONMENTAL LIFE CYCLE ASSESSMENT OF PRODUCTS, Guide - October 1992*.
- HERTWICH, E. G., JOLLIET, O., PENNINGTON, D. W., HAUSCHILD, M., SCHULZE, C., KREWITT, W., et al. (2002). Fate and exposure assessment in the life-cycle impact assessment of toxic chemicals. In H. A. Udo de Haes, G. Finnveden, M. Goedkoop, M. Hauschild, E. G. Hertwich, P. Hofstetter, O. Jolliet, W. Klöpffer, W. Krewitt, E. Lindeijer, R. Müller-Wenk, S. I. Olsen, D. W. Pennington, J. Potting & B. Steen, (Éds.), *Life-Cycle Impact Assessment: Striving Towards Best Practice*: Society of Environmental Toxicology and Chemistry (SETAC).
- HILAL, S. H., KARICKHOFF, S. W., & CARREIRA, L. A. (2003). *PREDICTION OF CHEMICAL REACTIVITY PARAMETERS AND PHYSICAL PROPERTIES OF ORGANIC COMPOUNDS FROM MOLECULAR STRUCTURE USING SPARC* National

- Exposure Research Laboratory, Office of Research and Development, U.S. Environmental Protection Agency.
- HILAL, S. H., KARICKHOFF, S. W., & CARREIRA, L. A. (2004). Prediction of the Solubility, Activity Coefficient and Liquid/Liquid Partition Coefficient of Organic Compounds. *QSAR and Combinatorial Science*, 23, 709-720.
- HILAL, S. H., SARAVANARAJ, A. N., WHITESIDE, T., & CARREIRA, L. A. (2007). Calculating physical properties of organic compounds for environmental modeling from molecular structure. *Journal of Computer-Aided Molecular Design*, 21, 693-708.
- HOWARD, P., MEYLAN, W., ARONSON, D., STEWART, S., PARKERTON, T., & COMBER, M. (2006). *Prediction of Environmental Fate and Transport Properties in Support of the Hydrocarbon Block Approach to Risk Assessment*. Paper presented at the Society of Environmental Toxicology and Chemistry, The Hague, The Netherlands.
- HUIJBREGTS, M., HAUSCHILD, M., JOLLIET, O., MARGNI, M., MCKONE, T., ROSENBAUM, R. K., et al. (2010). *USEtox™ User manual*
- HUIJBREGTS, M. A. J., STRUIJS, J., GOEDKOOP, M., HEIJUNGS, R., JAN HENDRIKS, A., & VAN DE MEENT, D. (2005). Human population intake fractions and environmental fate factors of toxic pollutants in life cycle impact assessment. *Chemosphere*, 61(10), 1495-1504.
- HUIJBREGTS, M. A. J., THISSEN, U., GUINÉE, J. B., JAGER, T., KALF, D., VAN DE MEENT, D., et al. (2000). Priority assessment of toxic substances in life cycle assessment. Part I: Calculation of toxicity potentials for 181 substances with the nested multi-media fate, exposure and effects model USES-LCA. *Chemosphere*, 41(4), 541-573.
- ISO. (2006a). ISO 14040 Management environnemental - Analyse du cycle de vie - Principes et cadre.
- ISO. (2006b). ISO 14044 Management environnemental - Analyse du cycle de vie - Exigences et lignes directrices.
- JOLLIET, O., MARGNI, M., CHARLES, R., HUMBERT, S., PAYET, J., REBITZER, G., et al. (2003). IMPACT 2002+: A New Life Cycle Impact Assessment Methodology. *International Journal Life Cycle Assessment*, 8(6), 324-330.

- JOLLIET, O., SAADÉ, M., & CRETAAZ, P. (2005). *Analyse du Cycle de Vie, Comprendre et réaliser un écobilan*: Presses Polytechniques et Universitaires Romandes.
- KARICKHOFF, S. W. (1981). Semi-empirical estimation of sorption of hydrophobic pollutants on natural sediments and soils. *Chemosphere*, 10(8), 833-846.
- KARICKHOFF, S. W., BROWN, D. S., & SCOTT, T. A. (1979). Sorption of hydrophobic pollutants on natural sediments. *Water Research*, 13, 241-248.
- KINERSON, R. S. (1987). *Modelling the Fate and Exposure of Complex Mixtures of Chemicals in the Aquatic Environment*.
- KING, D. J., LYNE, R. L., GIRLING, A., PETERSON, D. R., STEPHENSON, R., & SHORT, D. (1996). *environmental risk assessment of petroleum substances: the hydrocarbon block method*. Brussels: CONCAWE Petroleum Products Ecology Group.
- KORTENKAMP, A., BACKHAUS, T., & FAUST, M. (2009). *State of the Art Report on Mixture Toxicity - Final report*.
- KUHN, A., FANTKE, P., KLOTZ, V., NITTER, S., & FRIEDRICH, R. (2007). *Complex problems - simple models? An integrated and flexible modelling approach to address human health and environmental impacts of anthropogenic emissions*. Paper presented at the MODSIM 2007, Christchurch.
- LIU, Z., & PHILLIPS, J. B. (1991). Comprehensive two-dimensional gas chromatography using an on-column thermal modulator interface. *Journal of Chromatographic Science*, 29(Compendex), 227-231.
- MACLEOD, M., MCKONE, T. E., FOSTER, K. L., MADDALENA, R. L., PARKERTON, T. F., & MACKAY, D. (2004). Applications of contaminant fate and bioaccumulation models in assessing ecological risks of chemicals: A case study for gasoline hydrocarbons. *Environmental Science and Technology*, 38(23), 6225-6233.
- MACLEOD, M., WOODFINE, D., MACKAY, D., MCKONE, T., BENNETT, D., & MADDALENA, R. (2001). BETR North America: A regionally segmented multimedia contaminant fate model for North America. *Environmental Science and Pollution Research*, 8(3), 156-163.

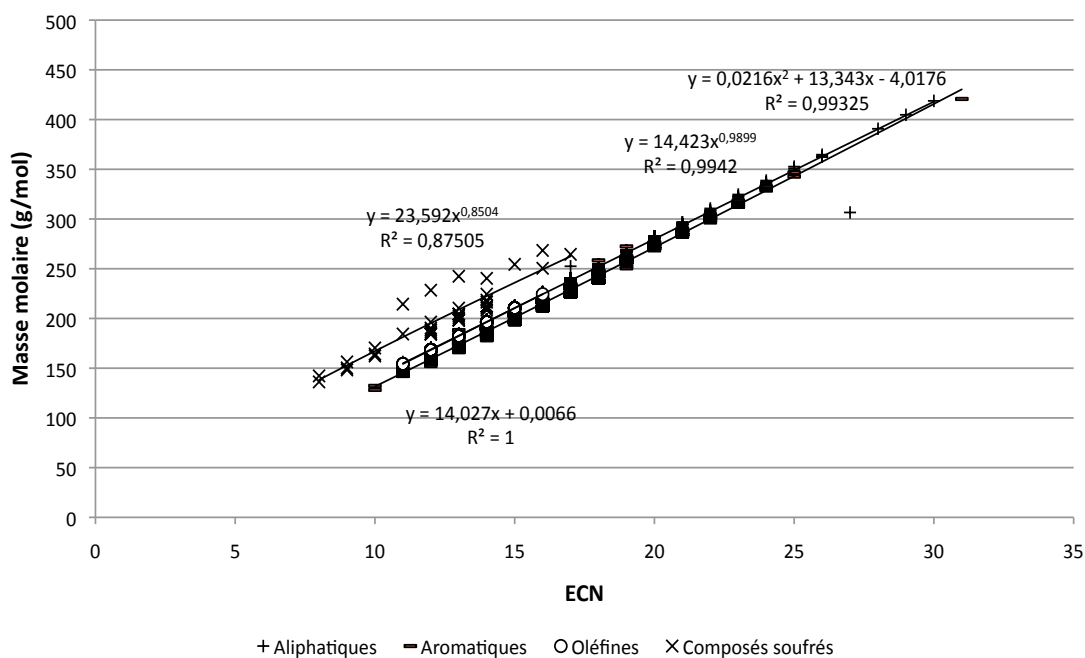
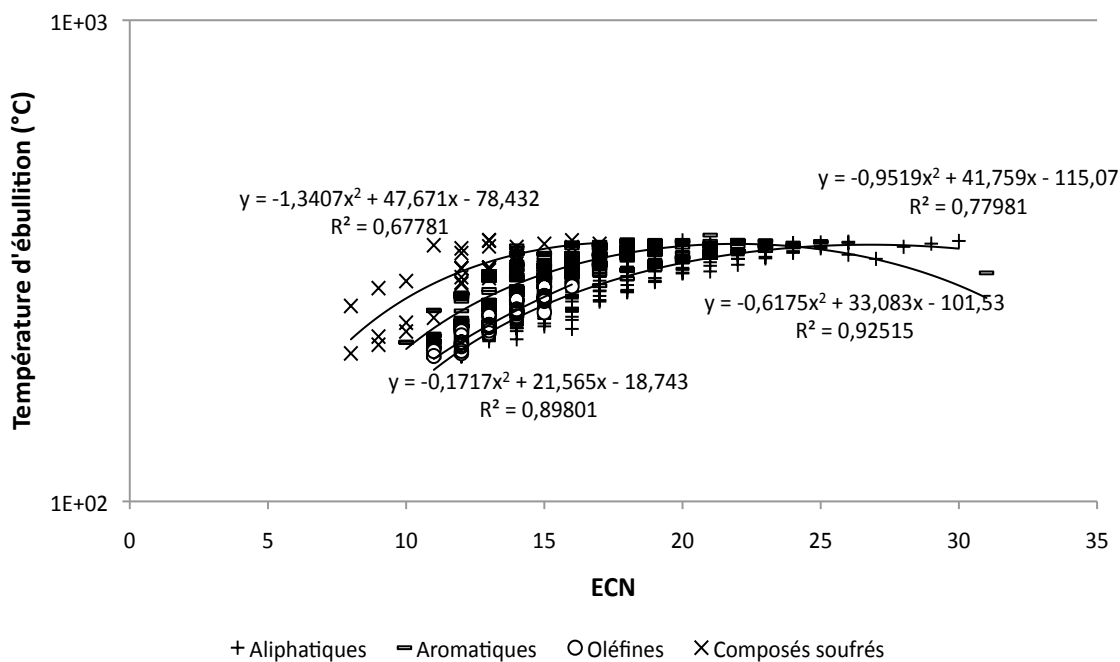
- MADDALENA, R. L., MCKONE, T. E., LAYTON, D. W., & HSIEH, D. P. H. (1995). Comparison of multi-media transport and transformation models: Regional Fugacity model vs. CalTOX. *Chemosphere*, 30(5), 869-889.
- MASTERTON, W. L., & SLOWINSKI, E. J. (1977). An introduction to organic chemistry. In Saunders, (éd.), *Chemical Principles*.
- MCGRATH, J. A., PARKERTON, T. F., & DI TORO, D. M. (2004). Application of the narcosis target lipid model to algal toxicity and deriving predicted-no-effect concentrations. *Environmental Toxicology and Chemistry*, 23(10), 2503-2517.
- MCGRATH, J. A., PARKERTON, T. F., HELLWEGGER, F. L., & DI TORO, D. M. (2005). Validation of the narcosis target lipid model for petroleum products: gasoline as a case study. *Environmental Toxicology and Chemistry*, 24(9), 2382-2394.
- MCKONE, T., & HERTWICH, E. (2001). The human toxicity potential and a Strategy for Evaluating Model Performance in Life Cycle Impact Assessment. *The International Journal of Life Cycle Assessment*, 6(2), 106-109.
- MCKONE, T. E., & ENOCH, K. G. (2002). *CalTOX (registered trademark), A multimedia total exposure model spreadsheet user's guide. Version 4.0(Beta)*: Lawrence Berkeley National Laboratory. <http://www.escholarship.org/uc/item/9j74302f>
- MCKONE, T. E., & MACLEOD, M. (2003). TRACKING MULTIPLE PATHWAYS OF HUMAN EXPOSURE TO PERSISTENT MULTIMEDIA POLLUTANTS: Regional, Continental, and Global-Scale Models. *Annual Review of Environment and Resources*, 28, 463-492.
- MEYLAN, W. M., & HOWARD, P. H. (1995). Atom/fragment contribution method for estimating octanol-water partition coefficients. *Journal of Pharmaceutical Sciences*, 84(1), 83-92.
- PAYET, J. (2004). *Assessing toxic impacts on aquatic ecosystems in life cycle assessment (LCA)* (Ph.D., Ecole Polytechnique fédérale de Lausanne, Lausanne).
- PAYET, J. (2005). Assessing Toxic Impacts on Aquatic Ecosystems in LCA. *The International Journal of Life Cycle Assessment*, 10(5), 373-373.

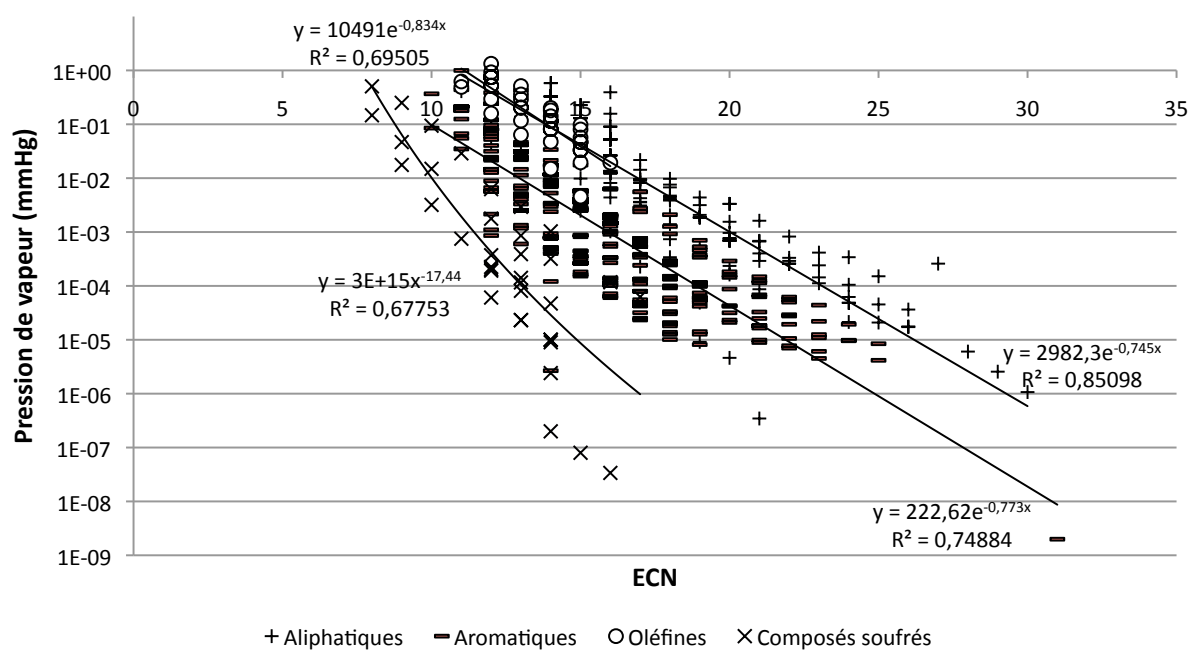
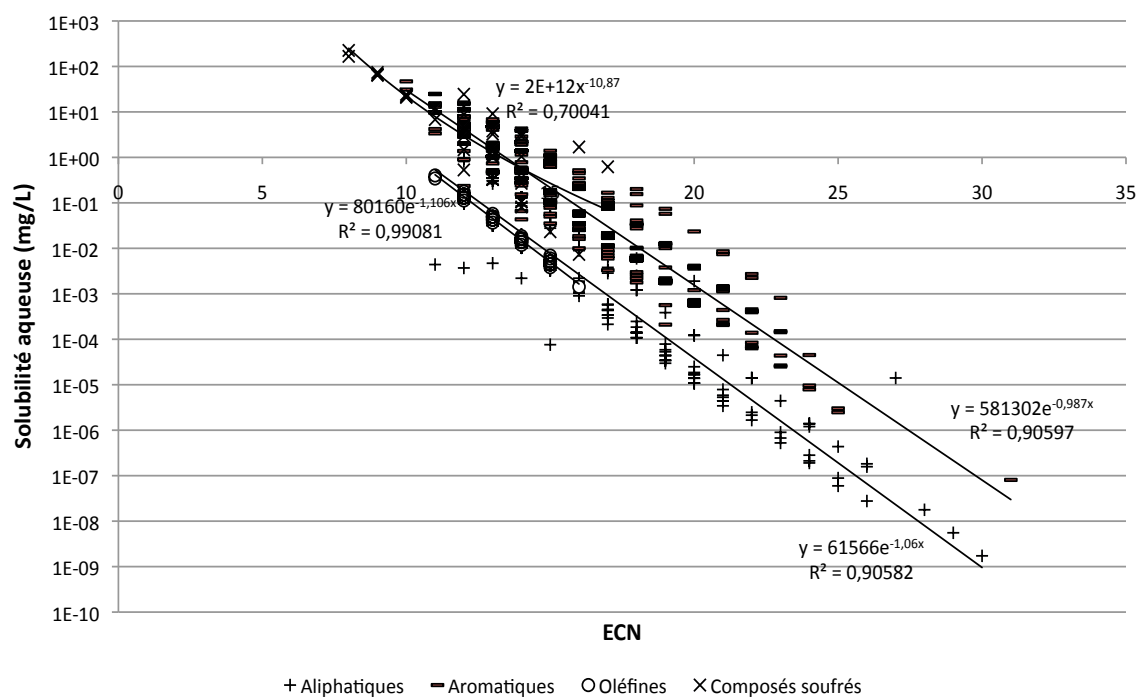
- PENNINGTON, D. W., MARGNI, M., AMMANN, C., & JOLLIET, O. (2005). Multimedia Fate and Human Intake Modeling: Spatial versus Nonspatial Insights for Chemical Emissions in Western Europe. *Environmental Science & Technology*, 39(4), 1119-1128.
- PERRODON, A. (2010). *PETROLE - L'exploration pétrolière - Encyclopédie Universalis*. Consulté le 2 Juillet 2010, tiré de <http://www.universalis.fr/encyclopedie/petrole-l-exploration-petroliere/>.
- POTTER, T. L., & SIMMONS, K. E. (1998). *Composition of Petroleum Mixtures*.
- REDDY, C. M., EGLINTON, T. I., HOUNSHELL, A., WHITE, H. K., XU, L., GAINES, R. B., et al. (2002). The West Falmouth Oil Spill after Thirty Years: The Persistence of Petroleum Hydrocarbons in Marsh Sediments. *Environmental Science & Technology*, 36(22), 4754-4760.
- RESSOURCES NATURELLES CANADA. (2008). *Gaz naturel*. Consulté le 25 octobre 2010, tiré de <http://oeenrcan.gc.ca/transports/carburants/gaz-naturel/gaz-naturel.cfm>.
- ROGEL, J.-P., BOUCHER, K., & PAULHUS, C. (2003). *L'impact écologique des marées noires*. Consulté le http://www.radio-canada.ca/actualite/decouverte/dossiers/81_maree_noire/index.html.
- ROSENBAUM, R. K., BACHMANN, T. M., GOLD, L. S., HUIJBREGTS, M. A. J., JOLLIET, O., JURASKE, R., et al. (2008). USEtox—the UNEP-SETAC toxicity model: recommended characterisation factors for human toxicity and freshwater ecotoxicity in life cycle impact assessment. *International Journal Life Cycle Assessment*(13), 532-546.
- ROSENBAUM, R. K., BACHMANN, T. M., GOLD, L. S., HUIJBREGTS, M. A. J., JOLLIET, O., JURASKE, R., et al. *Supporting Information: USEtox - The UNEP-SETAC toxicity model: recommended characterisation factors for human toxicity and freshwater ecotoxicity in Life Cycle Impact Assessment*.
- ROSENBAUM, R. K., MARGNI, M., & JOLLIET, O. (2007). A flexible matrix algebra framework for the multimedia multipathway modeling of emission to impacts. *Environment International*, 33(5), 624-634.

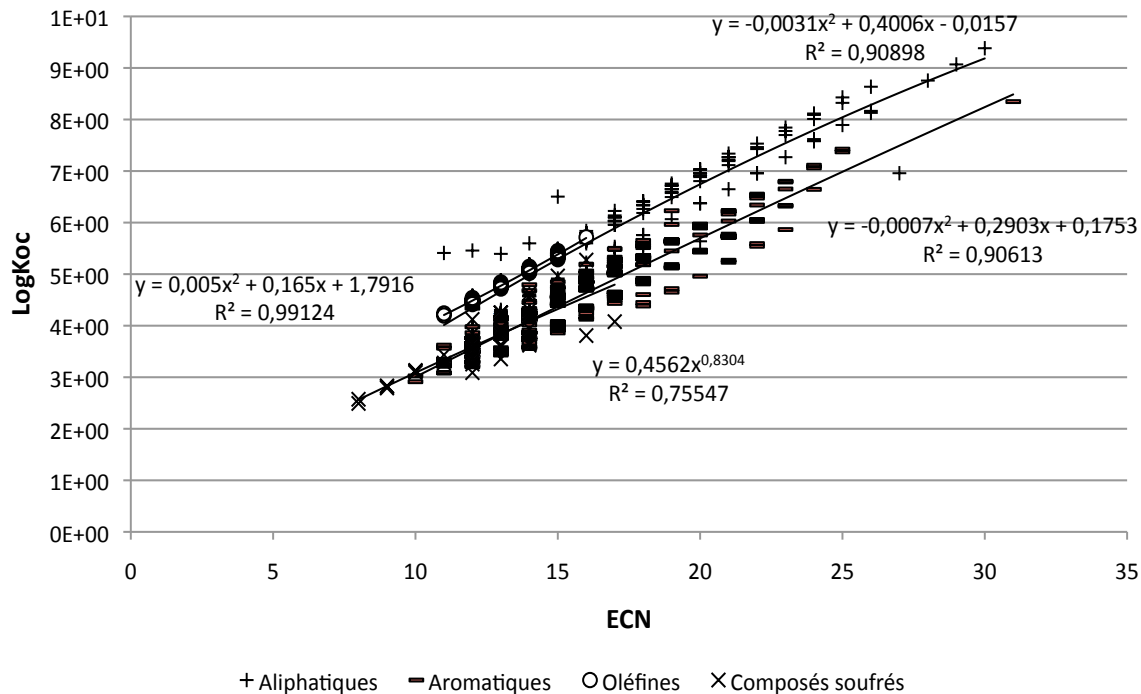
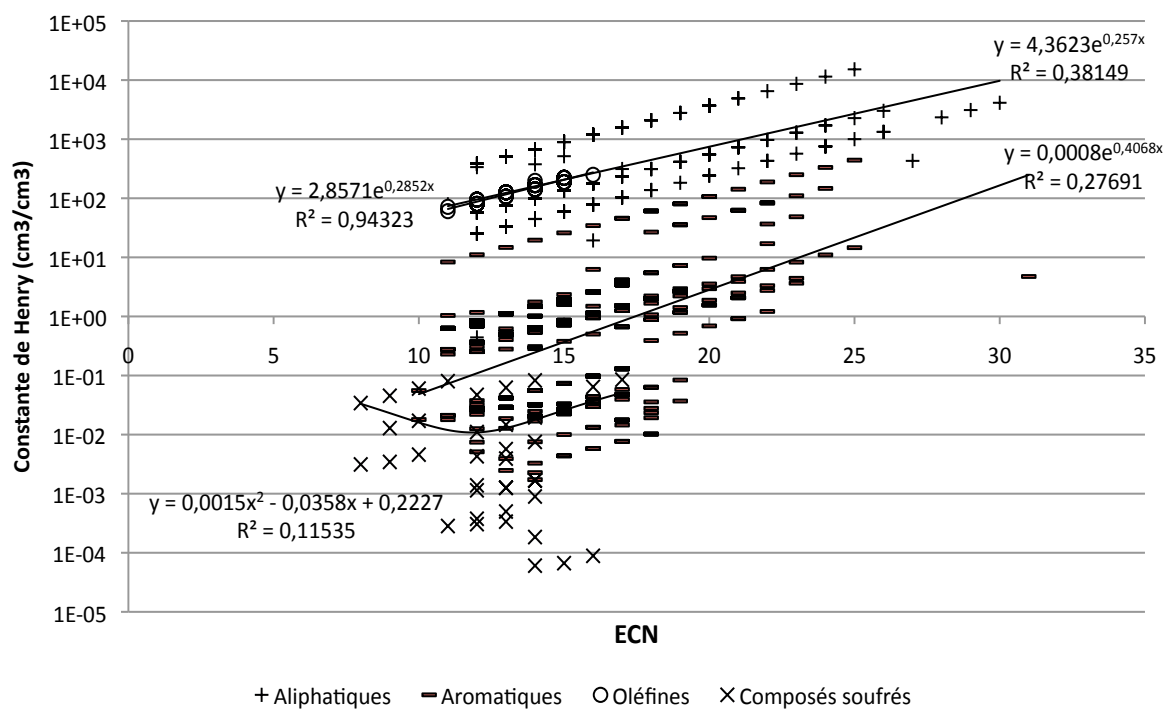
- ROSENBAUM, R. K., MCKONE, T. E., & JOLLIET, O. (2009). CKow: A Dynamic Model for Chemical Transfer to Meat and Milk. *ENVIRONMENTAL SCIENCE & TECHNOLOGY*, 43(21), 8191–8198.
- RYAN, D., & MARRIOTT, P. (2003). Comprehensive two-dimensional gas chromatography. *Analytical and Bioanalytical Chemistry*, 376, 295-297.
- SANSCARTIER, D., MARGNI, M., REIMER, K., & ZEEB, B. (2010). Comparison of the Secondary Environmental Impacts of Three Remediation Alternatives for a Diesel-contaminated Site in Northern Canada. *Soil and Sediment Contamination: An International Journal*, 19(3), 338-355.
- STINSON, M. K. (1992). *CONTAMINANTS AND REMEDIAL OPTIONS AT WOOD PRESERVING SITES* (Contract No. 68-C9-0033 Work Assignment 2-R013). Edison, New Jersey 08837: Foster Wheeler Enviresponse, Inc.
- SUTTON, P. A., LEWIS, C. A., & ROWLAND, S. J. (2005). Isolation of individual hydrocarbons from the unresolved complex hydrocarbon mixture of a biodegraded crude oil using preparative capillary gas chromatography. *Organic Geochemistry*, 36(6), 963-970.
- TOFFOLETTO, L., DESCHÊNES, L., & SAMSON, R. (2005). LCA of Ex-Situ Bioremediation of Diesel-Contaminated Soil (11 pp). *The International Journal of Life Cycle Assessment*, 10(6), 406-416.
- TRAVIS, C. C., & ARMS, A. D. (1988). Bioconcentration of organics in beef, milk, and vegetation. *Environmental Science & Technology*, 22(3), 271-274.
- USEPA. (19 Mai 2010). *Exposure Assessment Tools and Models*. Consulté le 23 Juillet 2010, tiré de <http://www.epa.gov/opptintr/exposure/pubs/episuite.htm>.
- USEPA. (1999, 2007). *Hydrocarbons - Mobile Source Emissions - Past, Present and Future*. Consulté le 29 Juillet 2010, tiré de <http://www.epa.gov/oms/invtory/overview/pollutants/hydrocarbons.htm>.
- USEPA. (2008). *Ecological Toxicity information - Region 5 Superfund*. Consulté le 29 Septembre 2010, tiré de <http://www.epa.gov/R5Super/ecology/html/toxprofiles.htm#pahs>.

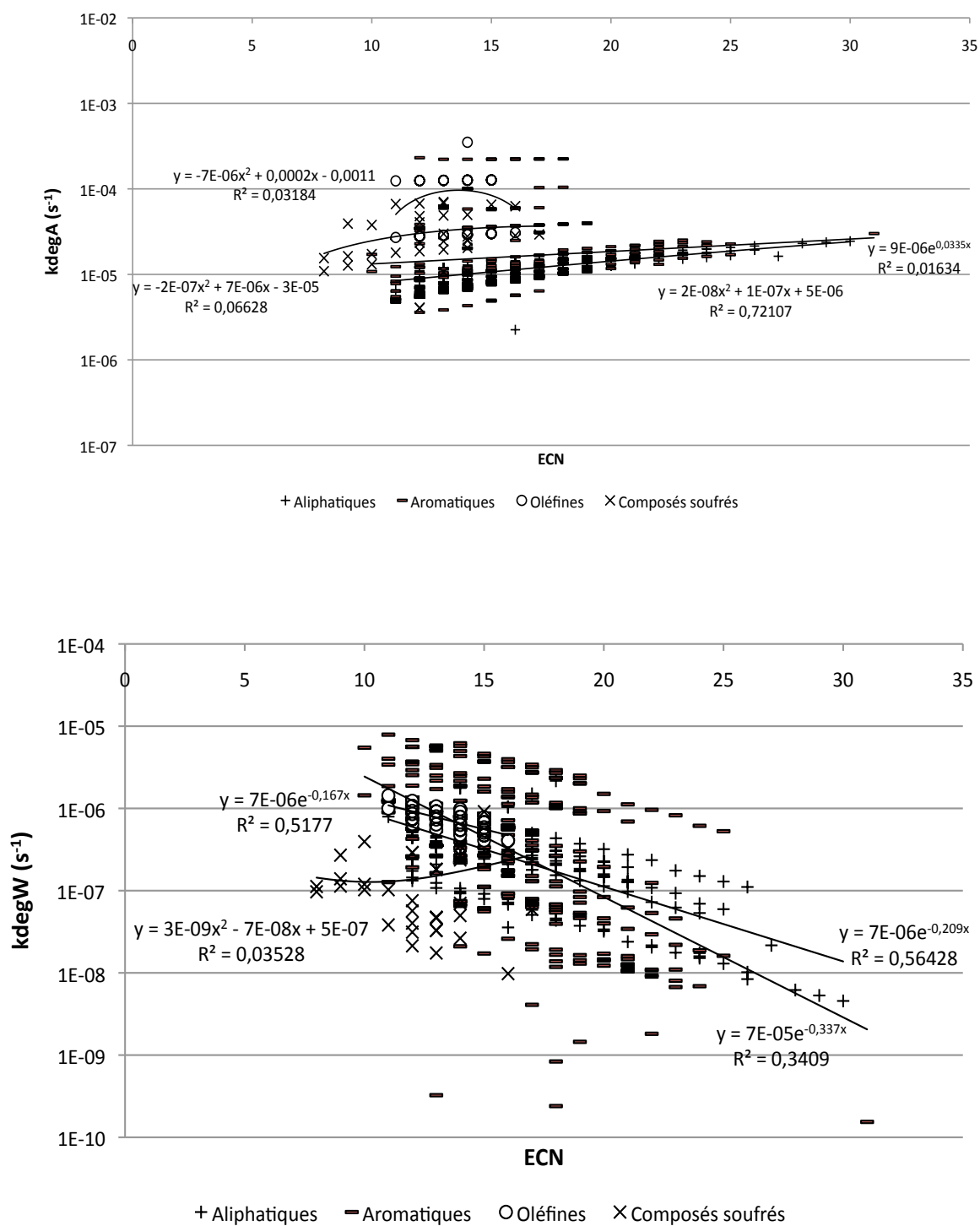
- VAN DE MEENT, D. (2008). *Environmental fate factors and human intake fractions for exposure and risk calculation of petroleum products with the hydrocarbon block method* (322): Department of Environmental Science, Faculty of Science Radboud University Nijmegen, the Netherlands.
- VAN DE MEENT, D. (2010).
- VAN DE MEENT, D., HOLLANDER, A., COMBER, M., & PARKERTON, T. (2009). Environmental Fate Factors and Human Intake Fractions for Risk Assessment of Petroleum Products. *Integrated Environmental Assessment and Management*, 6(1), 135-144.
- VAN ZELM, R., HUIJBREGTS, M., & VAN DE MEENT, D. (2009). USES-LCA 2.0—a global nested multi-media fate, exposure, and effects model. *The International Journal of Life Cycle Assessment*, 14(3), 282-284.
- VEITH, G. D., & BRODERIUS, S. J. (1990). Rules for Distinguishing Toxicants That cause Type I and Type II Narcosis Syndromes. *Environmental Health Perspectives*, 87, 207-211.
- VENTURA, G. T., KENIG, F., REDDY, C. M., FRYSSINGER, G. S., NELSON, R. K., MOOY, B. V., et al. (2008). Analysis of unresolved complex mixtures of hydrocarbons extracted from Late Archean sediments by comprehensive two-dimensional gas chromatography (GC×GC). *Organic Geochemistry*, 39(7), 846-867.
- WEISMAN, W. (1998). *Analysis of Petroleum Hydrocarbons in Environmental Media*.
- WENZEL, H., HAUSCHILD, M., & AHING, L. (1997). *Environmental Assessment of Products. Vol. 1 - Methodology tools and case studies in product development*. Hingham, MA. USA: Kluwer Academic Publishers.

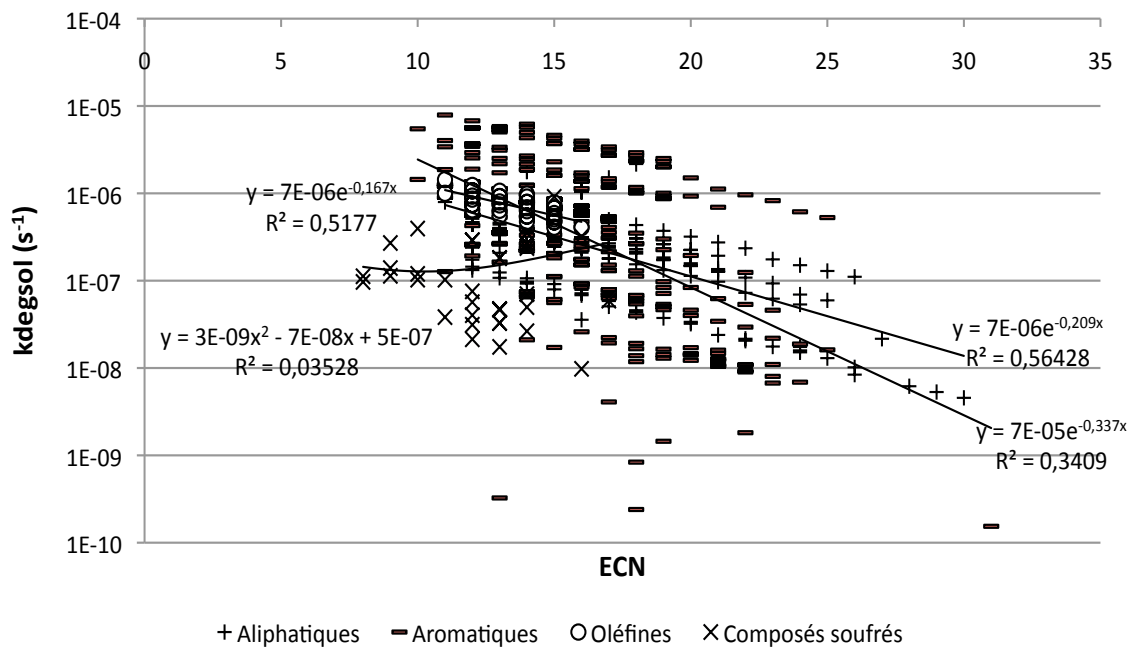
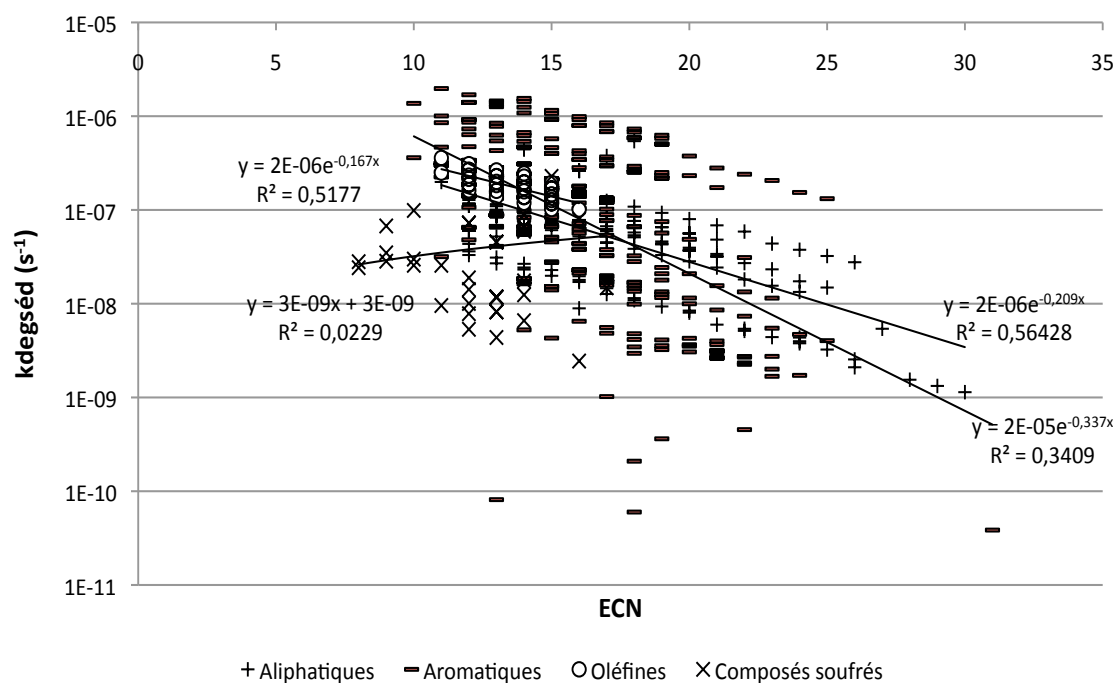
ANNEXE 1 – Graphique représentant le développement des corrélations pour la détermination des propriétés des fractions selon la méthode du TPHWG

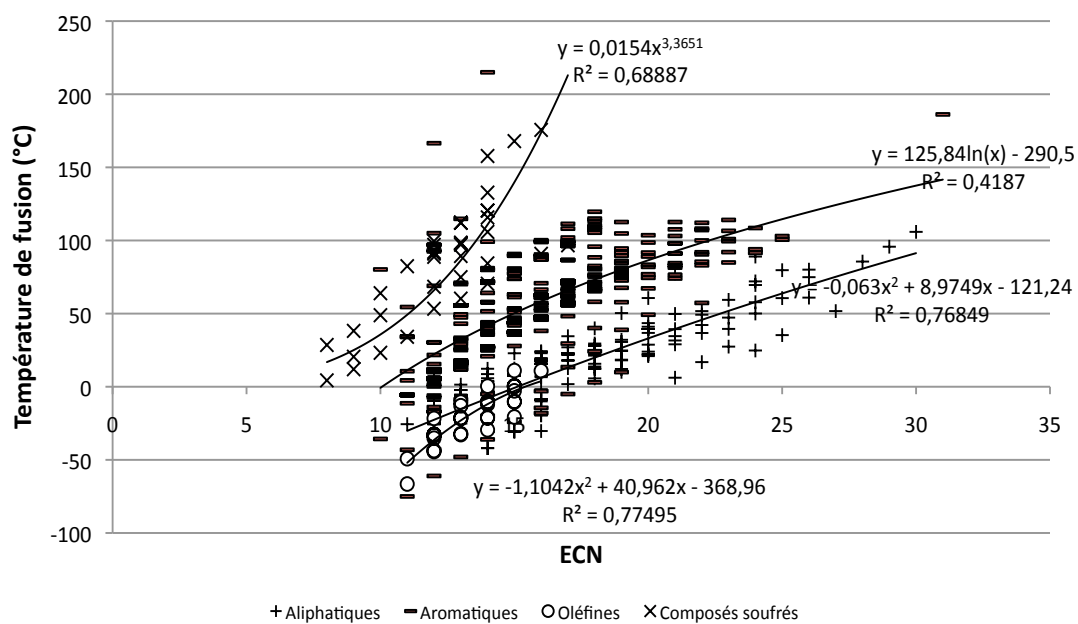




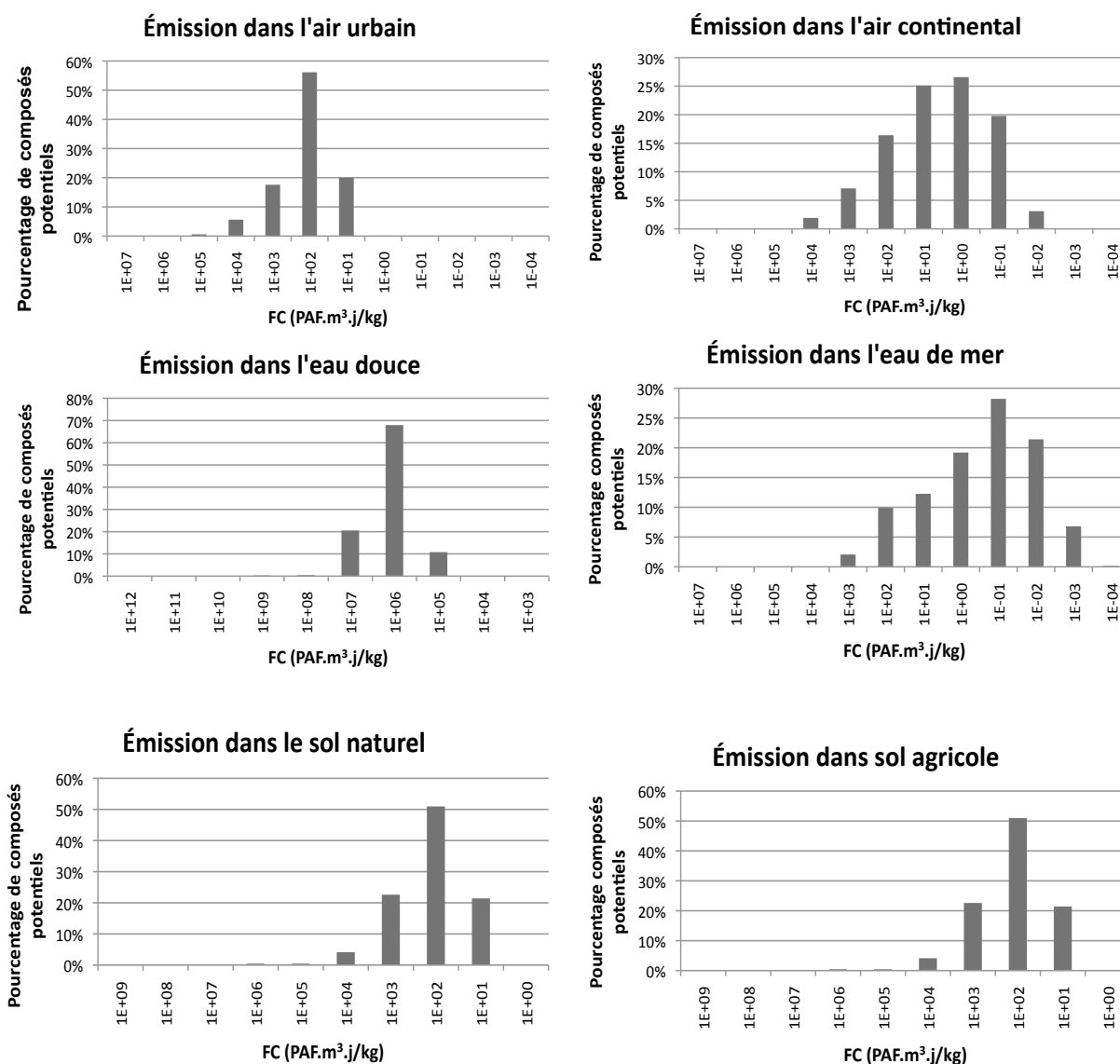








ANNEXE 2 – Distributions log normales des FC pour l'écotoxicité aquatique (compartiment d'émission : eau douce)



ANNEX 3 - S1 - Comparison of the properties of fuel oil no. 2 and pole-treating oil [1, 2]

	Fuel no.2	Pole-treating oil
Viscosity	1,3 cSt (1,3 mm ² /s) at 40°C – 11 cSt (11 mm ² /s) at 40°C	3,20 cSt at 40°C
Boiling point	150°C (302°F) – 370°C (698°F)	199 to 350°C
Evaporation rate	<1 (1=n-butylacetate)	<1 (1=n-butylacetate)
Water solubility	negligible	negligible
Freezing / pour point	-4°C (25°F) - -39°C (-38°F)	-21°C ASTM D97
Vapor pressure	[N/D at 20°C] 4 kPa (30 mmHg) at 38°C	<1 kPa at 38°C
Density	0,82 – 0,9	0,92 g/cc at 15°C

[1] Esso, "Imperial Oil, Material Safety Datasheet," 2003.

[2] Amerada Hess Corporation, "Material safety data sheet - N°2 fuel oil," 2001.

ANNEX 4 - S2 - The 677 potential constituents of oil and their properties

Name	ECN	MW	S _w	K _{oc}	K _{ow}	EC ₅₀	K _H	P _{vap}	k _{degA}	k _{degW}	k _{degSed}	k _{degSoil}
		g/mol	mg/L	L _w /kg _{oct}	L _w /L _o _{ct}	mg/L	Pa.m ³ /mol	Pa	s ⁻¹	s ⁻¹	s ⁻¹	s ⁻¹
n-Undecane	1,10E+01	1,56E+02	4,40E-03	2,58E+05	3,45E+05	1,16E-04	1,96E+05	5,49E+01	6,60E-06	7,95E-07	1,99E-07	7,95E-07
n-Dodecane	1,20E+01	1,70E+02	3,70E-03	2,87E+05	3,84E+05	1,17E-04	8,35E+05	1,80E+01	7,10E-06	6,82E-07	1,71E-07	6,82E-07
n-Tridecane	1,30E+01	1,84E+02	4,70E-03	2,47E+05	3,31E+05	1,40E-04	2,92E+05	7,44E+00	8,00E-06	5,86E-07	1,46E-07	5,86E-07
n-Tetradecane	1,40E+01	1,98E+02	2,20E-03	3,96E+05	5,30E+05	1,08E-04	9,32E+05	1,55E+00	9,60E-06	5,02E-07	1,26E-07	5,02E-07
n-Pentadecane	1,50E+01	2,12E+02	7,60E-05	3,19E+06	4,27E+06	2,10E-05	1,28E+06	4,57E-01	1,11E-05	4,31E-07	1,08E-07	4,31E-07
n-Hexadecane	1,60E+01	2,26E+02	9,00E-04	6,89E+05	9,22E+05	8,18E-05	4,79E+04	1,91E-01	1,25E-05	3,70E-07	9,25E-08	3,70E-07
n-Heptadecane	1,70E+01	2,40E+02	2,94E-04	1,38E+06	1,85E+06	4,99E-05	3,90E+06	3,04E-02	1,05E-05	3,18E-07	7,94E-08	3,18E-07
n-Octadecane	1,80E+01	2,54E+02	6,00E-04	2,13E+06	2,84E+06	2,15E-05	5,19E+06	4,55E-02	1,12E-05	2,73E-07	6,81E-08	2,73E-07

Octadecane	01	+02	-03	+05	+05	-04	+06	-02	-05	-07	08	07
n-Nonadecane	1,90E+01	2,69E+02	2,97E-05	5,71E+06	7,64E+06	1,49E-05	6,88E+06	6,53E-03	1,19E-05	2,34E-07	5,85E-08	2,34E-07
n-Eicosane	2,00E+01	2,83E+02	1,90E-03	4,34E+05	5,80E+05	1,44E-04	9,14E+06	6,16E-04	1,26E-05	2,01E-07	5,02E-08	2,01E-07
2-Methylundecane	1,20E+01	1,70E+02	9,74E-02	3,78E+04	5,05E+04	4,57E-04	9,47E+05	9,29E+01	6,96E-06	7,64E-07	1,91E-07	7,64E-07
3-Methylundecane	1,20E+01	1,70E+02	9,74E-02	3,78E+04	5,05E+04	4,57E-04	9,47E+05	9,29E+01	7,11E-06	7,64E-07	1,91E-07	7,64E-07
2-Methyldodecane	1,30E+01	1,84E+02	3,17E-02	7,57E+04	1,01E+05	3,12E-04	1,26E+06	3,61E+01	7,67E-06	6,55E-07	1,64E-07	6,55E-07
3-Methyldodecane	1,30E+01	1,84E+02	3,17E-02	7,57E+04	1,01E+05	3,12E-04	1,26E+06	3,61E+01	7,81E-06	6,55E-07	1,64E-07	6,55E-07
2-Methyltridecane	1,40E+01	1,98E+02	1,03E-02	1,52E+05	2,04E+05	2,11E-04	1,67E+06	1,44E+01	8,38E-06	5,63E-07	1,41E-07	5,63E-07
3-Methyltridecane	1,40E+01	1,98E+02	1,03E-02	1,52E+05	2,04E+05	2,11E-04	1,67E+06	1,44E+01	8,52E-06	5,63E-07	1,41E-07	5,63E-07

2-Methyltetradeceane	1,50E+01	2,12E+02	3,31E-03	3,07E+05	4,11E+05	1,39E-04	2,22E+06	5,81E+00	9,08E-06	4,83E-07	1,21E-07	4,83E-07
3-Methyltetradeceane	1,50E+01	2,12E+02	3,31E-03	3,07E+05	4,11E+05	1,39E-04	2,22E+06	5,81E+00	9,23E-06	4,83E-07	1,21E-07	4,83E-07
2-Ethyldecane	1,20E+01	1,70E+02	9,74E-02	3,78E+04	5,05E+04	4,57E-04	9,47E+05	9,29E+01	7,11E-06	7,64E-07	1,91E-07	7,64E-07
3-Ethyldecane	1,20E+01	1,70E+02	9,74E-02	3,78E+04	5,05E+04	4,57E-04	9,47E+05	9,29E+01	7,31E-06	7,64E-07	1,91E-07	7,64E-07
2-Ethylundecane	1,30E+01	1,84E+02	3,17E-02	7,57E+04	1,01E+05	3,12E-04	1,26E+06	3,61E+01	7,81E-06	6,55E-07	1,64E-07	6,55E-07
3-Ethylundecane	1,30E+01	1,84E+02	3,17E-02	7,57E+04	1,01E+05	3,12E-04	1,26E+06	3,61E+01	8,02E-06	6,55E-07	1,64E-07	6,55E-07
2-Ethyltridecane	1,40E+01	1,98E+02	1,03E-02	1,52E+05	2,04E+05	2,11E-04	1,67E+06	1,44E+01	8,52E-06	5,63E-07	1,41E-07	5,63E-07
3-Ethyltridecane	1,40E+01	1,98E+02	1,03E-02	1,52E+05	2,04E+05	2,11E-04	1,67E+06	1,44E+01	8,73E-06	5,63E-07	1,41E-07	5,63E-07
2-Ethyltride	1,50E+01	2,12E+02	3,31E-03	3,07E+05	4,11E+05	1,39E-04	2,22E+06	5,81E+00	9,23E-06	4,83E-07	1,21E-07	4,83E-07

cane	01	+02	-03	+05	+05	-04	+06	+00	-06	-07	07	07
3-Ethyltridecane	1,50E+ 01	2,12E +02	3,31E -03	3,07E +05	4,11E +05	1,39E -04	2,22E +06	5,81E +00	9,43E -06	4,83E -07	1,21E- 07	4,83E- 07
2-Ethyltetradecane	1,60E+ 01	2,26E +02	1,06E -03	6,22E +05	8,32E +05	8,84E -05	2,94E +06	2,43E +00	9,93E -06	4,14E -07	1,04E- 07	4,14E- 07
3-Ethyltetradecane	1,60E+ 01	2,26E +02	1,06E -03	6,22E +05	8,32E +05	8,84E -05	2,94E +06	2,43E +00	1,01E -05	4,14E -07	1,04E- 07	4,14E- 07
2,6-Dimethyldodecane	1,20E+ 01	1,70E +02	1,13E -01	3,45E +04	4,62E +04	4,85E -04	9,47E +05	1,65E +02	7,10E -06	6,63E -07	1,66E- 07	6,63E- 07
2,6-Dimethylundecane	1,30E+ 01	1,84E +02	3,67E -02	6,92E +04	9,26E +04	3,31E -04	1,26E +06	6,37E +01	7,81E -06	5,69E -07	1,42E- 07	5,69E- 07
2,6-Dimethyldodecane	1,40E+ 01	1,98E +02	1,19E -02	1,39E +05	1,86E +05	2,24E -04	1,67E +06	2,49E +01	8,52E -06	4,89E -07	1,22E- 07	4,89E- 07
2,6-Dimethyltridecane	1,50E+ 01	2,12E +02	3,83E -03	2,81E +05	3,76E +05	1,48E -04	2,22E +06	1,00E +01	9,22E -06	4,19E -07	1,05E- 07	4,19E- 07
2,3-Dimethyldodecane	1,20E+ 01	1,70E +02	1,13E -01	3,45E +04	4,62E +04	4,85E -04	9,47E +05	1,65E +02	7,10E -06	6,63E -07	1,66E- 07	6,63E- 07

2,3-Dimethylndecane	1,30E+01	1,84E+02	3,67E-02	6,92E+04	9,26E+04	3,31E-04	1,26E+06	6,37E+01	7,81E-06	5,69E-07	1,42E-07	5,69E-07
2,3-Dimethyldodecane	1,40E+01	1,98E+02	1,19E-02	1,39E+05	1,86E+05	2,24E-04	1,67E+06	2,49E+01	8,52E-06	4,89E-07	1,22E-07	4,89E-07
2,3-Dimethyltridecane	1,50E+01	2,12E+02	3,83E-03	2,81E+05	3,76E+05	1,48E-04	2,22E+06	1,00E+01	9,22E-06	4,19E-07	1,05E-07	4,19E-07
2,4-Dimethylndecane	1,30E+01	1,84E+02	3,67E-02	6,92E+04	9,26E+04	3,31E-04	1,26E+06	6,37E+01	7,81E-06	5,69E-07	1,42E-07	5,69E-07
2,4-Dimethyldodecane	1,40E+01	1,98E+02	1,19E-02	1,39E+05	1,86E+05	2,24E-04	1,67E+06	2,49E+01	8,52E-06	4,89E-07	1,22E-07	4,89E-07
2,4-Dimethyltridecane	1,50E+01	2,12E+02	3,83E-03	2,81E+05	3,76E+05	1,48E-04	2,22E+06	1,00E+01	9,22E-06	4,19E-07	1,05E-07	4,19E-07
2,5-Dimethyldodecane	1,20E+01	1,70E+02	1,13E-01	3,45E+04	4,62E+04	4,85E-04	9,47E+05	1,65E+02	7,10E-06	6,63E-07	1,66E-07	6,63E-07
2,5-Dimethylndecane	1,30E+01	1,84E+02	3,67E-02	6,92E+04	9,26E+04	3,31E-04	1,26E+06	6,37E+01	7,81E-06	5,69E-07	1,42E-07	5,69E-07
2,5-Dimethyldodecane	1,40E+01	1,98E+02	1,19E-02	1,39E+05	1,86E+05	2,24E-04	1,67E+06	2,49E+01	8,52E-06	4,89E-07	1,22E-07	4,89E-07

odecane	01	+02	-02	+05	+05	-04	+06	+01	-06	-07	07	07
2,5-Dimethyltridecane	1,50E+ 01	2,12E +02	3,83E -03	2,81E +05	3,76E +05	1,48E -04	2,22E +06	1,00E +01	9,22E -06	4,19E -07	1,05E- 07	4,19E- 07
2,6-Diethyloctane	1,20E+ 01	1,70E +02	1,13E -01	3,45E +04	4,62E +04	4,85E -04	9,47E +05	1,65E +02	7,45E -06	6,63E -07	1,66E- 07	6,63E- 07
2,6-Diethylnonane	1,30E+ 01	1,84E +02	3,67E -02	6,92E +04	9,26E +04	3,31E -04	1,26E +06	6,37E +01	8,16E -06	5,69E -07	1,42E- 07	5,69E- 07
2,6-Diethyldecane	1,40E+ 01	1,98E +02	1,19E -02	1,39E +05	1,86E +05	2,24E -04	1,67E +06	2,49E +01	8,86E -06	4,89E -07	1,22E- 07	4,89E- 07
2,6-Dipropyheptane	1,30E+ 01	1,84E +02	3,67E -02	6,92E +04	9,26E +04	3,31E -04	1,26E +06	6,37E +01	7,95E -06	5,69E -07	1,42E- 07	5,69E- 07
2,6-Dipropyloctane	1,40E+ 01	1,98E +02	1,19E -02	1,39E +05	1,86E +05	2,24E -04	1,67E +06	2,49E +01	8,86E -06	4,89E -07	1,22E- 07	4,89E- 07
2,4-Diethylnonane	1,30E+ 01	1,84E +02	3,67E -02	6,92E +04	9,26E +04	3,31E -04	1,26E +06	6,37E +01	8,16E -06	5,69E -07	1,42E- 07	5,69E- 07
2,4-Diethyldecane	1,40E+ 01	1,98E +02	1,19E -02	1,39E +05	1,86E +05	2,24E -04	1,67E +06	2,49E +01	8,86E -06	4,89E -07	1,22E- 07	4,89E- 07

2,4-Dipropylheptane	1,30E+01	1,84E+02	3,67E-02	6,92E+04	9,26E+04	3,31E-04	1,26E+06	6,37E+01	8,16E-06	5,69E-07	1,42E-07	5,69E-07
2,4-Dipropyl octane	1,40E+01	1,98E+02	1,19E-02	1,39E+05	1,86E+05	2,24E-04	1,67E+06	2,49E+01	8,86E-06	4,89E-07	1,22E-07	4,89E-07
2,6,10-Trimethylundecane	1,40E+01	1,98E+02	1,37E-02	1,27E+05	1,70E+05	2,38E-04	1,67E+06	4,39E+01	8,51E-06	4,24E-07	1,06E-07	4,24E-07
2,6,10-Trimethyl dodecane	1,50E+01	2,12E+02	4,42E-03	2,57E+05	3,44E+05	1,57E-04	2,22E+06	1,73E+01	9,36E-06	3,64E-07	9,10E-08	3,64E-07
2,6,10-Trimethyl tridecane	1,60E+01	2,26E+02	1,42E-03	5,20E+05	6,96E+05	1,01E-04	2,94E+06	6,99E+00	1,01E-05	3,12E-07	7,81E-08	3,12E-07
2,4,10-Trimethylundecane	1,40E+01	1,98E+02	1,37E-02	1,27E+05	1,70E+05	2,38E-04	1,67E+06	4,39E+01	8,51E-06	4,24E-07	1,06E-07	4,24E-07
2,4,10-Trimethyl dodecane	1,50E+01	2,12E+02	4,42E-03	2,57E+05	3,44E+05	1,57E-04	2,22E+06	1,73E+01	9,36E-06	3,64E-07	9,10E-08	3,64E-07
2,4,10-Trimethyl tridecane	1,60E+01	2,26E+02	1,42E-03	5,20E+05	6,96E+05	1,01E-04	2,94E+06	6,99E+00	1,01E-05	3,12E-07	7,81E-08	3,12E-07
2,4,8-Trimethylundecane	1,40E+01	1,98E+02	1,37E-02	1,27E+05	1,70E+05	2,38E-04	1,67E+06	4,39E+01	8,65E-06	4,24E-07	1,06E-07	4,24E-07

undecane	01	+02	-02	+05	+05	-04	+06	+01	-06	-07	07	07
2,4,8-Trimethyl dodecane	1,50E+ 01	2,12E +02	4,42E -03	2,57E +05	3,44E +05	1,57E -04	2,22E +06	1,73E +01	9,36E -06	3,64E -07	9,10E- 08	3,64E- 07
2,4,8-Trimethylt ridecane	1,60E+ 01	2,26E +02	1,42E -03	5,20E +05	6,96E +05	1,01E -04	2,94E +06	6,99E +00	1,01E -05	3,12E -07	7,81E- 08	3,12E- 07
2,4,6-Trimethyl undecane	1,40E+ 01	1,98E +02	1,37E -02	1,27E +05	1,70E +05	2,38E -04	1,67E +06	4,39E +01	8,65E -06	4,24E -07	1,06E- 07	4,24E- 07
2,4,6-Trimethyl dodecane	1,50E+ 01	2,12E +02	4,42E -03	2,57E +05	3,44E +05	1,57E -04	2,22E +06	1,73E +01	9,36E -06	3,64E -07	9,10E- 08	3,64E- 07
2,4,6-Trimethylt ridecane	1,60E+ 01	2,26E +02	1,42E -03	5,20E +05	6,96E +05	1,01E -04	2,94E +06	6,99E +00	1,01E -05	3,12E -07	7,81E- 08	3,12E- 07
2,3,4-Trimethyl undecane	1,40E+ 01	1,98E +02	1,37E -02	1,27E +05	1,70E +05	2,38E -04	1,67E +06	4,39E +01	8,65E -06	4,24E -07	1,06E- 07	4,24E- 07
2,3,4-Trimethyl dodecane	1,50E+ 01	2,12E +02	4,42E -03	2,57E +05	3,44E +05	1,57E -04	2,22E +06	1,73E +01	9,36E -06	3,64E -07	9,10E- 08	3,64E- 07
2,3,4-Trimethylt ridecane	1,60E+ 01	2,26E +02	1,42E -03	5,20E +05	6,96E +05	1,01E -04	2,94E +06	6,99E +00	1,01E -05	3,12E -07	7,81E- 08	3,12E- 07

2,3,5-Trimethylundecane	1,40E+01	1,98E+02	1,37E-02	1,27E+05	1,70E+05	2,38E-04	1,67E+06	4,39E+01	8,65E-06	4,24E-07	1,06E-07	4,24E-07
2,3,5-Trimethyldodecane	1,50E+01	2,12E+02	4,42E-03	2,57E+05	3,44E+05	1,57E-04	2,22E+06	1,73E+01	9,36E-06	3,64E-07	9,10E-08	3,64E-07
2,3,5-Trimethyltridecane	1,60E+01	2,26E+02	1,42E-03	5,20E+05	6,96E+05	1,01E-04	2,94E+06	6,99E+00	1,01E-05	3,12E-07	7,81E-08	3,12E-07
2,3,4,5-Tetramethyldecane	1,40E+01	1,98E+02	1,59E-02	1,16E+05	1,56E+05	2,52E-04	1,67E+06	7,75E+01	8,79E-06	3,68E-07	9,21E-08	3,68E-07
2,4,6,8-Tetramethyldecane	1,40E+01	1,98E+02	1,59E-02	1,16E+05	1,56E+05	2,52E-04	1,67E+06	7,75E+01	8,79E-06	3,68E-07	9,21E-08	3,68E-07
2,4,6,8-Tetramethylundecane	1,50E+01	2,12E+02	5,11E-03	2,35E+05	3,14E+05	1,68E-04	2,22E+06	3,03E+01	9,50E-06	3,16E-07	7,90E-08	3,16E-07
2,4,6,10-Tetramethyl-dodecane	1,50E+01	2,12E+02	5,11E-03	2,35E+05	3,14E+05	1,68E-04	2,22E+06	3,03E+01	9,36E-06	3,16E-07	7,90E-08	3,16E-07
2,4,6,8-Tetramethyl-dodecane	1,60E+01	2,26E+02	1,64E-03	4,75E+05	6,36E+05	1,08E-04	2,94E+06	1,21E+01	1,02E-05	2,71E-07	6,78E-08	2,71E-07

e												
2,4,6,10-Tetramethyldodecane	1,50E+01	2,26E+02	1,64E-03	4,75E+05	6,36E+05	1,08E-04	2,94E+06	1,21E+01	1,02E-05	2,71E-07	6,78E-08	2,71E-07
2,4,6,8,10-Pentamethylundecane	1,60E+01	2,26E+02	1,89E-03	4,35E+05	5,81E+05	1,15E-04	2,94E+06	2,09E+01	1,02E-05	2,36E-07	5,89E-08	2,36E-07
2-Methylpentadecane	1,60E+01	2,26E+02	1,06E-03	6,22E+05	8,32E+05	8,84E-05	2,94E+06	2,43E+00	9,79E-06	4,14E-07	1,04E-07	4,14E-07
2,2,4,4,5,5,7,7-Octamethyloctane	1,60E+01	2,26E+02	2,20E-03	3,96E+05	5,29E+05	1,24E-04	2,94E+06	5,24E+01	2,25E-06	3,57E-08	8,92E-09	3,57E-08
2-Methylhexadecane	1,70E+01	2,40E+02	3,40E-04	1,26E+06	1,69E+06	5,37E-05	3,90E+06	1,10E+00	1,05E-05	3,56E-07	8,89E-08	3,56E-07
3-Methylhexadecane	1,70E+01	2,40E+02	3,40E-04	1,26E+06	1,69E+06	5,37E-05	3,90E+06	1,10E+00	1,06E-05	3,56E-07	8,89E-08	3,56E-07
2,6,10-Trimethyletradecane	1,70E+01	2,40E+02	4,53E-04	1,05E+06	1,41E+06	6,22E-05	3,90E+06	2,89E+00	1,08E-05	2,68E-07	6,70E-08	2,68E-07
2-	1,80E+	2,54E	1,08E	2,56E	3,43E	3,07E	5,19E	2,73E	1,12E	3,05E	7,63E-	3,05E-

Methylhep tadecane	01	+02	-04	+06	+06	-05	+06	-01	-05	-07	08	07
3- Methylhep tadecane	1,80E+ 01	2,54E +02	1,08E -04	2,56E +06	3,43E +06	3,07E -05	5,19E +06	5,12E -01	1,13E -05	3,05E -07	7,63E- 08	3,05E- 07
2,6,10- Trimethyl pentadeca ne	1,80E+ 01	2,54E +02	1,44E -04	2,14E +06	2,87E +06	3,61E -05	5,19E +06	1,30E +00	1,15E -05	2,30E -07	5,75E- 08	2,30E- 07
2- Methyloct adecane	1,90E+ 01	2,69E +02	3,43E -05	5,22E +06	6,99E +06	1,63E -05	6,88E +06	2,48E -01	1,19E -05	2,62E -07	6,55E- 08	2,62E- 07
3- Methyloct adecane	1,90E+ 01	2,69E +02	3,43E -05	5,22E +06	6,99E +06	1,63E -05	6,88E +06	2,48E -01	1,21E -05	2,62E -07	6,55E- 08	2,62E- 07
Pristane	1,90E+ 01	2,69E +02	5,30E -05	3,99E +06	5,34E +06	2,14E -05	6,88E +06	5,84E -01	1,22E -05	1,71E -07	4,29E- 08	1,71E- 07
2- Methylnon adecane	2,00E+ 01	2,83E +02	1,09E -05	1,07E +07	1,43E +07	7,91E -06	9,14E +06	9,23E -02	1,26E -05	2,25E -07	5,62E- 08	2,25E- 07
3- Methylnon adecane	2,00E+ 01	2,83E +02	1,09E -05	1,07E +07	1,43E +07	7,91E -06	9,14E +06	9,23E -02	1,28E -05	2,25E -07	5,62E- 08	2,25E- 07
10- Methylnon adecane	2,00E+ 01	2,83E +02	1,09E -05	1,07E +07	1,43E +07	7,91E -06	9,14E +06	9,23E -02	1,28E -05	2,25E -07	5,62E- 08	2,25E- 07

Phytane	2,00E+ 01	2,83E +02	1,68E -05	8,14E +06	1,09E +07	1,07E -05	9,14E +06	4,44E -01	1,30E -05	1,47E -07	3,68E- 08	1,47E- 07
2,6,11,15-Tetramethylhexadecane	2,00E+ 01	2,83E +02	1,68E -05	8,14E +06	1,09E +07	1,07E -05	9,14E +06	4,44E -01	1,29E -05	1,47E -07	3,68E- 08	1,47E- 07
2-Methyleicosane	2,10E+ 01	2,97E +02	3,43E -06	2,18E +07	2,91E +07	3,45E -06	1,22E +07	3,88E -02	1,33E -05	1,93E -07	4,82E- 08	1,93E- 07
2,6,10,14-Tetramethylheptadecane	2,10E+ 01	2,97E +02	5,30E -06	1,66E +07	2,23E +07	4,86E -06	1,22E +07	2,16E -01	1,37E -05	1,26E -07	3,16E- 08	1,26E- 07
2,6,10,14-Tetramethyloctadecane	2,20E+ 01	3,11E +02	1,67E -06	3,40E +07	4,55E +07	1,96E -06	1,61E +07	1,10E -01	1,44E -05	1,08E -07	2,71E- 08	1,08E- 07
2,6,10,14-Tetramethylnonadecane	2,30E+ 01	3,25E +02	5,25E -07	6,97E +07	9,33E +07	6,89E -07	2,14E +07	5,53E -02	1,52E -05	9,30E -08	2,33E- 08	9,30E- 08
2,6,10,14,18-Pentamethylnonadecane	2,40E+ 01	3,39E +02	1,91E -07	1,31E +08	1,75E +08	2,44E -07	2,84E +07	4,55E -02	1,59E -05	6,93E -08	1,73E- 08	6,93E- 08

2,6,10,14,18- Pentamethyleicosane	2,50E+01	3,53E+02	5,97E-08	2,68E+08	3,59E+08	6,30E-08	3,77E+07	2,01E-02	1,67E-05	5,95E-08	1,49E+08	5,95E-08
2,2,4,4,6,8,8- heptamethylnonane	1,2E+01	1,70E+02	2,19E-03	3,97E+05	5,32E+05	9,26E-05	2,94E+06	3,61E+01	6,15E-06	5,93E-08	1,48E+08	5,93E-08
n-Heptylcyclopentane	1,20E+01	1,68E+02	1,24E-01	3,25E+04	4,35E+04	4,99E-04	1,42E+05	3,77E+01	7,16E-06	5,38E-07	1,35E+07	5,38E-07
n-Octylcyclopentane	1,30E+01	1,82E+02	4,05E-02	6,51E+04	8,71E+04	3,41E-04	1,87E+05	1,49E+01	7,86E-06	4,62E-07	1,15E+07	4,62E-07
n-Nonylcyclopentane	1,40E+01	1,96E+02	1,31E-02	1,31E+05	1,75E+05	2,31E-04	2,49E+05	6,05E+00	8,57E-06	3,96E-07	9,90E+08	3,96E-07
n-Decylcyclopentane	1,50E+01	2,10E+02	4,23E-03	2,64E+05	3,53E+05	1,53E-04	3,31E+05	1,31E+00	9,27E-06	3,40E-07	8,50E+08	3,40E-07
n-Undecylcyclopentane	1,60E+01	2,24E+02	1,36E-03	5,34E+05	7,15E+05	9,82E-05	4,40E+05	5,84E-01	9,98E-06	2,92E-07	7,30E+08	2,92E-07
iso-Heptylcyclopentane	1,20E+01	1,68E+02	1,44E-01	2,97E+04	3,97E+04	5,30E-04	1,42E+05	6,65E+01	7,15E-06	4,67E-07	1,17E+07	4,67E-07

iso- Octylcyclo pentane	1,30E+ 01	1,82E +02	4,68E -02	5,95E +04	7,96E +04	3,62E -04	1,87E +05	2,60E +01	7,86E -06	4,01E -07	1,00E- 07	4,01E- 07
iso- Nonylcyclo pentane	1,40E+ 01	1,96E +02	1,52E -02	1,20E +05	1,60E +05	2,45E -04	2,49E +05	1,04E +01	8,56E -06	3,44E -07	8,60E- 08	3,44E- 07
iso- Decylcyclo pentane	1,50E+ 01	2,10E +02	4,89E -03	2,41E +05	3,23E +05	1,63E -04	3,31E +05	4,25E +00	9,27E -06	2,95E -07	7,38E- 08	2,95E- 07
iso- Undecylcy clopentane	1,60E+ 01	2,24E +02	1,57E -03	4,88E +05	6,53E +05	1,05E -04	4,40E +05	1,79E +00	9,98E -06	2,53E -07	6,33E- 08	2,53E- 07
2- Methylhex ylcyclopentane	1,20E+ 01	1,68E +02	1,44E -01	2,97E +04	3,97E +04	5,30E -04	1,42E +05	6,65E +01	7,29E -06	4,67E -07	1,17E- 07	4,67E- 07
2- Methylhep tylcyclope ntane	1,30E+ 01	1,82E +02	4,68E -02	5,95E +04	7,96E +04	3,62E -04	1,87E +05	2,60E +01	8,00E -06	4,01E -07	1,00E- 07	4,01E- 07
2- Methyloct ylcyclopentane	1,40E+ 01	1,96E +02	1,52E -02	1,20E +05	1,60E +05	2,45E -04	2,49E +05	1,04E +01	8,71E -06	3,44E -07	8,60E- 08	3,44E- 07
2- Methylnon	1,50E+ 01	2,10E +02	4,89E -03	2,41E +05	3,23E +05	1,63E -04	3,31E +05	4,25E +00	9,41E -06	2,95E -07	7,38E- 08	2,95E- 07

ylcyclopentane												
2-Methyldecylcyclopentane	1,60E+01	2,24E+02	1,57E-03	4,88E+05	6,53E+05	1,05E-04	4,40E+05	1,79E+00	1,01E-05	2,53E-07	6,33E-08	2,53E-07
n-Hexylcyclohexane	1,20E+01	1,68E+02	1,24E-01	3,25E+04	4,35E+04	4,99E-04	1,42E+05	1,52E+01	8,82E-06	5,11E-07	1,28E-07	5,11E-07
n-Phenylcyclohexane	1,20E+01	1,60E+02	5,33E+00	3,16E+03	4,23E+03	2,47E-03	1,09E+03	5,32E+00	7,31E-06	1,74E-07	4,34E-08	1,74E-07
n-Heptylcyclohexane	1,30E+01	1,82E+02	4,05E-02	6,51E+04	8,71E+04	3,41E-04	1,87E+05	5,33E+00	9,53E-06	4,38E-07	1,10E-07	4,38E-07
n-Octylcyclohexane	1,40E+01	1,96E+02	1,31E-02	1,31E+05	1,75E+05	2,31E-04	2,49E+05	1,22E+00	1,02E-05	3,76E-07	9,41E-08	3,76E-07
n-Nonylcyclohexane	1,50E+01	2,10E+02	4,23E-03	2,64E+05	3,53E+05	1,53E-04	3,31E+05	3,31E-01	1,09E-05	3,23E-07	8,07E-08	3,23E-07
n-Decylcyclohexane	1,60E+01	2,24E+02	1,36E-03	5,34E+05	7,15E+05	9,82E-05	4,40E+05	1,37E-01	1,16E-05	2,77E-07	6,93E-08	2,77E-07
iso-Hexylcyclohexane	1,20E+01	1,68E+02	1,44E-01	2,97E+04	3,97E+04	5,30E-04	1,42E+05	6,09E+01	8,82E-06	4,44E-07	1,11E-07	4,44E-07

hexane												
iso-Heptylcyclohexane	1,30E+01	1,82E+02	4,68E-02	5,95E+04	7,96E+04	3,62E-04	1,87E+05	2,39E+01	9,52E-06	3,81E-07	9,52E-08	3,81E-07
iso-Octylcyclohexane	1,40E+01	1,96E+02	1,52E-02	1,20E+05	1,60E+05	2,45E-04	2,49E+05	9,57E+00	1,02E-05	3,27E-07	8,17E-08	3,27E-07
iso-Nonylcyclohexane	1,50E+01	2,10E+02	4,89E-03	2,41E+05	3,23E+05	1,63E-04	3,31E+05	3,92E+00	1,09E-05	2,80E-07	7,01E-08	2,80E-07
iso-Decylcyclohexane	1,60E+01	2,24E+02	1,57E-03	4,88E+05	6,53E+05	1,05E-04	4,40E+05	1,65E+00	1,16E-05	2,41E-07	6,02E-08	2,41E-07
1-Methylpentylcyclopentane	1,20E+01	1,68E+02	1,44E-01	2,97E+04	3,97E+04	5,30E-04	1,42E+05	6,09E+01	8,96E-06	4,44E-07	1,11E-07	4,44E-07
1-Methylhexylcyclohexane	1,30E+01	1,82E+02	4,68E-02	5,95E+04	7,96E+04	3,62E-04	1,87E+05	2,39E+01	9,67E-06	3,81E-07	9,52E-08	3,81E-07
1-Methylheptylcyclohexane	1,40E+01	1,96E+02	1,52E-02	1,20E+05	1,60E+05	2,45E-04	2,49E+05	9,57E+00	1,04E-05	3,27E-07	8,17E-08	3,27E-07
1-	1,50E+01	2,10E+02	4,89E-03	2,41E+05	3,23E+05	1,63E-04	3,31E+05	3,92E+00	1,11E-05	2,80E-07	7,01E-08	2,80E-07

Methyloctylcyclohexane	01	+02	-03	+05	+05	-04	+05	+00	-05	-07	08	07
1-Methylnonylcyclohexane	1,60E+01	2,24E+02	1,57E-03	4,88E+05	6,53E+05	1,05E-04	4,40E+05	1,65E+00	1,18E-05	2,41E-07	6,02E-08	2,41E-07
2-Methylpentylcyclopentane	1,20E+01	1,68E+02	1,44E-01	2,97E+04	3,97E+04	5,30E-04	1,42E+05	6,09E+01	8,96E-06	4,44E-07	1,11E-07	4,44E-07
2-Methylhexylcyclohexane	1,30E+01	1,82E+02	4,68E-02	5,95E+04	7,96E+04	3,62E-04	1,87E+05	2,39E+01	9,67E-06	3,81E-07	9,52E-08	3,81E-07
2-Methylheptylcyclohexane	1,40E+01	1,96E+02	1,52E-02	1,20E+05	1,60E+05	2,45E-04	2,49E+05	9,57E+00	1,04E-05	3,27E-07	8,17E-08	3,27E-07
2-Methyloctylcyclohexane	1,50E+01	2,10E+02	4,89E-03	2,41E+05	3,23E+05	1,63E-04	3,31E+05	3,92E+00	1,11E-05	2,80E-07	7,01E-08	2,80E-07
2-Methylnonylcyclohexane	1,60E+01	2,24E+02	1,57E-03	4,88E+05	6,53E+05	1,05E-04	4,40E+05	1,65E+00	1,18E-05	2,41E-07	6,02E-08	2,41E-07

3-Methylpentylcyclopentane	1,20E+01	1,68E+02	1,44E-01	2,97E+04	3,97E+04	5,30E-04	1,42E+05	6,09E+01	8,96E-06	4,44E-07	1,11E-07	4,44E-07
3-Methylhexylcyclohexane	1,30E+01	1,82E+02	4,68E-02	5,95E+04	7,96E+04	3,62E-04	1,87E+05	2,39E+01	9,67E-06	3,81E-07	9,52E-08	3,81E-07
3-Methylheptylcycloheptane	1,40E+01	1,96E+02	1,52E-02	1,20E+05	1,60E+05	2,45E-04	2,49E+05	9,57E+00	1,04E-05	3,27E-07	8,17E-08	3,27E-07
3-Methyloctylcyclohexane	1,50E+01	2,10E+02	4,89E-03	2,41E+05	3,23E+05	1,63E-04	3,31E+05	3,92E+00	1,11E-05	2,80E-07	7,01E-08	2,80E-07
3-Methylnonylcyclohexane	1,60E+01	2,24E+02	1,57E-03	4,88E+05	6,53E+05	1,05E-04	4,40E+05	1,65E+00	1,18E-05	2,41E-07	6,02E-08	2,41E-07
4-Methylhexylcyclohexane	1,30E+01	1,82E+02	4,68E-02	5,95E+04	7,96E+04	3,62E-04	1,87E+05	2,39E+01	9,67E-06	3,81E-07	9,52E-08	3,81E-07
4-Methylheptylcycloheptane	1,40E+01	1,96E+02	1,52E-02	1,20E+05	1,60E+05	2,45E-04	2,49E+05	9,57E+00	1,04E-05	3,27E-07	8,17E-08	3,27E-07

xane												
4-Methyloctylcyclohexane	1,50E+01	2,10E+02	4,89E-03	2,41E+05	3,23E+05	1,63E-04	3,31E+05	3,92E+00	1,11E-05	2,80E-07	7,01E-08	2,80E-07
4-Methylnonylcyclohexane	1,60E+01	2,24E+02	1,57E-03	4,88E+05	6,53E+05	1,05E-04	4,40E+05	1,65E+00	1,18E-05	2,41E-07	6,02E-08	2,41E-07
5-Methylheptylcyclohexane	1,40E+01	1,96E+02	1,52E-02	1,20E+05	1,60E+05	2,45E-04	2,49E+05	9,57E+00	1,04E-05	3,27E-07	8,17E-08	3,27E-07
5-Methyloctylcyclohexane	1,50E+01	2,10E+02	4,89E-03	2,41E+05	3,23E+05	1,63E-04	3,31E+05	3,92E+00	1,11E-05	2,80E-07	7,01E-08	2,80E-07
5-Methylnonylcyclohexane	1,60E+01	2,24E+02	1,57E-03	4,88E+05	6,53E+05	1,05E-04	4,40E+05	1,65E+00	1,18E-05	2,41E-07	6,02E-08	2,41E-07
6-Methyloctylcyclohexane	1,50E+01	2,10E+02	4,89E-03	2,41E+05	3,23E+05	1,63E-04	3,31E+05	3,92E+00	1,11E-05	2,80E-07	7,01E-08	2,80E-07
6-Methylnonylcyclohexane	1,60E+01	2,24E+02	1,57E-03	4,88E+05	6,53E+05	1,05E-04	4,40E+05	1,65E+00	1,18E-05	2,41E-07	6,02E-08	2,41E-07

ylcyclohexane	01	+02	-03	+05	+05	-04	+05	+00	-05	-07	08	07
7-Methylnonylcyclohexane	1,60E+01	2,24E+02	1,57E-03	4,88E+05	6,53E+05	1,05E-04	4,40E+05	1,65E+00	1,18E-05	2,41E-07	6,02E-08	2,41E-07
2,4-Dimethylpentylcyclopentane	1,30E+01	1,82E+02	5,41E-02	5,44E+04	7,28E+04	3,84E-04	1,87E+05	4,20E+01	9,66E-06	3,31E-07	8,27E-08	3,31E-07
2,4-Dimethylhexylcyclohexane	1,40E+01	1,96E+02	1,75E-02	1,09E+05	1,46E+05	2,60E-04	2,49E+05	1,65E+01	1,05E-05	2,84E-07	7,09E-08	2,84E-07
2,4-Dimethylheptylcyclohexane	1,50E+01	2,10E+02	5,65E-03	2,21E+05	2,95E+05	1,73E-04	3,31E+05	6,69E+00	1,12E-05	2,44E-07	6,09E-08	2,44E-07
2,4-Dimethyloctylcyclohexane	1,60E+01	2,24E+02	1,81E-03	4,46E+05	5,97E+05	1,12E-04	4,40E+05	2,77E+00	1,19E-05	2,09E-07	5,23E-08	2,09E-07
2,4-Dimethylnonylcyclohexane	1,70E+01	2,38E+02	5,80E-04	9,05E+05	1,21E+06	6,97E-05	5,83E+05	1,25E+00	1,26E-05	1,79E-07	4,48E-08	1,79E-07
1,2,3,4-	1,40E+01	1,96E+02	2,03E-03	1,00E+05	1,34E+05	2,76E-04	2,49E+05	1,22E+00	1,13E-05	1,78E-07	4,45E-08	1,78E-07

Tetraethyl cyclohexane	01	+02	-02	+05	+05	-04	+05	+01	-05	-06	07	06
1,2,3,5-Tetraethyl cyclohexane	1,40E+ 01	1,96E +02	2,03E -02	1,00E +05	1,34E +05	2,76E -04	2,49E +05	1,22E +01	1,13E -05	1,78E -06	4,45E- 07	1,78E- 06
1-Methyl- 2-pentylcyclohexane	1,20E+ 01	1,68E +02	1,44E -01	2,97E +04	3,97E +04	5,30E -04	1,42E +05	4,53E +01	8,96E -06	8,57E -07	2,14E- 07	8,57E- 07
1-Methyl- 3-pentylcyclohexane	1,20E+ 01	1,68E +02	1,44E -01	2,97E +04	3,97E +04	5,30E -04	1,42E +05	4,53E +01	8,96E -06	8,57E -07	2,14E- 07	8,57E- 07
1-Methyl- 4-pentylcyclohexane	1,20E+ 01	1,68E +02	1,44E -01	2,97E +04	3,97E +04	5,30E -04	1,42E +05	4,53E +01	8,96E -06	8,57E -07	2,14E- 07	8,57E- 07
1-Methyl- 2-hexylcyclohexane	1,30E+ 01	1,82E +02	4,68E -02	5,95E +04	7,96E +04	3,62E -04	1,87E +05	1,79E +01	9,67E -06	7,36E -07	1,84E- 07	7,36E- 07
1-Methyl- 3-hexylcyclohexane	1,30E+ 01	1,82E +02	4,68E -02	5,95E +04	7,96E +04	3,62E -04	1,87E +05	1,79E +01	9,67E -06	7,36E -07	1,84E- 07	7,36E- 07

1-Methyl- 4- hexylcyclo hexane	1,30E+ 01	1,82E +02	4,68E -02	5,95E +04	7,96E +04	3,62E -04	1,87E +05	1,79E +01	9,67E -06	7,36E -07	1,84E- 07	7,36E- 07
1-Methyl- 2- heptylcycl ohexane	1,40E+ 01	1,96E +02	1,52E -02	1,20E +05	1,60E +05	2,45E -04	2,49E +05	7,23E +00	1,04E -05	6,32E -07	1,58E- 07	6,32E- 07
1-Methyl- 3- heptylcycl ohexane	1,40E+ 01	1,96E +02	1,52E -02	1,20E +05	1,60E +05	2,45E -04	2,49E +05	7,23E +00	1,04E -05	6,32E -07	1,58E- 07	6,32E- 07
1-Methyl- 4- heptylcycl ohexane	1,40E+ 01	1,96E +02	1,52E -02	1,20E +05	1,60E +05	2,45E -04	2,49E +05	7,23E +00	1,04E -05	6,32E -07	1,58E- 07	6,32E- 07
1- cyclohexyl 4,8 dimethyl nonane	1,70E+ 01	2,38E +02	5,80E -04	9,05E +05	1,21E +06	6,97E -05	5,83E +05	1,25E +00	1,25E -05	1,79E -07	4,48E- 08	1,79E- 07
1- cyclohexyl 4,8 dimethyl decane	1,80E+ 01	2,52E +02	1,85E -04	1,84E +06	2,46E +06	4,10E -05	7,74E +05	5,41E -01	1,33E -05	1,54E -07	3,85E- 08	1,54E- 07
1-	1,90E+ 01	2,67E +02	5,87E -04	3,74E +06	5,01E +06	2,26E -05	1,02E +05	2,77E -01	1,40E -05	1,32E -07	3,30E- 08	1,32E- 07

cyclohexyl 4,8 dimethyl undecane	01	+02	-05	+06	+06	-05	+06	-01	-05	-07	08	07
1- cyclohexyl 4,8 dimethyl dodecane	2,00E+ 01	2,81E +02	1,86E -05	7,64E +06	1,02E +07	1,14E -05	1,37E +06	1,28E -01	1,48E -05	1,13E -07	2,83E- 08	1,13E- 07
1- cyclohexyl 4,8 dimethyl tridecane	2,10E+ 01	2,95E +02	5,88E -06	1,56E +07	2,09E +07	5,23E -06	1,81E +06	5,35E -02	1,55E -05	9,73E -08	2,43E- 08	9,73E- 08
1- cyclohexyl 4,8,12 trimethyl tridecane	2,20E+ 01	3,09E +02	2,14E -06	2,92E +07	3,90E +07	2,42E -06	2,40E +06	4,43E -02	1,62E -05	7,25E -08	1,81E- 08	7,25E- 08
1- cyclohexyl 4,8,12 trimethyl tetradecane	2,30E+ 01	3,23E +02	6,74E -07	5,98E +07	8,00E +07	8,76E -07	3,19E +06	1,92E -02	1,70E -05	6,22E -08	1,56E- 08	6,22E- 08
1- cyclohexyl 4,8,12	2,40E+ 01	3,37E +02	2,12E -07	1,23E +08	1,64E +08	2,73E -07	4,23E +06	8,31E -03	1,77E -05	5,34E -08	1,34E- 08	5,34E- 08

trimethyl pentadeca ne												
1,5- Dimethyl- 1-(3,7- dimethylh eptyl)cyclo hexane	1,70E+ 01	2,52E +02	2,14E -04	1,68E +06	2,25E +06	4,43E -05	7,74E +05	5,67E -01	1,35E -05	4,99E -07	1,25E- 07	4,99E- 07
1,5- Dimethyl- 1-(3,7- dimethylc tyl)cyclohe xane	1,80E+ 01	2,52E +02	2,47E -04	1,54E +06	2,06E +06	4,78E -05	7,74E +05	8,99E -01	1,35E -05	4,34E -07	1,08E- 07	4,34E- 07
1,5- Dimethyl- 1-(3,7- dimethyln onyl)cyclo hexane	1,90E+ 01	2,67E +02	7,84E -05	3,13E +06	4,19E +06	2,68E -05	1,02E +06	4,21E -01	1,43E -05	3,72E -07	9,30E- 08	3,72E- 07
1,5- Dimethyl- 1-(3,7- dimethyld ecyl)cycloh exane	2,00E+ 01	2,81E +02	2,48E -05	6,38E +06	8,54E +06	1,38E -05	1,37E +06	2,07E -01	1,50E -05	3,19E -07	7,98E- 08	3,19E- 07
1,5-	2,10E+ 01	2,95E +02	7,85E -05	1,30E +06	1,75E +06	6,50E -05	1,81E +06	9,15E -01	1,57E -05	2,74E -07	6,85E- 08	2,74E- 07

Dimethyl- 1-(3,7- dimethylu ndecyl)cyc lohexane	01	+02	-06	+07	+07	-06	+06	-02	-05	-07	08	07
1,5- Dimethyl- 1-(3,7- dimethyl odecyl)cycl ohexane	2,20E+ 01	3,09E +02	2,47E -06	2,67E +07	3,57E +07	2,73E -06	2,40E +06	3,88E -02	1,64E -05	2,35E -07	5,88E- 08	2,35E- 07
1,5- Dimethyl- 1-(3,7,11- trimethyl odecyl)cycl ohexane	2,30E+ 01	3,23E +02	8,99E -07	5,00E +07	6,68E +07	1,16E -06	3,19E +06	3,21E -02	1,71E -05	1,75E -07	4,38E- 08	1,75E- 07
1,5- Dimethyl- 1-(3,7,11- trimethyl ridecyl)cyc lohexane	2,40E+ 01	3,37E +02	2,82E -07	1,02E +08	1,37E +08	3,75E -07	4,23E +06	1,40E -02	1,80E -05	1,50E -07	3,76E- 08	1,50E- 07
1,5- Dimethyl- 1-(3,7,11- trimethyl etradecyl)c	2,50E+ 01	3,51E +02	8,85E -08	2,10E +08	2,81E +08	1,03E -07	5,63E +06	6,04E -03	1,87E -05	1,29E -07	3,23E- 08	1,29E- 07

cyclohexane												
1,5-Dimethyl-1-(3,7,11-trimethylpentadecyl)cyclohexane	2,60E+01	3,65E+02	2,77E-08	4,32E+08	5,78E+08	2,33E-08	7,47E+06	2,36E-03	1,94E-05	1,11E-07	2,77E-08	1,11E-07
n-Undecylcyclohexane	1,70E+01	2,38E+02	4,34E-04	1,08E+06	1,45E+06	6,04E-05	5,83E+05	4,75E-01	1,24E-05	2,38E-07	5,95E-08	2,38E-07
n-Dodecylcyclohexane	1,80E+01	2,52E+02	1,38E-04	2,20E+06	2,94E+06	3,50E-05	7,74E+05	9,81E-02	1,31E-05	2,04E-07	5,10E-08	2,04E-07
n-Tridecylcyclohexane	1,90E+01	2,67E+02	4,40E-05	4,48E+06	5,99E+06	1,89E-05	1,02E+06	1,22E-03	1,38E-05	1,75E-07	4,38E-08	1,75E-07
n-Tetradecylcyclohexane	2,00E+01	2,81E+02	1,39E-05	9,14E+06	1,22E+07	9,36E-06	1,37E+06	2,17E-02	1,45E-05	1,50E-07	3,76E-08	1,50E-07
n-Pentadecylcyclohexane	2,10E+01	2,95E+02	4,40E-06	1,87E+07	2,50E+07	4,18E-06	1,81E+06	4,61E-05	1,52E-05	1,29E-07	3,23E-08	1,29E-07
n-Dodecylcyclohexane	1,70E+01	2,38E+02	4,34E-04	1,08E+06	1,45E+06	6,04E-05	5,83E+05	4,84E-01	1,07E-05	2,50E-07	6,26E-08	2,50E-07

clopentane	01	+02	-04	+06	+06	-05	+05	-01	-05	-07	08	07
n- Tridecylcy clopentane	1,80E+ 01	2,52E +02	1,38E -04	2,20E +06	2,94E +06	3,50E -05	7,74E +05	1,87E -01	1,14E -05	2,15E -07	5,37E- 08	2,15E- 07
n- Tetradecyl cyclopenta ne	1,90E+ 01	2,67E +02	4,40E -05	4,48E +06	5,99E +06	1,89E -05	1,02E +06	7,51E -02	1,21E -05	1,84E -07	4,61E- 08	1,84E- 07
n- Pentadecyl cyclopenta ne	2,00E+ 01	2,81E +02	1,39E -05	9,14E +06	1,22E +07	9,36E -06	1,37E +06	3,13E -02	1,28E -05	1,58E -07	3,96E- 08	1,58E- 07
n- Hexadecyl cyclopenta ne	2,10E+ 01	2,95E +02	4,40E -06	1,87E +07	2,50E +07	4,18E -06	1,81E +06	1,16E -02	1,35E -05	1,36E -07	3,40E- 08	1,36E- 07
2- Ethyldec in	1,20E+ 01	1,66E +02	8,12E -01	1,01E +04	1,36E +04	1,09E -03	6,24E +04	3,55E +01	1,10E -05	1,45E -07	3,62E- 08	1,45E- 07
2-n- Propyldec alin	1,30E+ 01	1,80E +02	2,65E -01	2,03E +04	2,72E +04	7,32E -04	8,28E +04	1,41E +01	1,17E -05	1,24E -07	3,10E- 08	1,24E- 07
2-n- Butyldec in	1,40E+ 01	1,94E +02	8,59E -02	4,08E +04	5,46E +04	4,95E -04	1,10E +05	5,72E +00	1,24E -05	1,07E -07	2,66E- 08	1,07E- 07
2-n-	1,50E+ 01	2,08E +02	2,77E -02	8,23E +04	1,10E +04	3,34E -04	1,46E +05	2,39E +00	1,31E -05	9,14E -07	2,29E- 08	9,14E- 07

Pentyldecalin	01	+02	-02	+04	+05	-04	+05	+00	-05	-08	08	08
2-n-Hexyldecalin	1,60E+ 01	2,22E +02	8,91E -03	1,66E +05	2,23E +05	2,22E -04	1,93E +05	1,09E +00	1,38E -05	7,85E -08	1,96E- 08	7,85E- 08
2-n-Heptyldecalin	1,70E+ 01	2,36E +02	2,85E -03	3,37E +05	4,51E +05	1,45E -04	2,57E +05	4,15E -01	1,46E -05	6,74E -08	1,68E- 08	6,74E- 08
2-Isopropyldecalin	1,30E+ 01	1,80E +02	3,06E -01	1,86E +04	2,48E +04	7,78E -04	8,28E +04	2,45E +01	1,17E -05	1,08E -07	2,70E- 08	1,08E- 07
2-Isobutyldecalin	1,40E+ 01	1,94E +02	9,93E -02	3,73E +04	4,99E +04	5,25E -04	1,10E +05	9,83E +00	1,24E -05	9,25E -08	2,31E- 08	9,25E- 08
2-Isopentyldecalin	1,50E+ 01	2,08E +02	3,20E -02	7,53E +04	1,01E +05	3,54E -04	1,46E +05	4,03E +00	1,31E -05	7,94E -08	1,99E- 08	7,94E- 08
2-Isohexyldecalin	1,60E+ 01	2,22E +02	1,03E -02	1,52E +05	2,04E +05	2,36E -04	1,93E +05	1,69E +00	1,38E -05	6,82E -08	1,70E- 08	6,82E- 08
2-Isoheptyldecalin	1,70E+ 01	2,36E +02	3,29E -03	3,08E +05	4,13E +05	1,54E -04	2,57E +05	7,97E -01	1,45E -05	5,85E -08	1,46E- 08	5,85E- 08
2,3-Dimethyldecalin	1,20E+ 01	1,66E +02	9,38E -01	9,27E +03	1,24E +04	1,16E -03	6,24E +04	4,67E +01	1,10E -05	2,43E -07	6,07E- 08	2,43E- 07

2,4-Dimethyld ecalin	1,20E+ 01	1,66E +02	9,38E -01	9,27E +03	1,24E +04	1,16E -03	6,24E +04	4,67E +01	1,10E -05	2,43E -07	6,07E- 08	2,43E- 07
2,5-Dimethyld ecalin	1,20E+ 01	1,66E +02	9,38E -01	9,27E +03	1,24E +04	1,16E -03	6,24E +04	4,67E +01	1,10E -05	2,43E -07	6,07E- 08	2,43E- 07
2,6-Dimethyld ecalin	1,20E+ 01	1,66E +02	9,38E -01	9,27E +03	1,24E +04	1,16E -03	6,24E +04	4,67E +01	1,10E -05	2,43E -07	6,07E- 08	2,43E- 07
2,7-Dimethyld ecalin	1,20E+ 01	1,66E +02	9,38E -01	9,27E +03	1,24E +04	1,16E -03	6,24E +04	4,67E +01	1,10E -05	2,43E -07	6,07E- 08	2,43E- 07
2,8-Dimethyld ecalin	1,20E+ 01	1,66E +02	9,38E -01	9,27E +03	1,24E +04	1,16E -03	6,24E +04	4,67E +01	1,10E -05	2,43E -07	6,07E- 08	2,43E- 07
2,3,4-Trimethyl decalin	1,30E+ 01	1,80E +02	3,54E -01	1,70E +04	2,27E +04	8,27E -04	8,28E +04	2,40E +01	1,18E -05	3,50E -07	8,74E- 08	3,50E- 07
2,3,5-Trimethyl decalin	1,30E+ 01	1,80E +02	3,54E -01	1,70E +04	2,27E +04	8,27E -04	8,28E +04	2,40E +01	1,18E -05	3,50E -07	8,74E- 08	3,50E- 07
2,3,6-Trimethyl decalin	1,30E+ 01	1,80E +02	3,54E -01	1,70E +04	2,27E +04	8,27E -04	8,28E +04	2,40E +01	1,18E -05	3,50E -07	8,74E- 08	3,50E- 07
2,3,7-Trimethyl	1,30E+ 01	1,80E +02	3,54E -01	1,70E +04	2,27E +04	8,27E -04	8,28E +04	2,40E +01	1,18E -05	3,50E -07	8,74E- 08	3,50E- 07

decalin	01	+02	-01	+04	+04	-04	+04	+01	-05	-07	08	07
2,3,8-Trimethyl decalin	1,30E+ 01	1,80E +02	3,54E -01	1,70E +04	2,27E +04	8,27E -04	8,28E +04	2,40E +01	1,18E -05	3,50E -07	8,74E- 08	3,50E- 07
2,4,5-Trimethyl decalin	1,30E+ 01	1,80E +02	3,54E -01	1,70E +04	2,27E +04	8,27E -04	8,28E +04	2,40E +01	1,18E -05	3,50E -07	8,74E- 08	3,50E- 07
2,4,6-Trimethyl decalin	1,30E+ 01	1,80E +02	3,54E -01	1,70E +04	2,27E +04	8,27E -04	8,28E +04	2,40E +01	1,18E -05	3,50E -07	8,74E- 08	3,50E- 07
2,4,7-Trimethyl decalin	1,30E+ 01	1,80E +02	3,54E -01	1,70E +04	2,27E +04	8,27E -04	8,28E +04	2,40E +01	1,18E -05	3,50E -07	8,74E- 08	3,50E- 07
2,4,8-Trimethyl decalin	1,30E+ 01	1,80E +02	3,54E -01	1,70E +04	2,27E +04	8,27E -04	8,28E +04	2,40E +01	1,18E -05	3,50E -07	8,74E- 08	3,50E- 07
2,5,6-Trimethyl decalin	1,30E+ 01	1,80E +02	3,54E -01	1,70E +04	2,27E +04	8,27E -04	8,28E +04	2,40E +01	1,18E -05	3,50E -07	8,74E- 08	3,50E- 07
2,5,7-Trimethyl decalin	1,30E+ 01	1,80E +02	3,54E -01	1,70E +04	2,27E +04	8,27E -04	8,28E +04	2,40E +01	1,18E -05	3,50E -07	8,74E- 08	3,50E- 07
2,5,8-Trimethyl decalin	1,30E+ 01	1,80E +02	3,54E -01	1,70E +04	2,27E +04	8,27E -04	8,28E +04	2,40E +01	1,18E -05	3,50E -07	8,74E- 08	3,50E- 07

2,6,7- Trimethyl decalin	1,30E+ 01	1,80E +02	3,54E -01	1,70E +04	2,27E +04	8,27E -04	8,28E +04	2,40E +01	1,18E -05	3,50E -07	8,74E- 08	3,50E- 07
2,6,8- Trimethyl decalin	1,30E+ 01	1,80E +02	3,54E -01	1,70E +04	2,27E +04	8,27E -04	8,28E +04	2,40E +01	1,18E -05	3,50E -07	8,74E- 08	3,50E- 07
2,7,8- Trimethyl decalin	1,30E+ 01	1,80E +02	3,06E -01	1,86E +04	2,48E +04	7,78E -04	8,28E +04	1,84E +01	1,19E -05	2,08E -07	5,21E- 08	2,08E- 07
2,3,4,5- Tetrameth yldecalin	1,40E+ 01	1,94E +02	1,33E -01	3,12E +04	4,17E +04	5,92E -04	1,10E +05	1,25E +01	1,26E -05	5,04E -07	1,26E- 07	5,04E- 07
2,3,4,6- Tetrameth yldecalin	1,40E+ 01	1,94E +02	1,33E -01	3,12E +04	4,17E +04	5,92E -04	1,10E +05	1,25E +01	1,26E -05	5,04E -07	1,26E- 07	5,04E- 07
2,3,4,7- Tetrameth yldecalin	1,40E+ 01	1,94E +02	1,33E -01	3,12E +04	4,17E +04	5,92E -04	1,10E +05	1,25E +01	1,26E -05	5,04E -07	1,26E- 07	5,04E- 07
2,3,4,8- Tetrameth yldecalin	1,40E+ 01	1,94E +02	1,33E -01	3,12E +04	4,17E +04	5,92E -04	1,10E +05	1,25E +01	1,26E -05	5,04E -07	1,26E- 07	5,04E- 07
2,4,5,6- Tetrameth yldecalin	1,40E+ 01	1,94E +02	1,33E -01	3,12E +04	4,17E +04	5,92E -04	1,10E +05	1,25E +01	1,26E -05	5,04E -07	1,26E- 07	5,04E- 07
2,4,5,7- Tetrameth	1,40E+ 01	1,94E +02	1,33E -01	3,12E +04	4,17E +04	5,92E -04	1,10E +05	1,25E +01	1,26E -05	5,04E -07	1,26E- 07	5,04E- 07

yldecalin	01	+02	-01	+04	+04	-04	+05	+01	-05	-07	07	07
2,4,5,8-Tetramethyldecalin	1,40E+01	1,94E+02	1,33E-01	3,12E+04	4,17E+04	5,92E-04	1,10E+05	1,25E+01	1,26E-05	5,04E-07	1,26E-07	5,04E-07
2,5,6,7-Tetramethyldecalin	1,40E+01	1,94E+02	1,33E-01	3,12E+04	4,17E+04	5,92E-04	1,10E+05	1,25E+01	1,26E-05	5,04E-07	1,26E-07	5,04E-07
2,5,6,8-Tetramethyldecalin	1,40E+01	1,94E+02	1,33E-01	3,12E+04	4,17E+04	5,92E-04	1,10E+05	1,25E+01	1,26E-05	5,04E-07	1,26E-07	5,04E-07
2,6,7,8-Tetramethyldecalin	1,40E+01	1,94E+02	1,33E-01	3,12E+04	4,17E+04	5,92E-04	1,10E+05	1,25E+01	1,26E-05	5,04E-07	1,26E-07	5,04E-07
2,3,4,5,6-Pentamethyldecalin	1,50E+01	2,08E+02	4,94E-02	5,75E+04	7,70E+04	4,23E-04	1,46E+05	6,59E+00	1,35E-05	7,25E-07	1,81E-07	7,25E-07
2,3,4,5,7-Pentamethyldecalin	1,50E+01	2,08E+02	4,94E-02	5,75E+04	7,70E+04	4,23E-04	1,46E+05	6,59E+00	1,35E-05	7,25E-07	1,81E-07	7,25E-07
2,3,4,5,8-Pentamethyldecalin	1,50E+01	2,08E+02	4,94E-02	5,75E+04	7,70E+04	4,23E-04	1,46E+05	6,59E+00	1,35E-05	7,25E-07	1,81E-07	7,25E-07
2,4,5,6,7-Pentamethyldecalin	1,50E+01	2,08E+02	4,94E-02	5,75E+04	7,70E+04	4,23E-04	1,46E+05	6,59E+00	1,35E-05	7,25E-07	1,81E-07	7,25E-07

2,4,5,6,8-Pentamethyldecalin	1,50E+01	2,08E+02	4,94E-02	5,75E+04	7,70E+04	4,23E-04	1,46E+05	6,59E+00	1,35E-05	7,25E-07	1,81E-07	7,25E-07
2,5,6,7,8-Pentamethyldecalin	1,50E+01	2,08E+02	4,94E-02	5,75E+04	7,70E+04	4,23E-04	1,46E+05	6,59E+00	1,35E-05	7,25E-07	1,81E-07	7,25E-07
2,3,4,5,6,7-Hexamethyldecalin	1,60E+01	2,22E+02	1,83E-02	1,06E+05	1,42E+05	3,00E-04	1,93E+05	3,52E+00	1,43E-05	1,04E-06	2,61E-07	1,04E-06
2,3,4,5,6,8-Hexamethyldecalin	1,60E+01	2,22E+02	1,83E-02	1,06E+05	1,42E+05	3,00E-04	1,93E+05	3,52E+00	1,43E-05	1,04E-06	2,61E-07	1,04E-06
2,3,4,5,7,8-Hexamethyldecalin	1,60E+01	2,22E+02	1,83E-02	1,06E+05	1,42E+05	3,00E-04	1,93E+05	3,52E+00	1,43E-05	1,04E-06	2,61E-07	1,04E-06
2,3,4,5,6,7,8-Heptamethyldecalin	1,70E+01	2,36E+02	6,78E-03	1,97E+05	2,64E+05	2,11E-04	2,57E+05	1,91E+00	1,52E-05	1,50E-06	3,76E-07	1,50E-06
Octamethyldecalin	1,80E+01	2,50E+02	2,50E-03	3,66E+05	4,90E+05	1,45E-04	3,41E+05	1,01E+00	1,60E-05	2,17E-06	5,42E-07	2,17E-06
isopropylhexaydroindane	1,20E+01	1,66E+02	9,38E-01	9,27E+03	1,24E+04	1,16E-03	6,24E+04	6,83E+01	8,95E-06	1,32E-07	3,31E-08	1,32E-07
isopentylhexaydroindane	1,40E+01	1,94E+02	9,93E-01	3,73E+03	4,99E+03	5,25E-03	1,10E+04	1,07E+01	1,05E-06	9,74E-07	2,44E-08	9,74E-07

ndane	01	+02	-02	+04	+04	-04	+05	+01	-05	-08	08	08
isoheptyl												
hexahydro	1,60E+	2,22E	1,03E	1,52E	2,04E	2,36E	1,93E	1,83E	1,19E	7,18E	1,79E-	7,18E-
indane	01	+02	-02	+05	+05	-04	+05	+00	-05	-08	08	08
2,6												
dimethyl												
heptyl												
hexahydro	1,80E+	2,50E	1,21E	5,73E	7,66E	1,04E	3,41E	6,32E	1,33E	4,59E	1,15E-	4,59E-
indane	01	+02	-03	+05	+05	-04	+05	-01	-05	-08	08	08
2,6												
dimethyl												
nonyl												
hexahydro	2,00E+	2,79E	1,22E	2,38E	3,18E	3,60E	6,02E	1,02E	1,49E	3,38E	8,45E-	3,38E-
indane	01	+02	-04	+06	+06	-05	+05	-01	-05	-08	09	08
2,6,9												
trimethyl												
decyl												
hexahydro	2,20E+	3,07E	1,41E	9,08E	1,21E	1,03E	1,06E	3,45E	1,63E	2,16E	5,40E-	2,16E-
indane	01	+02	-05	+06	+07	-05	+06	-02	-05	-08	09	08
2,6,9												
trimethyl												
dodecyl												
hexahydro	2,40E+	3,35E	1,39E	3,81E	5,10E	1,79E	1,87E	6,48E	1,78E	1,59E	3,98E-	1,59E-
indane	01	+02	-06	+07	+07	-06	+06	-03	-05	-08	09	08
2,6,9,12												
tetramethy	2,60E+	3,63E	1,58E	1,47E	1,97E	2,11E	3,29E	2,29E	1,93E	1,02E	2,55E-	1,02E-
l tridecyl	01	+02	-07	+08	+08	-07	+06	-03	-05	-08	09	08

hexahydro indane												
2,4 dimethylp entyl-2- decalin	1,70E+ 01	2,36E +02	3,80E -03	2,82E +05	3,77E +05	1,64E -04	2,57E +05	1,28E +00	1,47E -05	5,08E -08	1,27E- 08	5,08E- 08
2,4 dimethylh exyl-2- decalin	1,80E+ 01	2,50E +02	1,21E -03	5,73E +05	7,66E +05	1,04E -04	3,41E +05	5,89E -01	1,55E -05	4,36E -08	1,09E- 08	4,36E- 08
2,4 dimethylh eptyl-2- decalin	1,90E+ 01	2,64E +02	3,85E -04	1,17E +06	1,56E +06	6,30E -05	4,53E +05	2,52E -01	1,62E -05	3,74E -08	9,35E- 09	3,74E- 08
2,4 dimethyloc tyl-2- decalin	2,00E+ 01	2,79E +02	1,22E -04	2,38E +06	3,18E +06	3,60E -05	6,02E +05	1,01E -01	1,69E -05	3,21E -08	8,03E- 09	3,21E- 08
2,4,6 trimethylo ctyl-2- decalin	2,10E+ 01	2,93E +02	4,46E -05	4,44E +06	5,94E +06	2,09E -05	7,99E +05	8,89E -02	1,78E -05	2,39E -08	5,98E- 09	2,39E- 08
2,4,6 trimethyln onyl-2- decalin	2,20E+ 01	3,07E +02	1,41E -05	9,08E +06	1,21E +07	1,03E -05	1,06E +06	3,44E -02	1,85E -05	2,05E -08	5,13E- 09	2,05E- 08
2,4,6	2,30E+ 01	3,21E +02	4,43E -05	1,86E +06	2,49E +07	4,57E -05	1,41E +06	1,49E -02	1,92E -05	1,76E -08	4,41E- 09	1,76E- 08

trimethyldecalin	01	+02	-06	+07	+07	-06	+06	-02	-05	-08	09	08
2,4,6-trimethylundecyl-2-decalin	2,40E+01	3,35E+02	1,39E-06	3,81E+07	5,10E+07	1,79E-06	1,87E+06	6,48E-03	1,99E-05	1,51E-08	3,78E-09	1,51E-08
2,4,6-trimethyldodecyl-2-decalin	2,50E+01	3,49E+02	4,36E-07	7,83E+07	1,05E+08	6,12E-07	2,48E+06	2,79E-03	2,06E-05	1,30E-08	3,24E-09	1,30E-08
4,8-dimethyldodecyl-2-decalin	2,40E+01	3,35E+02	1,20E-06	4,17E+07	5,58E+07	1,57E-06	1,87E+06	2,85E-03	1,98E-05	1,74E-08	4,35E-09	1,74E-08
2,4,6,10,14-pentamethylundecyl-2-decalin	2,60E+01	3,63E+02	1,82E-07	1,34E+08	1,80E+08	2,49E-07	3,29E+06	4,85E-03	2,15E-05	8,40E-09	2,10E-09	8,40E-09
2,4,6,10,14-pentamethyldodecyl-2-decalin	2,70E+01	3,07E+02	1,41E-05	9,08E+06	1,21E+07	1,03E-05	1,06E+06	3,45E-02	1,63E-05	2,16E-08	5,40E-09	2,16E-08
2,4,6,10,14-pentamethyltridecyl-2-decalin	2,80E+01	3,91E+02	1,78E-08	5,69E+08	7,61E+08	1,33E-08	5,80E+06	8,05E-04	2,30E-05	6,19E-09	1,55E-09	6,19E-09

2,4,6,10 tetramethy ltetradecyl -2-decalin	2,90E+ 01	4,05E +02	5,54E -09	1,17E +09	1,57E +09	2,23E -09	7,71E +06	3,41E -04	2,37E -05	5,31E -09	1,33E- 09	5,31E- 09
2,4,6,10,14 pentameth yldodecyl- 2-decalin	2,70E+ 01	4,19E +02	1,73E -09	2,42E +09	3,23E +09	2,96E -10	1,02E +07	1,43E -04	2,44E -05	4,56E -09	1,14E- 09	4,56E- 09
1- Undecene	1,10E+ 01	1,54E +02	3,43E -01	1,73E +04	2,31E +04	6,98E -04	1,50E +05	6,57E +01	2,70E -05	1,00E -06	2,50E- 07	1,00E- 06
1- Dodecene	1,20E+ 01	1,68E +02	1,13E -01	3,45E +04	4,62E +04	4,79E -04	1,99E +05	2,12E +01	2,77E -05	8,58E -07	2,15E- 07	8,58E- 07
1- Tridecene	1,30E+ 01	1,82E +02	3,67E -02	6,91E +04	9,25E +04	3,28E -04	2,64E +05	8,51E +00	2,84E -05	7,37E -07	1,84E- 07	7,37E- 07
1- Tetradec ne	1,40E+ 01	1,96E +02	1,19E -02	1,39E +05	1,86E +05	2,22E -04	3,50E +05	2,00E +00	2,91E -05	6,32E -07	1,58E- 07	6,32E- 07
1- Pentadec ne	1,50E+ 01	2,10E +02	3,84E -03	2,80E +05	3,75E +05	1,47E -04	4,65E +05	6,05E -01	2,98E -05	5,43E -07	1,36E- 07	5,43E- 07
2- Undecene	1,10E+ 01	1,54E +02	4,01E -01	1,57E +04	2,10E +04	7,45E -04	1,77E +05	8,31E +01	1,24E -04	1,43E -06	3,59E- 07	1,43E- 06
2- Dodecene	1,20E+ 01	1,68E +02	1,32E -01	3,14E +04	4,19E +04	5,11E -04	2,35E +05	3,93E +01	1,25E -04	1,23E -06	3,08E- 07	1,23E- 06
2-	1,30E+ 01	1,82E +02	4,29E -03	6,28E +05	8,40E +05	3,49E -04	3,12E +05	1,56E +01	1,25E -04	1,06E -06	2,64E- 07	1,06E- 06

Tridecene	01	+02	-02	+04	+04	-04	+05	+01	-04	-06	07	06
2-Tetradecene	1,40E+ 01	1,96E +02	1,39E -02	1,26E +05	1,69E +05	2,36E -04	4,13E +05	6,31E +00	1,26E -04	9,07E -07	2,27E- 07	9,07E- 07
2-Pentadecene	1,50E+ 01	2,10E +02	4,48E -03	2,55E +05	3,41E +05	1,57E -04	5,49E +05	2,61E +00	1,27E -04	7,78E -07	1,95E- 07	7,78E- 07
9-Methyl-1-Undecene	1,20E+ 01	1,68E +02	1,30E -01	3,15E +04	4,22E +04	5,09E -04	1,99E +05	9,99E +01	2,79E -05	7,46E -07	1,86E- 07	7,46E- 07
10-Methyl-1-Dodecene	1,30E+ 01	1,82E +02	4,25E -02	6,32E +04	8,46E +04	3,48E -04	2,64E +05	3,88E +01	2,86E -05	6,40E -07	1,60E- 07	6,40E- 07
11-Methyl-1-Tridecene	1,40E+ 01	1,96E +02	1,38E -02	1,27E +05	1,70E +05	2,36E -04	3,50E +05	1,53E +01	2,93E -05	5,49E -07	1,37E- 07	5,49E- 07
12-Methyl-1-Tetradecene	1,50E+ 01	2,10E +02	4,44E -03	2,56E +05	3,43E +05	1,56E -04	4,65E +05	6,23E +00	3,00E -05	4,71E -07	1,18E- 07	4,71E- 07
9-Methyl-2-Undecene	1,20E+ 01	1,68E +02	1,52E -01	2,87E +04	3,83E +04	5,42E -04	2,35E +05	6,95E +01	1,25E -04	1,07E -06	2,67E- 07	1,07E- 06
10-Methyl-2-Dodecene	1,30E+ 01	1,82E +02	4,96E -02	5,74E +04	7,68E +04	3,71E -04	3,12E +05	2,72E +01	1,26E -04	9,18E -07	2,29E- 07	9,18E- 07

11-Methyl-2-Tridecene	1,40E+01	1,96E+02	1,61E-02	1,15E+05	1,54E+05	2,51E-04	4,13E+05	1,08E+01	1,26E-04	7,87E-07	1,97E-07	7,87E-07
12-Methyl-2-Tetradecene	1,50E+01	2,10E+02	5,18E-03	2,33E+05	3,12E+05	1,67E-04	5,49E+05	4,43E+00	1,27E-04	6,76E-07	1,69E-07	6,76E-07
8-Ethyl-1-Decene	1,20E+01	1,68E+02	1,30E-01	3,15E+04	4,22E+04	5,09E-04	1,99E+05	9,99E+01	2,81E-05	7,46E-07	1,86E-07	7,46E-07
9-Ethyl-1-Undecene	1,20E+01	1,68E+02	1,30E-01	3,15E+04	4,22E+04	5,09E-04	1,99E+05	9,99E+01	2,79E-05	7,46E-07	1,86E-07	7,46E-07
10-Ethyl-1-Dodecene	1,40E+01	1,96E+02	1,38E-02	1,27E+05	1,70E+05	2,36E-04	3,50E+05	1,53E+01	2,95E-05	5,49E-07	1,37E-07	5,49E-07
11-Ethyl-1-Tridecene	1,50E+01	2,10E+02	4,44E-03	2,56E+05	3,43E+05	1,56E-04	4,65E+05	6,23E+00	3,02E-05	4,71E-07	1,18E-07	4,71E-07
12-Ethyl-1-Tetradecene	1,60E+01	2,24E+02	1,42E-03	5,19E+05	6,94E+05	1,00E-04	6,18E+05	2,59E+00	3,09E-05	4,04E-07	1,01E-07	4,04E-07
8-Ethyl-2-Decene	1,20E+01	1,68E+02	1,52E-01	2,87E+04	3,83E+04	5,42E-04	2,35E+05	6,95E+01	1,25E-04	1,07E-06	2,67E-07	1,07E-06
9-Ethyl-2-Undecene	1,30E+01	1,82E+02	4,96E-02	5,74E+04	7,68E+04	3,71E-04	3,12E+05	2,72E+01	1,26E-04	9,18E-07	2,29E-07	9,18E-07

10-Ethyl- 2- Dodecene	1,40E+ 01	1,96E +02	1,61E -02	1,15E +05	1,54E +05	2,51E -04	4,13E +05	1,08E +01	1,27E -04	7,87E -07	1,97E- 07	7,87E- 07
11-Ethyl- 2- Tridecene	1,50E+ 01	2,10E +02	5,18E -03	2,33E +05	3,12E +05	1,67E -04	5,49E +05	4,43E +00	1,27E -04	6,76E -07	1,69E- 07	6,76E- 07
5,8- Dimethyl- 1-Decene	1,20E+ 01	1,68E +02	1,51E -01	2,88E +04	3,86E +04	5,40E -04	1,99E +05	1,77E +02	2,80E -05	6,48E -07	1,62E- 07	6,48E- 07
6,9- Dimethyl- 1- Undecene	1,30E+ 01	1,82E +02	4,91E -02	5,78E +04	7,73E +04	3,69E -04	2,64E +05	6,84E +01	2,87E -05	5,56E -07	1,39E- 07	5,56E- 07
7,10- Dimethyl- 1- Dodecene	1,40E+ 01	1,96E +02	1,59E -02	1,16E +05	1,55E +05	2,50E -04	3,50E +05	2,68E +01	2,94E -05	4,77E -07	1,19E- 07	4,77E- 07
8,11- Dimethyl- 1- Tridecene	1,50E+ 01	2,10E +02	5,13E -03	2,34E +05	3,14E +05	1,66E -04	4,65E +05	1,07E +01	3,01E -05	4,09E -07	1,02E- 07	4,09E- 07
5,8- Dimethyl- 2-Decene	1,20E+ 01	1,68E +02	1,76E -01	2,62E +04	3,51E +04	5,76E -04	2,35E +05	1,23E +02	1,25E -04	9,29E -07	2,32E- 07	9,29E- 07
6,9- Dimethyl-	1,30E+ 01	1,82E +02	5,73E -02	5,25E +04	7,02E +04	3,93E -04	3,12E +05	4,77E +01	1,26E -04	7,97E -07	1,99E- 07	7,97E- 07

2-Undecene												
7,10-Dimethyl-2-Dodecene	1,40E+01	1,96E+02	1,86E-02	1,06E+05	1,41E+05	2,67E-04	4,13E+05	1,88E+01	1,26E-04	6,84E-07	1,71E-07	6,84E-07
8,11-Dimethyl-2-Tridecene	1,50E+01	2,10E+02	5,98E-03	2,13E+05	2,85E+05	1,78E-04	5,49E+05	7,57E+00	1,27E-04	5,87E-07	1,47E-07	5,87E-07
3,6,9-Trimethyl-2-Undecene	1,40E+01	1,96E+02	1,66E-02	1,13E+05	1,51E+05	2,55E-04	4,88E+05	2,41E+01	3,51E-04	9,81E-07	2,45E-07	9,81E-07
4,7,10-Trimethyl-2-Dodecene	1,50E+01	2,10E+02	6,91E-03	1,95E+05	2,61E+05	1,89E-04	5,49E+05	1,31E+01	1,27E-04	5,10E-07	1,27E-07	5,10E-07
n-Pentylbenzene	1,10E+01	1,48E+02	3,37E+00	4,20E+03	5,61E+03	1,84E-03	2,57E+03	5,85E+01	5,07E-06	1,02E-06	2,55E-07	1,02E-06
n-Hexylbenzene	1,20E+01	1,62E+02	9,02E-01	9,50E+03	1,27E+04	1,11E-03	2,90E+03	1,61E+01	5,77E-06	8,76E-07	2,19E-07	8,76E-07
n-Heptylbenzene	1,30E+01	1,76E+02	4,47E-01	1,47E+04	1,96E+04	8,92E-04	1,53E+03	4,13E+00	6,48E-06	7,52E-07	1,88E-07	7,52E-07

zene												
n-Octylbenzene	1,40E+01	1,90E+02	6,60E-02	4,81E+04	6,43E+04	4,35E-04	4,35E+03	1,51E+00	7,19E-06	6,45E-07	1,61E-07	6,45E-07
n-Nonylbenzene	1,50E+01	2,04E+02	3,52E-02	7,10E+04	9,50E+04	3,61E-04	5,81E+03	7,61E-01	7,89E-06	5,54E-07	1,38E-07	5,54E-07
n-Decylbenzene	1,60E+01	2,18E+02	1,00E-02	1,55E+05	2,07E+05	2,29E-04	1,55E+04	1,71E-01	8,60E-06	4,75E-07	1,19E-07	4,75E-07
n-Undecylbenzene	1,70E+01	2,32E+02	3,30E-03	3,08E+05	4,12E+05	1,52E-04	1,02E+04	3,23E-02	9,31E-06	4,08E-07	1,02E-07	4,08E-07
n-Dodecylbenzene	1,80E+01	2,46E+02	1,00E-02	1,55E+05	2,07E+05	2,59E-04	1,36E+04	6,81E-03	1,00E-05	3,50E-07	8,75E-08	3,50E-07
1,2,3,4,5-Pentamethylbenzene	1,10E+01	1,48E+02	1,55E+01	1,63E+03	2,18E+03	3,88E-03	4,44E+01	4,64E+00	2,64E-05	1,87E-06	4,68E-07	1,87E-06
1,2,3,4,5,6-Hexamethylbenzene	1,20E+01	1,62E+02	2,35E-01	2,19E+04	2,93E+04	6,26E-04	7,91E+01	1,15E-01	3,24E-05	1,89E-06	4,73E-07	1,89E-06
1,2,3-Triethylbenzene	1,20E+01	1,62E+02	2,90E+00	4,60E+03	6,16E+03	1,88E-03	1,71E+03	1,06E+01	8,99E-06	1,35E-06	3,38E-07	1,35E-06

1,2,4-Triethylbenzene	1,20E+01	1,62E+02	2,90E+00	4,60E+03	6,16E+03	1,88E-03	1,71E+03	3,23E+01	8,99E-06	1,35E-06	3,38E-07	1,35E-06
1,2,5-Triethylbenzene	1,20E+01	1,62E+02	2,90E+00	4,60E+03	6,16E+03	1,88E-03	1,71E+03	3,23E+01	8,99E-06	1,35E-06	3,38E-07	1,35E-06
1,2,3,4-Tetraethylbenzene	1,40E+01	1,90E+02	2,76E-01	1,98E+04	2,65E+04	7,86E-04	2,51E+03	1,22E+00	1,11E-05	1,24E-06	3,09E-07	1,24E-06
1,2,3,5-Tetraethylbenzene	1,40E+01	1,90E+02	2,76E-01	1,98E+04	2,65E+04	7,86E-04	2,51E+03	1,22E+00	2,04E-05	1,24E-06	3,09E-07	1,24E-06
1,2,3,4,5-Pentaethylbenzene	1,60E+01	2,18E+02	2,57E-02	8,63E+04	1,16E+05	3,39E-04	3,69E+03	8,37E-01	2,50E-05	1,13E-06	2,83E-07	1,13E-06
1,2-Dipropylbenzene	1,20E+01	1,62E+02	3,24E+00	4,30E+03	5,75E+03	1,98E-03	2,07E+03	1,06E+01	5,42E-06	1,09E-06	2,72E-07	1,09E-06
1,3-Dipropylbenzene	1,20E+01	1,62E+02	3,24E+00	4,30E+03	5,75E+03	1,98E-03	2,07E+03	1,06E+01	8,49E-06	1,09E-06	2,72E-07	1,09E-06
1,4-Dipropylbenzene	1,20E+01	1,62E+02	3,24E+00	4,30E+03	5,75E+03	1,98E-03	2,07E+03	1,06E+01	5,42E-06	1,09E-06	2,72E-07	1,09E-06
1,2,3-Tripropylbenzene	1,50E+01	2,04E+02	9,96E+00	3,73E+03	4,99E+03	5,53E-03	4,01E+03	4,76E+01	1,10E-06	8,54E-06	2,14E-07	8,54E-06

benzene	01	+02	-02	+04	+04	-04	+03	-01	-05	-07	07	07
1,2,4-Tripropyl benzene	1,50E+ 01	2,04E +02	9,96E -02	3,73E +04	4,99E +04	5,53E -04	4,01E +03	4,76E -01	1,10E -05	8,54E -07	2,14E- 07	8,54E- 07
1,2,5-Tripropyl benzene	1,50E+ 01	2,04E +02	9,96E -02	3,73E +04	4,99E +04	5,53E -04	4,01E +03	4,76E -01	1,10E -05	8,54E -07	2,14E- 07	8,54E- 07
1-Methyl-2-butylbenzene	1,10E+ 01	1,48E +02	9,83E +00	2,16E +03	2,89E +03	3,08E -03	1,56E +03	2,81E +01	5,11E -06	1,20E -06	3,01E- 07	1,20E- 06
1-Methyl-3-butylbenzene	1,10E+ 01	1,48E +02	9,83E +00	2,16E +03	2,89E +03	3,08E -03	1,56E +03	2,81E +01	8,33E -06	1,20E -06	3,01E- 07	1,20E- 06
1-Methyl-4-butylbenzene	1,10E+ 01	1,48E +02	9,83E +00	2,16E +03	2,89E +03	3,08E -03	1,56E +03	2,81E +01	5,11E -06	1,20E -06	3,01E- 07	1,20E- 06
1-Methyl-2-pentylbenzene	1,20E+ 01	1,62E +02	3,24E +00	4,30E +03	5,75E +03	1,98E -03	2,07E +03	1,06E +01	5,81E -06	1,03E -06	2,58E- 07	1,03E- 06
1-Methyl-3-pentylbenzene	1,20E+ 01	1,62E +02	3,24E +00	4,30E +03	5,75E +03	1,98E -03	2,07E +03	1,06E +01	9,04E -06	1,03E -06	2,58E- 07	1,03E- 06

ene												
1-Methyl-4-pentylbenzene	1,20E+01	1,62E+02	3,24E+00	4,30E+03	5,75E+03	1,98E-03	2,07E+03	1,06E+01	5,81E-06	1,03E-06	2,58E-07	1,03E-06
1-Methyl-2-hexylbenzene	1,30E+01	1,76E+02	1,06E+00	8,60E+03	1,15E+04	1,30E-03	2,75E+03	4,11E+00	6,52E-06	8,86E-07	2,22E-07	8,86E-07
1-Methyl-3-hexylbenzene	1,30E+01	1,76E+02	1,06E+00	8,60E+03	1,15E+04	1,30E-03	2,75E+03	4,11E+00	9,74E-06	8,86E-07	2,22E-07	8,86E-07
1-Methyl-4-hexylbenzene	1,30E+01	1,76E+02	1,06E+00	8,60E+03	1,15E+04	1,30E-03	2,75E+03	4,11E+00	6,52E-06	8,86E-07	2,22E-07	8,86E-07
1-Methyl-2-heptylbenzene	1,40E+01	1,90E+02	3,44E-01	1,73E+04	2,31E+04	8,62E-04	3,64E+03	1,57E+00	7,23E-06	7,60E-07	1,90E-07	7,60E-07
1-Methyl-3-heptylbenzene	1,40E+01	1,90E+02	3,44E-01	1,73E+04	2,31E+04	8,62E-04	3,64E+03	1,57E+00	1,05E-05	7,60E-07	1,90E-07	7,60E-07
1-Methyl-4-heptylbenzene	1,40E+01	1,90E+02	3,44E-01	1,73E+04	2,31E+04	8,62E-04	3,64E+03	1,57E+00	7,23E-06	7,60E-07	1,90E-07	7,60E-07

heptylbenzene	01	+02	-01	+04	+04	-04	+03	+00	-06	-07	07	07
1-Methyl-2-octylbenzene	1,50E+01	2,04E+02	1,11E-01	3,48E+04	4,65E+04	5,79E-04	4,83E+03	5,44E-01	7,93E-06	6,53E-07	1,63E-07	6,53E-07
1-Methyl-3-octylbenzene	1,50E+01	2,04E+02	1,11E-01	3,48E+04	4,65E+04	5,79E-04	4,83E+03	5,44E-01	1,12E-05	6,53E-07	1,63E-07	6,53E-07
1-Methyl-4-octylbenzene	1,50E+01	2,04E+02	1,11E-01	3,48E+04	4,65E+04	5,79E-04	4,83E+03	5,44E-01	7,93E-06	6,53E-07	1,63E-07	6,53E-07
1-Methyl-2-nonylbenzene	1,60E+01	2,18E+02	3,58E-02	7,03E+04	9,40E+04	3,88E-04	6,41E+03	1,95E-01	8,64E-06	5,60E-07	1,40E-07	5,60E-07
1-Methyl-3-nonylbenzene	1,60E+01	2,18E+02	3,58E-02	7,03E+04	9,40E+04	3,88E-04	6,41E+03	1,95E-01	1,19E-05	5,60E-07	1,40E-07	5,60E-07
1-Methyl-4-nonylbenzene	1,60E+01	2,18E+02	3,58E-02	7,03E+04	9,40E+04	3,88E-04	6,41E+03	1,95E-01	8,64E-06	5,60E-07	1,40E-07	5,60E-07
1-Methyl-	1,70E+	2,32E	1,15E	1,42E	1,91E	2,58E	8,51E	7,28E	9,35E	4,81E	1,20E-	4,81E-

2-decylbenzene	01	+02	-02	+05	+05	-04	+03	-02	-06	-07	07	07
1-Methyl-3-decylbenzene	1,70E+01	2,32E+02	1,15E-02	1,42E+05	1,91E+05	2,58E-04	8,51E+03	7,28E-02	1,26E-05	4,81E-07	1,20E-07	4,81E-07
1-Methyl-4-decylbenzene	1,70E+01	2,32E+02	1,15E-02	1,42E+05	1,91E+05	2,58E-04	8,51E+03	7,28E-02	9,35E-06	4,81E-07	1,20E-07	4,81E-07
1-Ethyl-2-propylbenzene	1,10E+01	1,48E+02	9,83E+00	2,16E+03	2,89E+03	3,08E-03	1,56E+03	2,81E+01	4,73E-06	1,27E-06	3,17E-07	1,27E-06
1-Ethyl-3-propylbenzene	1,10E+01	1,48E+02	9,83E+00	2,16E+03	2,89E+03	3,08E-03	1,56E+03	2,81E+01	7,80E-06	1,27E-06	3,17E-07	1,27E-06
1-Ethyl-4-propylbenzene	1,10E+01	1,48E+02	9,83E+00	2,16E+03	2,89E+03	3,08E-03	1,56E+03	2,81E+01	4,73E-06	1,27E-06	3,17E-07	1,27E-06
1-Ethyl-2-butylbenzene	1,20E+01	1,62E+02	3,24E+00	4,30E+03	5,75E+03	1,98E-03	2,07E+03	1,06E+01	5,44E-06	1,09E-06	2,72E-07	1,09E-06
1-Ethyl-3-butylbenzene	1,20E+01	1,62E+02	3,24E+00	4,30E+03	5,75E+03	1,98E-03	2,07E+03	1,06E+01	8,51E-06	1,09E-06	2,72E-07	1,09E-06

1-Ethyl-4-butylbenzene	1,20E+01	1,62E+02	3,24E+00	4,30E+03	5,75E+03	1,98E-03	2,07E+03	1,06E+01	5,44E-06	1,09E-06	2,72E-07	1,09E-06
1-Ethyl-2-pentylbenzene	1,30E+01	1,76E+02	1,06E+00	8,60E+03	1,15E+04	1,30E-03	2,75E+03	4,11E+00	6,15E-06	9,34E-07	2,33E-07	9,34E-07
1-Ethyl-3-pentylbenzene	1,30E+01	1,76E+02	1,06E+00	8,60E+03	1,15E+04	1,30E-03	2,75E+03	4,11E+00	9,22E-06	9,34E-07	2,33E-07	9,34E-07
1-Ethyl-4-pentylbenzene	1,30E+01	1,76E+02	1,06E+00	8,60E+03	1,15E+04	1,30E-03	2,75E+03	4,11E+00	6,15E-06	9,34E-07	2,33E-07	9,34E-07
1-Ethyl-2-hexylbenzene	1,40E+01	1,90E+02	3,44E-01	1,73E+04	2,31E+04	8,62E-04	3,64E+03	1,57E+00	6,85E-06	8,01E-07	2,00E-07	8,01E-07
1-Ethyl-3-hexylbenzene	1,40E+01	1,90E+02	3,44E-01	1,73E+04	2,31E+04	8,62E-04	3,64E+03	1,57E+00	9,92E-06	8,01E-07	2,00E-07	8,01E-07
1-Ethyl-4-hexylbenzene	1,40E+01	1,90E+02	3,44E-01	1,73E+04	2,31E+04	8,62E-04	3,64E+03	1,57E+00	6,85E-06	8,01E-07	2,00E-07	8,01E-07
1-Ethyl-2-heptylbenzene	1,50E+01	2,04E+02	1,11E-01	3,48E+04	4,65E+04	5,79E-04	4,83E+03	5,44E-01	7,56E-06	6,88E-07	1,72E-07	6,88E-07
1-Ethyl-3-heptylbenzene	1,50E+01	2,04E+02	1,11E-01	3,48E+04	4,65E+04	5,79E-04	4,83E+03	5,44E+00	1,06E-06	6,88E-07	1,72E-07	6,88E-07

ene	01	+02	-01	+04	+04	-04	+03	-01	-05	-07	07	07
1-Ethyl-4-heptylbenzene	1,50E+01	2,04E+02	1,11E-01	3,48E+04	4,65E+04	5,79E-04	4,83E+03	5,44E-01	7,56E-06	6,88E-07	1,72E-07	6,88E-07
1-Ethyl-2-octylbenzene	1,60E+01	2,18E+02	3,58E-02	7,03E+04	9,40E+04	3,88E-04	6,41E+03	1,95E-01	8,27E-06	5,90E-07	1,48E-07	5,90E-07
1-Ethyl-3-octylbenzene	1,60E+01	2,18E+02	3,58E-02	7,03E+04	9,40E+04	3,88E-04	6,41E+03	1,95E-01	1,13E-05	5,90E-07	1,48E-07	5,90E-07
1-Ethyl-4-octylbenzene	1,60E+01	2,18E+02	3,58E-02	7,03E+04	9,40E+04	3,88E-04	6,41E+03	1,95E-01	8,27E-06	5,90E-07	1,48E-07	5,90E-07
1-Ethyl-2-nonylbenzene	1,70E+01	2,32E+02	1,15E-02	1,42E+05	1,91E+05	2,58E-04	8,51E+03	7,28E-02	8,97E-06	5,06E-07	1,27E-07	5,06E-07
1-Ethyl-3-nonylbenzene	1,70E+01	2,32E+02	1,15E-02	1,42E+05	1,91E+05	2,58E-04	8,51E+03	7,28E-02	1,20E-05	5,06E-07	1,27E-07	5,06E-07
1-Ethyl-4-nonylbenzene	1,70E+01	2,32E+02	1,15E-02	1,42E+05	1,91E+05	2,58E-04	8,51E+03	7,28E-02	8,97E-06	5,06E-07	1,27E-07	5,06E-07
1,2-Dipropylbenzene	1,20E+01	1,62E+02	3,24E+00	4,30E+03	5,75E+03	1,98E-03	2,07E+03	1,06E+01	5,42E-06	1,09E-06	2,72E-07	1,09E-06

1,3-Dipropylbenzene	1,20E+01	1,62E+02	3,24E+00	4,30E+03	5,75E+03	1,98E-03	2,07E+03	1,06E+01	8,49E-06	1,09E-06	2,72E-07	1,09E-06
1,4-Dipropylbenzene	1,20E+01	1,62E+02	3,24E+00	4,30E+03	5,75E+03	1,98E-03	2,07E+03	1,06E+01	5,42E-06	1,09E-06	2,72E-07	1,09E-06
1,2-Dibutylbenzene	1,40E+01	1,90E+02	3,44E-01	1,73E+04	2,31E+04	8,62E-04	3,64E+03	1,57E+00	6,83E-06	8,01E-07	2,00E-07	8,01E-07
1,3-Dibutylbenzene	1,40E+01	1,90E+02	3,44E-01	1,73E+04	2,31E+04	8,62E-04	3,64E+03	1,57E+00	9,90E-06	8,01E-07	2,00E-07	8,01E-07
1,4-Dibutylbenzene	1,40E+01	1,90E+02	3,44E-01	1,73E+04	2,31E+04	8,62E-04	3,64E+03	1,57E+00	6,83E-06	8,01E-07	2,00E-07	8,01E-07
1,2-Dipentylbenzene	1,60E+01	2,18E+02	3,58E-02	7,03E+04	9,40E+04	3,88E-04	6,41E+03	1,95E-01	8,24E-06	5,90E-07	1,48E-07	5,90E-07
1,3-Dipentylbenzene	1,60E+01	2,18E+02	3,58E-02	7,03E+04	9,40E+04	3,88E-04	6,41E+03	1,95E-01	1,13E-05	5,90E-07	1,48E-07	5,90E-07
1,4-Dipentylbenzene	1,60E+01	2,18E+02	3,58E-02	7,03E+04	9,40E+04	3,88E-04	6,41E+03	1,95E-01	8,24E-06	5,90E-07	1,48E-07	5,90E-07
1,2,3-Tripropylbenzene	1,50E+01	2,04E+02	9,96E-01	3,73E+04	4,99E+04	5,53E-04	4,01E+03	4,76E+00	1,10E-06	8,54E-07	2,14E-07	8,54E-07

benzene	01	+02	-02	+04	+04	-04	+03	-01	-05	-07	07	07
1,2,4-Tripropyl benzene	1,50E+ 01	2,04E +02	9,96E -02	3,73E +04	4,99E +04	5,53E -04	4,01E +03	4,76E -01	1,10E -05	8,54E -07	2,14E- 07	8,54E- 07
1,2,5-Tripropyl benzene	1,50E+ 01	2,04E +02	9,96E -02	3,73E +04	4,99E +04	5,53E -04	4,01E +03	4,76E -01	1,10E -05	8,54E -07	2,14E- 07	8,54E- 07
1-benzyl 4,8 dimethyl nonane	1,70E+ 01	2,32E +02	1,71E -02	1,11E +05	1,49E +05	3,05E -04	1,02E +04	3,69E -01	9,44E -06	3,07E -07	7,69E- 08	3,07E- 07
1-benzyl 4,8 dimethyl decane	1,80E+ 01	2,46E +02	5,45E -03	2,26E +05	3,02E +05	2,00E -04	1,36E +04	1,69E -01	1,03E -05	2,64E -07	6,60E- 08	2,64E- 07
1-benzyl 4,8 dimethyl undecane	1,90E+ 01	2,60E +02	1,73E -03	4,59E +05	6,14E +05	1,27E -04	1,80E +04	6,09E -02	1,10E -05	2,26E -07	5,66E- 08	2,26E- 07
1-benzyl 4,8 dimethyl dodecane	2,00E+ 01	2,74E +02	5,50E -04	9,36E +05	1,25E +06	7,81E -05	2,40E +04	2,44E -02	1,17E -05	1,94E -07	4,86E- 08	1,94E- 07
1-benzyl 4,8,12 trimethyl	2,20E+ 01	3,03E +02	6,34E -05	3,57E +06	4,78E +06	2,68E -05	4,22E +04	8,28E -03	1,31E -05	1,24E -07	3,11E- 08	1,24E- 07

tridecane												
n-tridecyl benzene	1,90E+ 01	2,60E +02	2,10E -04	1,70E +06	2,27E +06	4,53E -05	1,80E +04	1,69E -03	1,07E -05	3,00E -07	7,51E- 08	3,00E- 07
Tetrahydr o- phenanthr ene	1,40E+ 01	1,82E +02	2,22E +00	5,44E +03	7,28E +03	1,86E -03	5,04E +01	6,91E -02	3,53E -05	7,44E -08	1,86E- 08	7,44E- 08
Methyl- tetrahydro - phenanthr ene	1,50E+ 01	1,96E +02	8,31E -01	1,00E +04	1,34E +04	1,30E -03	6,70E +01	3,51E -02	3,61E -05	6,08E -08	1,52E- 08	6,08E- 08
Ethyl- tetrahydro - phenanthr ene	1,60E+ 01	2,10E +02	2,68E -01	2,02E +04	2,70E +04	8,58E -04	8,88E +01	1,37E -02	3,70E -05	9,19E -08	2,30E- 08	9,19E- 08
n-Propyl- tetrahydro - phenanthr ene	1,70E+ 01	2,24E +02	8,60E -02	4,08E +04	5,46E +04	5,72E -04	1,18E +02	5,68E -03	3,77E -05	7,89E -08	1,97E- 08	7,89E- 08
iso-Propyl- tetrahydro - phenanthr ene	1,70E+ 01	2,24E +02	9,93E -02	3,73E +04	4,99E +04	6,06E -04	1,18E +02	1,06E -02	3,77E -05	6,85E -08	1,71E- 08	6,85E- 08

Octahydro -chrysene	1,80E+ 01	2,36E +02	1,56E -01	2,82E +04	3,77E +04	7,70E -04	6,91E +01	1,68E -03	3,91E -05	2,40E -10	6,00E- 11	2,40E- 10
Methyl octahydro- chrysene	1,90E+ 01	2,50E +02	5,75E -02	5,24E +04	7,01E +04	5,41E -04	9,17E +01	1,09E -03	4,00E -05	1,45E -09	3,62E- 10	1,45E- 09
Fluorene	1,30E+ 01	1,66E +02	1,89E +00	6,01E +03	8,04E +03	1,58E -03	9,75E +00	8,00E -02	6,50E -06	5,30E -07	1,32E- 07	5,30E- 07
Methylfluo rene	1,40E+ 01	1,80E +02	5,41E -01	1,30E +04	1,75E +04	9,89E -04	1,87E +01	5,31E -02	7,82E -06	3,32E -07	8,29E- 08	3,32E- 07
Ethylfluor ene	1,50E+ 01	1,94E +02	1,75E -01	2,62E +04	3,51E +04	6,64E -04	2,48E +01	2,03E -02	8,04E -06	4,85E -07	1,21E- 07	4,85E- 07
n- Propylfluor ene	1,60E+ 01	2,08E +02	5,66E -02	5,29E +04	7,07E +04	4,47E -04	3,29E +01	8,07E -03	8,72E -06	4,16E -07	1,04E- 07	4,16E- 07
n- Butylfluor ene	1,70E+ 01	2,22E +02	1,82E -02	1,07E +05	1,43E +05	2,99E -04	4,38E +01	3,36E -03	9,43E -06	3,57E -07	8,93E- 08	3,57E- 07
iso- Propylfluor ene	1,60E+ 01	2,08E +02	6,54E -02	4,83E +04	6,47E +04	4,74E -04	3,29E +01	1,53E -02	8,40E -06	2,26E -07	5,66E- 08	2,26E- 07
iso- Butylfluor ene	1,70E+ 01	2,22E +02	2,10E -02	9,77E +04	1,31E +05	3,18E -04	4,38E +01	6,27E -03	9,43E -06	3,10E -07	7,75E- 08	3,10E- 07
iso- Pentylfluor ene	1,80E+ 01	2,36E +02	6,72E -03	1,98E +05	2,65E +05	2,10E -04	5,81E +01	2,65E -03	1,01E -05	2,66E -07	6,65E- 08	2,66E- 07

rene												
Acenaphthene	1,20E+01	1,54E+02	3,90E+00	3,83E+03	5,13E+03	2,05E-03	1,84E+01	2,87E-01	2,90E-05	4,27E-07	1,07E-07	4,27E-07
Methyl acenaphthene	1,30E+01	1,68E+02	4,73E-01	1,42E+04	1,90E+04	8,72E-04	3,16E+01	1,79E-01	5,93E-05	2,67E-07	6,68E-08	2,67E-07
Ethyl acenaphthene	1,40E+01	1,82E+02	1,54E-01	2,84E+04	3,80E+04	5,91E-04	4,19E+01	6,45E-02	5,82E-05	3,91E-07	9,77E-08	3,91E-07
n-Propyl acenaphthene	1,50E+01	1,96E+02	5,00E-02	5,71E+04	7,64E+04	4,00E-04	5,56E+01	2,43E-02	5,89E-05	3,36E-07	8,39E-08	3,36E-07
n-Butyl acenaphthene	1,60E+01	2,10E+02	1,61E-02	1,15E+05	1,54E+05	2,69E-04	7,38E+01	9,56E-03	5,96E-05	2,88E-07	7,20E-08	2,88E-07
iso-Propyl acenaphthene	1,50E+01	1,96E+02	5,77E-02	5,22E+04	6,99E+04	4,25E-04	5,56E+01	4,79E-02	5,71E-05	1,83E-07	4,56E-08	1,83E-07
iso-Butyl acenaphthene	1,60E+01	2,10E+02	1,86E-02	1,05E+05	1,41E+05	2,86E-04	7,38E+01	1,84E-02	5,96E-05	2,50E-07	6,25E-08	2,50E-07
iso-Pentyl acenaphthene	1,70E+01	2,24E+02	5,98E-03	2,13E+05	2,85E+05	1,89E-04	9,81E+01	7,39E-03	6,03E-05	2,15E-07	5,37E-08	2,15E-07
iso-Hexyl	1,80E+01	2,36E+02	2,99E-03	3,27E+05	4,38E+05	1,48E-04	2,53E+01	2,79E-03	2,25E-05	1,13E-07	2,82E-08	1,13E-07

acenaphthylene	01	+02	-03	+05	+05	-04	+01	-03	-04	-07	08	07
hexahydroterphenyl	1,80E+01	2,36E+02	8,82E-02	4,02E+04	5,37E+04	6,09E-04	8,84E+01	8,01E-03	1,04E-05	3,96E-08	9,89E-09	3,96E-08
Methyl-1,2,3,6,7,8-hexahydro-pyrene	1,70E+01	2,22E+02	6,84E-03	1,96E+05	2,62E+05	1,99E-04	3,60E+01	3,11E-03	1,04E-04	4,09E-09	1,02E-09	4,09E-09
Ethyl-1,2,3,6,7,8-hexahydro-pyrene	1,80E+01	2,36E+02	2,19E-03	3,97E+05	5,32E+05	1,29E-04	4,77E+01	1,35E-03	1,04E-04	8,36E-10	2,09E-10	8,36E-10
tetrahydro-phenanthrene	1,40E+01	1,82E+02	2,22E+00	5,44E+03	7,28E+03	1,86E-03	5,04E+01	6,91E-02	3,53E-05	7,44E-08	1,86E-08	7,44E-08
methyl-tetrahydro-phenanthrene	1,50E+01	1,96E+02	8,31E-01	1,00E+04	1,34E+04	1,30E-03	6,70E+01	3,51E-02	3,61E-05	6,08E-08	1,52E-08	6,08E-08
ethylheptyl-tetrahydro-phenanthrene	1,60E+01	2,10E+02	2,68E-01	2,02E+04	2,70E+04	8,58E-04	8,88E+01	1,37E-02	3,70E-05	9,19E-08	2,30E-08	9,19E-08

propyl- tetrahydro - phenanthr ene	1,70E+ 01	2,24E +02	8,60E -02	4,08E +04	5,46E +04	5,72E -04	1,18E +02	5,68E -03	3,77E -05	7,89E -08	1,97E- 08	7,89E- 08
isopropyl- tetrahydro - phenanthr ene	1,70E+ 01	2,24E +02	9,93E -02	3,73E +04	4,99E +04	6,06E -04	1,18E +02	1,06E -02	3,77E -05	6,85E -08	1,71E- 08	6,85E- 08
butyl- tetrahydro - phenanthr ene	1,80E+ 01	2,38E +02	2,75E -02	8,27E +04	1,11E +05	3,81E -04	1,57E +02	2,41E -03	3,84E -05	6,77E -08	1,69E- 08	6,77E- 08
isobutyl- tetrahydro - phenanthr ene	1,80E+ 01	2,38E +02	3,18E -02	7,57E +04	1,01E +05	4,04E -04	1,57E +02	4,45E -03	3,86E -05	5,88E -08	1,47E- 08	5,88E- 08
isopentyl- tetrahydro - phenanthr ene	1,90E+ 01	2,52E +02	1,01E -02	1,54E +05	2,06E +05	2,66E -04	2,08E +02	1,89E -03	3,93E -05	5,05E -08	1,26E- 08	5,05E- 08
Biphenyl	1,20E+ 01	1,54E +02	6,94E +00	2,68E +03	3,59E +03	2,70E -03	3,12E +01	1,19E +00	3,60E -06	2,59E -07	6,47E- 08	2,59E- 07

4-Methylbiphenyl	1,30E+01	1,68E+02	4,05E+00	3,74E+03	5,01E+03	2,28E-03	4,63E+01	8,56E-01	3,84E-06	2,62E-07	6,55E-08	2,62E-07
4-Ethylbiphenyl	1,40E+01	1,82E+02	4,31E+00	3,60E+03	4,82E+03	2,54E-03	6,14E+01	1,24E-01	4,31E-06	2,37E-07	5,92E-08	2,37E-07
4-Propylbiphenyl	1,50E+01	1,96E+02	1,40E+00	7,24E+03	9,69E+03	1,63E-03	8,15E+01	4,73E-02	4,99E-06	2,03E-07	5,08E-08	2,03E-07
4-Butylbiphenyl	1,60E+01	2,10E+02	4,51E-01	1,46E+04	1,96E+04	1,07E-03	1,08E+02	1,88E-02	5,70E-06	1,74E-07	4,36E-08	1,74E-07
4-iso-Propylbiphenyl	1,50E+01	1,96E+02	9,00E-01	9,51E+03	1,27E+04	1,34E-03	8,15E+01	1,09E-01	4,87E-06	1,11E-07	2,76E-08	1,11E-07
4-iso-Butylbiphenyl	1,60E+01	2,10E+02	5,21E-01	1,34E+04	1,79E+04	1,14E-03	1,08E+02	3,59E-02	5,69E-06	1,51E-07	3,79E-08	1,51E-07
4-iso-Pentylbiphenyl	1,70E+01	2,24E+02	1,67E-01	2,70E+04	3,62E+04	7,52E-04	1,44E+02	1,45E-02	6,40E-06	1,30E-07	3,25E-08	1,30E-07
2,3-Dimethylbiphenyl	1,40E+01	1,82E+02	3,86E+00	3,86E+03	5,16E+03	2,41E-03	5,11E+01	1,08E-01	7,25E-06	2,65E-07	6,62E-08	2,65E-07
2,4-Dimethylbiphenyl	1,40E+01	1,82E+02	3,86E+00	3,86E+03	5,16E+03	2,41E-03	5,11E+01	1,08E-01	6,58E-06	2,65E-07	6,62E-08	2,65E-07

biphenyl	01	+02	+00	+03	+03	-03	+01	-01	-06	-07	08	07
2,3,4-Trimethyl biphenyl	1,50E+ 01	1,96E +02	1,12E +00	8,31E +03	1,11E +04	1,48E -03	5,63E +01	3,56E -02	8,54E -06	2,68E -07	6,70E- 08	2,68E- 07
2,4,6-Trimethyl biphenyl	1,50E+ 01	1,96E +02	1,12E +00	8,31E +03	1,11E +04	1,48E -03	5,63E +01	3,56E -02	1,43E -05	2,68E -07	6,70E- 08	2,68E- 07
Ethyl indan	1,10E+ 01	1,46E +02	1,45E +01	1,70E +03	2,28E +03	3,69E -03	6,86E +02	2,39E +01	5,50E -06	3,41E -06	8,53E- 07	3,41E- 06
n-Propyl indan	1,20E+ 01	1,60E +02	4,77E +00	3,38E +03	4,53E +03	2,34E -03	9,11E +02	9,04E +00	6,21E -06	2,93E -06	7,32E- 07	2,93E- 06
n-Butyl indan	1,30E+ 01	1,74E +02	1,56E +00	6,76E +03	9,05E +03	1,52E -03	1,21E +03	3,33E +00	6,91E -06	2,51E -06	6,28E- 07	2,51E- 06
n-Pentyl indan	1,40E+ 01	1,88E +02	5,08E -01	1,36E +04	1,82E +04	1,01E -03	1,60E +03	1,11E +00	7,62E -06	2,16E -06	5,39E- 07	2,16E- 06
n-Hexyl indan	1,50E+ 01	2,02E +02	1,64E -01	2,73E +04	3,66E +04	6,73E -04	2,13E +03	3,84E -01	8,33E -06	1,85E -06	4,63E- 07	1,85E- 06
n-Heptyl indan	1,60E+ 01	2,16E +02	5,28E -02	5,52E +04	7,38E +04	4,51E -04	2,83E +03	1,37E -01	9,03E -06	1,59E -06	3,97E- 07	1,59E- 06
n-Octyl indan	1,70E+ 01	2,30E +02	1,69E -02	1,12E +05	1,50E +05	3,01E -04	3,75E +03	5,16E -02	9,74E -06	1,36E -06	3,41E- 07	1,36E- 06
n-Nonyl indan	1,80E+ 01	2,44E +02	5,40E -03	2,27E +05	3,04E +05	1,98E -04	4,98E +03	2,01E -02	1,04E -05	1,17E -06	2,92E- 07	1,17E- 06
n-Decyl	1,90E+ 01	2,58E +02	1,72E -03	4,61E +05	6,17E +05	1,26E -04	6,61E +03	8,27E -02	1,12E -05	1,00E -06	2,51E- 07	1,00E- 06

indan	01	+02	-03	+05	+05	-04	+03	-03	-05	-06	07	06
iso-Propyl	1,20E+	1,60E	5,51E	3,09E	4,14E	2,51E	9,11E	1,61E	6,20E	2,54E	6,35E-	2,54E-
indan	01	+02	+00	+03	+03	-03	+02	+01	-06	-06	07	06
iso-Butyl	1,30E+	1,74E	1,80E	6,18E	8,27E	1,62E	1,21E	6,19E	6,91E	2,18E	5,45E-	2,18E-
indan	01	+02	+00	+03	+03	-03	+03	+00	-06	-06	07	06
iso-Pentyl	1,40E+	1,88E	5,87E	1,24E	1,66E	1,07E	1,60E	2,33E	7,62E	1,87E	4,68E-	1,87E-
indan	01	+02	-01	+04	+04	-03	+03	+00	-06	-06	07	06
iso-Hexyl	1,50E+	2,02E	1,90E	2,50E	3,34E	7,14E	2,13E	7,92E	8,32E	1,61E	4,02E-	1,61E-
indan	01	+02	-01	+04	+04	-04	+03	-01	-06	-06	07	06
iso-Heptyl	1,60E+	2,16E	6,10E	5,05E	6,75E	4,79E	2,83E	2,79E	9,03E	1,38E	3,45E-	1,38E-
indan	01	+02	-02	+04	+04	-04	+03	-01	-06	-06	07	06
iso-Octyl	1,70E+	2,30E	1,96E	1,02E	1,37E	3,20E	3,75E	1,02E	9,74E	1,18E	2,96E-	1,18E-
indan	01	+02	-02	+05	+05	-04	+03	-01	-06	-06	07	06
iso-Nonyl	1,80E+	2,44E	6,24E	2,07E	2,78E	2,10E	4,98E	3,88E	1,04E	1,02E	2,54E-	1,02E-
indan	01	+02	-03	+05	+05	-04	+03	-02	-05	-06	07	06
iso-Decyl	1,90E+	2,58E	1,99E	4,22E	5,64E	1,35E	6,61E	1,55E	1,11E	8,72E	2,18E-	8,72E-
indan	01	+02	-03	+05	+05	-04	+03	-02	-05	-07	07	07
2-Methyl- n-butyl	1,40E+	1,88E	5,87E	1,24E	1,66E	1,07E	1,60E	2,33E	7,76E	1,87E	4,68E-	1,87E-
indan	01	+02	-01	+04	+04	-03	+03	+00	-06	-06	07	06
2-Methyl- n-pentyl	1,50E+	2,02E	1,90E	2,50E	3,34E	7,14E	2,13E	7,92E	8,46E	1,61E	4,02E-	1,61E-
indan	01	+02	-01	+04	+04	-04	+03	-01	-06	-06	07	06
2-Methyl-	1,60E+	2,16E	6,10E	5,05E	6,75E	4,79E	2,83E	2,79E	9,17E	1,38E	3,45E-	1,38E-

n-hexyl indan	01	+02	-02	+04	+04	-04	+03	-01	-06	-06	07	06
2-Methyl- n-heptyl indan	1,70E+ 01	2,30E +02	1,96E -02	1,02E +05	1,37E +05	3,20E -04	3,75E +03	1,02E -01	9,88E -06	1,18E -06	2,96E- 07	1,18E- 06
2-Methyl- n-octyl indan	1,80E+ 01	2,44E +02	6,24E -03	2,07E +05	2,78E +05	2,10E -04	4,98E +03	3,88E -02	1,06E -05	1,02E -06	2,54E- 07	1,02E- 06
2-Methyl- n-nonyl indan	1,90E+ 01	2,58E +02	1,99E -03	4,22E +05	5,64E +05	1,35E -04	6,61E +03	1,55E -02	1,13E -05	8,72E -07	2,18E- 07	8,72E- 07
Tetralin (tetrahydr onaphthal ene)	1,00E+ 01	1,32E +02	4,70E +01	8,19E +02	1,10E +03	6,24E -03	1,38E +02	4,91E +01	1,72E -05	5,48E -06	1,37E- 06	5,48E- 06
Methyl tetralin	1,10E+ 01	1,46E +02	1,45E +01	1,70E +03	2,28E +03	3,69E -03	6,86E +02	1,67E +01	6,36E -06	7,89E -06	1,97E- 06	7,89E- 06
Ethyl tetralin	1,20E+ 01	1,60E +02	4,77E +00	3,38E +03	4,53E +03	2,34E -03	9,11E +02	8,03E +00	7,27E -06	6,77E -06	1,69E- 06	6,77E- 06
n-Propyl tetralin	1,30E+ 01	1,74E +02	1,56E +00	6,76E +03	9,05E +03	1,52E -03	1,21E +03	3,16E +00	7,98E -06	5,81E -06	1,45E- 06	5,81E- 06
n-Butyl tetralin	1,40E+ 01	1,88E +02	5,08E -01	1,36E +04	1,82E +04	1,01E -03	1,60E +03	1,06E +00	8,68E -06	4,99E -06	1,25E- 06	4,99E- 06
n-Pentyl tetralin	1,50E+ 01	2,02E +02	1,64E -01	2,73E +04	3,66E +04	6,73E -04	2,13E +03	3,67E -01	9,39E -06	4,28E -06	1,07E- 06	4,28E- 06

n-Hexyl	1,60E+	2,16E	5,28E	5,52E	7,38E	4,51E	2,83E	1,32E	1,01E	3,67E	9,18E-	3,67E-
tetralin	01	+02	-02	+04	+04	-04	+03	-01	-05	-06	07	06
n-Heptyl	1,70E+	2,30E	1,69E	1,12E	1,50E	3,01E	3,75E	4,97E	1,08E	3,15E	7,88E-	3,15E-
tetralin	01	+02	-02	+05	+05	-04	+03	-02	-05	-06	07	06
n-Octyl	1,80E+	2,44E	5,40E	2,27E	3,04E	1,98E	4,98E	1,96E	1,15E	2,71E	6,76E-	2,71E-
tetralin	01	+02	-03	+05	+05	-04	+03	-02	-05	-06	07	06
n-Nonyl	1,90E+	2,58E	1,72E	4,61E	6,17E	1,26E	6,61E	8,05E	1,22E	2,32E	5,81E-	2,32E-
tetralin	01	+02	-03	+05	+05	-04	+03	-03	-05	-06	07	06
iso-Propyl	1,30E+	1,74E	1,80E	6,18E	8,27E	1,62E	1,21E	5,67E	7,97E	5,05E	1,26E-	5,05E-
tetralin	01	+02	+00	+03	+03	-03	+03	+00	-06	-06	06	06
iso-Butyl	1,40E+	1,88E	5,87E	1,24E	1,66E	1,07E	1,60E	2,21E	8,68E	4,33E	1,08E-	4,33E-
tetralin	01	+02	-01	+04	+04	-03	+03	+00	-06	-06	06	06
iso-Pentyl	1,50E+	2,02E	1,90E	2,50E	3,34E	7,14E	2,13E	7,53E	9,39E	3,72E	9,29E-	3,72E-
tetralin	01	+02	-01	+04	+04	-04	+03	-01	-06	-06	07	06
iso-Hexyl	1,60E+	2,16E	6,10E	5,05E	6,75E	4,79E	2,83E	2,65E	1,01E	3,19E	7,97E-	3,19E-
tetralin	01	+02	-02	+04	+04	-04	+03	-01	-05	-06	07	06
iso-Heptyl	1,70E+	2,30E	1,96E	1,02E	1,37E	3,20E	3,75E	9,77E	1,08E	2,74E	6,85E-	2,74E-
tetralin	01	+02	-02	+05	+05	-04	+03	-02	-05	-06	07	06
iso-Octyl	1,80E+	2,44E	6,24E	2,07E	2,78E	2,10E	4,98E	3,75E	1,15E	2,35E	5,87E-	2,35E-
tetralin	01	+02	-03	+05	+05	-04	+03	-02	-05	-06	07	06
iso-Nonyl	1,90E+	2,58E	1,99E	4,22E	5,64E	1,35E	6,61E	1,51E	1,22E	2,02E	5,04E-	2,02E-
tetralin	01	+02	-03	+05	+05	-04	+03	-02	-05	-06	07	06
2-Methyl-	1,50E+	2,02E	1,90E	2,50E	3,34E	7,14E	2,13E	7,53E	9,53E	3,72E	9,29E-	3,72E-
n-butyl	01	+02	-01	+04	+04	-04	+03	-01	-06	-06	07	06

tetralin												
2-Methyl- n-pentyl tetralin	1,60E+ 01	2,16E +02	6,10E -02	5,05E +04	6,75E +04	4,79E -04	2,83E +03	2,65E -01	1,02E -05	3,19E -06	7,97E- 07	3,19E- 06
2-Methyl- n-hexyl tetralin	1,70E+ 01	2,30E +02	1,96E -02	1,02E +05	1,37E +05	3,20E -04	3,75E +03	9,77E -02	1,09E -05	2,74E -06	6,85E- 07	2,74E- 06
2-Methyl- n-heptyl tetralin	1,80E+ 01	2,44E +02	6,24E -03	2,07E +05	2,78E +05	2,10E -04	4,98E +03	3,75E -02	1,16E -05	2,35E -06	5,87E- 07	2,35E- 06
2-Methyl- n-octyl tetralin	1,90E+ 01	2,58E +02	1,99E -03	4,22E +05	5,64E +05	1,35E -04	6,61E +03	1,51E -02	1,24E -05	2,02E -06	5,04E- 07	2,02E- 06
1,2- Dimethyl tetralin	1,20E+ 01	1,60E +02	5,51E +00	3,09E +03	4,14E +03	2,51E -03	9,11E +02	1,09E +01	7,02E -06	3,69E -06	9,21E- 07	3,69E- 06
1,3- Dimethyl tetralin	1,20E+ 01	1,60E +02	5,51E +00	3,09E +03	4,14E +03	2,51E -03	9,11E +02	1,09E +01	7,02E -06	3,69E -06	9,21E- 07	3,69E- 06
1,4- Dimethyl tetralin	1,20E+ 01	1,60E +02	5,51E +00	3,09E +03	4,14E +03	2,51E -03	9,11E +02	1,28E +01	6,75E -06	1,19E -06	2,99E- 07	1,19E- 06
1,2,3- Trimethyl tetralin	1,30E+ 01	1,74E +02	2,08E +00	5,65E +03	7,56E +03	1,73E -03	1,21E +03	5,55E +00	7,87E -06	5,31E -06	1,33E- 06	5,31E- 06

1,2,4-Trimethyl tetralin	1,30E+01	1,74E+02	2,08E+00	5,65E+03	7,56E+03	1,73E-03	1,21E+03	5,55E+00	7,60E-06	1,72E-06	4,30E-07	1,72E-06
1,2,3,4-Tetramethyl tetralin	1,40E+01	1,88E+02	7,83E-01	1,04E+04	1,39E+04	1,21E-03	1,60E+03	2,85E+00	8,44E-06	2,48E-06	6,19E-07	2,48E-06
5,6-Dimethyl tetralin	1,20E+01	1,60E+02	3,31E+00	4,24E+03	5,68E+03	1,97E-03	6,29E+02	2,87E+00	1,21E-05	5,61E-06	1,40E-06	5,61E-06
6,7-Dimethyl tetralin	1,20E+01	1,60E+02	3,31E+00	4,24E+03	5,68E+03	1,97E-03	6,29E+02	3,27E+00	1,21E-05	5,61E-06	1,40E-06	5,61E-06
6,8-Dimethyl tetralin	1,20E+01	1,60E+02	3,31E+00	4,24E+03	5,68E+03	1,97E-03	6,29E+02	5,39E+00	2,28E-05	5,61E-06	1,40E-06	5,61E-06
5,6,7-Trimethyl tetralin	1,30E+01	1,74E+02	9,70E-01	9,08E+03	1,22E+04	1,23E-03	6,94E+02	1,52E+00	2,74E-05	5,67E-06	1,42E-06	5,67E-06
5,6,7,8-Tetramethyl tetralin	1,40E+01	1,88E+02	2,82E-01	1,95E+04	2,61E+04	7,85E-04	7,66E+02	4,43E-01	3,31E-05	5,74E-06	1,44E-06	5,74E-06
1-methyl 5-isopropyl tetralin	1,30E+01	1,88E+02	5,25E-01	1,33E+04	1,78E+04	1,02E-03	1,34E+03	1,95E+00	1,15E-05	3,37E-06	8,43E-07	3,37E-06
1-methyl	1,40E+01	1,88E+02	4,55E+00	1,45E+03	1,94E+03	9,60E-03	1,34E+03	9,25E+00	1,20E-05	6,20E-06	1,55E-07	6,20E-06

5-n-propyl tetralin	01	+02	-01	+04	+04	-04	+03	-01	-05	-06	06	06
1-methyl 5-2 methylpro pyl tetralin	1,50E+ 01	2,02E +02	1,70E -01	2,68E +04	3,58E +04	6,82E -04	1,77E +03	6,60E -01	1,27E -05	4,62E -06	1,15E- 06	4,62E- 06
1-methyl 5-2 methylbut yl tetralin	1,60E+ 01	2,16E +02	5,47E -02	5,40E +04	7,23E +04	4,58E -04	2,35E +03	2,32E -01	1,35E -05	3,96E -06	9,91E- 07	3,96E- 06
1-methyl 5-2 methylpen tyl tetralin	1,70E+ 01	2,30E +02	1,75E -02	1,09E +05	1,46E +05	3,05E -04	3,12E +03	8,51E -02	1,42E -05	3,40E -06	8,50E- 07	3,40E- 06
1-methyl 5-2 methylhex yl tetralin	1,80E+ 01	2,44E +02	5,59E -03	2,22E +05	2,97E +05	2,00E -04	4,14E +03	3,25E -02	1,49E -05	2,92E -06	7,30E- 07	2,92E- 06
1-methyl 5-2 methylhep tyl tetralin	1,90E+ 01	2,58E +02	1,78E -03	4,52E +05	6,04E +05	1,28E -04	5,50E +03	1,30E -02	1,56E -05	2,51E -06	6,26E- 07	2,51E- 06
2,4 dimethyloc tyl tetralin	2,00E+ 01	2,72E +02	7,28E -04	7,86E +05	1,05E +06	8,89E -05	8,78E +03	1,17E -02	1,32E -05	1,50E -06	3,76E- 07	1,50E- 06
2,4,6	2,10E+ 01	2,86E +02	2,66E -04	1,47E +05	1,96E +06	5,65E -05	1,16E +03	9,11E -02	1,40E -05	1,12E -06	2,80E- 07	1,12E- 06

trimethyloctyl tetralin	01	+02	-04	+06	+06	-05	+04	-03	-05	-06	07	06
2,4,6 trimethylnonyl tetralin	2,20E+01	3,01E+02	8,41E-05	3,00E+06	4,01E+06	3,14E-05	1,55E+04	3,89E-03	1,48E-05	9,61E-07	2,40E-07	9,61E-07
2,4,6 trimethyldodecyl tetralin	2,30E+01	3,15E+02	2,65E-05	6,13E+06	8,21E+06	1,62E-05	2,06E+04	1,67E-03	1,55E-05	8,25E-07	2,06E-07	8,25E-07
2,4,6,10 tetramethyldecyl tetralin	2,40E+01	3,29E+02	9,62E-06	1,15E+07	1,54E+07	8,42E-06	2,72E+04	1,31E-03	1,63E-05	6,15E-07	1,54E-07	6,15E-07
2,4,6,10 tetramethylundecyl tetralin	2,50E+01	3,43E+02	3,02E-06	2,36E+07	3,15E+07	3,58E-06	3,62E+04	5,55E-04	1,70E-05	5,28E-07	1,32E-07	5,28E-07
1,4 dimethylindane	1,10E+01	1,46E+02	1,30E+01	1,82E+03	2,44E+03	3,49E-03	5,70E+02	2,39E+01	9,53E-06	4,02E-06	1,01E-06	4,02E-06
1-ethyl 4-methylindane	1,20E+01	1,60E+02	4,27E+00	3,62E+03	4,85E+03	2,22E-03	7,57E+02	9,04E+00	1,03E-05	3,45E-06	8,63E-07	3,45E-06
1,4 diethyl	1,30E+01	1,74E+02	1,40E+00	7,24E+03	9,69E+03	1,45E-03	1,00E+02	2,93E+00	1,04E-05	3,12E-06	7,80E-07	3,12E-06

indane	01	+02	+00	+03	+03	-03	+03	+00	-05	-06	07	06
1-ethyl 4-propylin dane	1,40E+ 01	1,88E +02	4,55E -01	1,45E +04	1,94E +04	9,60E -04	1,34E +03	9,73E -01	1,11E -05	2,68E -06	6,70E- 07	2,68E- 06
1-ethyl 4-butylindan e	1,50E+ 01	2,02E +02	1,47E -01	2,93E +04	3,91E +04	6,43E -04	1,77E +03	3,35E -01	1,18E -05	2,30E -06	5,75E- 07	2,30E- 06
1-ethyl 4-isopentylin dane	1,60E+ 01	2,16E +02	5,47E -02	5,40E +04	7,23E +04	4,58E -04	2,35E +03	2,43E -01	1,27E -05	1,71E -06	4,28E- 07	1,71E- 06
1-ethyl 4-2methypen yl lindane	1,70E+ 01	2,30E +02	1,75E -02	1,09E +05	1,46E +05	3,05E -04	3,12E +03	8,84E -02	1,34E -05	1,47E -06	3,68E- 07	1,47E- 06
1-ethyl 4-2methylhe xy lindane	1,80E+ 01	2,58E +02	1,78E -03	4,52E +05	6,04E +05	1,28E -04	5,50E +03	1,33E -02	1,48E -05	1,08E -06	2,71E- 07	1,08E- 06
1-ethyl 4-2methylhe ptylindane	1,90E+ 01	2,72E +02	5,64E -04	9,20E +05	1,23E +06	7,85E -05	7,30E +03	5,59E -03	1,55E -05	9,29E -07	2,32E- 07	9,29E- 07
1-ethyl 4-2methyooct yllindane	2,00E+ 01	2,72E +02	5,64E -04	9,20E +05	1,23E +06	7,85E -05	7,30E +03	5,59E -03	1,55E -05	9,29E -07	2,32E- 07	9,29E- 07
1-ethyl 4-2,6 dimethyloc tylindane	2,10E+ 01	2,86E +02	2,06E -04	1,72E +06	2,30E +06	4,94E -05	9,69E +03	4,37E -03	1,63E -05	6,93E -07	1,73E- 07	6,93E- 07

Naphthalene	1,00E+01	1,28E+02	3,10E+01	1,06E+03	1,42E+03	4,82E-03	4,46E+01	1,13E+01	1,08E-05	1,44E-06	3,61E-07	1,44E-06
2-Methylnaphthalene	1,10E+01	1,42E+02	2,46E+01	1,22E+03	1,64E+03	4,73E-03	5,25E+01	7,33E+00	2,62E-05	9,03E-07	2,26E-07	9,03E-07
2-Ethylnaphthalene	1,20E+01	1,56E+02	8,01E+00	2,45E+03	3,28E+03	2,93E-03	5,45E+01	4,21E+00	2,74E-05	1,32E-06	3,30E-07	1,32E-06
2-Propylnaphthalene	1,30E+01	1,70E+02	5,96E+00	2,95E+03	3,94E+03	2,77E-03	1,03E+02	4,41E-01	2,81E-05	1,13E-06	2,83E-07	1,13E-06
2-Butylnaphthalene	1,40E+01	1,84E+02	1,94E+00	5,91E+03	7,90E+03	1,77E-03	1,38E+02	3,97E-01	2,88E-05	9,72E-07	2,43E-07	9,72E-07
2-Pentylnaphthalene	1,50E+01	1,98E+02	6,29E-01	1,19E+04	1,59E+04	1,16E-03	1,82E+02	5,92E-02	2,95E-05	8,35E-07	2,09E-07	8,35E-07
2-Hexylnaphthalene	1,60E+01	2,12E+02	2,03E-01	2,40E+04	3,21E+04	7,70E-04	2,42E+02	7,21E-02	3,02E-05	7,16E-07	1,79E-07	7,16E-07
2-iso-Propylnaphthalene	1,30E+01	1,70E+02	6,89E+00	2,69E+03	3,61E+03	2,97E-03	1,03E+02	6,91E-01	2,68E-05	6,17E-07	1,54E-07	6,17E-07
2-iso-Butylnaphthalene	1,40E+01	1,84E+02	2,24E+00	5,40E+03	7,23E+03	1,90E-03	1,38E+02	3,19E-01	2,88E-05	8,44E-07	2,11E-07	8,44E-07

thalene												
2-iso-Pentyl-naphthalene	1,50E+01	1,98E+02	7,26E-01	1,09E+04	1,45E+04	1,24E-03	1,82E+02	1,17E-01	2,95E-05	7,25E-07	1,81E+07	7,25E-07
2-iso-Hexyl-naphthalene	1,60E+01	2,12E+02	2,34E-01	2,19E+04	2,93E+04	8,18E-04	2,42E+02	4,45E-02	3,02E-05	6,22E-07	1,55E+07	6,22E-07
2-iso-Heptyl-naphthalene	1,70E+01	2,26E+02	7,51E-02	4,44E+04	5,94E+04	5,46E-04	3,22E+02	1,77E-02	3,09E-05	5,34E-07	1,33E+07	5,34E-07
2-(2-Methylbutyl)-naphthalene	1,50E+01	1,98E+02	7,26E-01	1,09E+04	1,45E+04	1,24E-03	1,82E+02	1,17E-01	2,96E-05	7,25E-07	1,81E+07	7,25E-07
2-(2-Methylpentyl)-naphthalene	1,60E+01	2,12E+02	2,34E-01	2,19E+04	2,93E+04	8,18E-04	2,42E+02	4,45E-02	3,03E-05	6,22E-07	1,55E+07	6,22E-07
2-(2-Methylhexyl)-naphthalene	1,70E+01	2,26E+02	7,51E-02	4,44E+04	5,94E+04	5,46E-04	3,22E+02	1,77E-02	3,10E-05	5,34E-07	1,33E+07	5,34E-07
2-(3-Methylpentyl)-naphthalene	1,60E+01	2,12E+02	2,34E-01	2,19E+04	2,93E+04	8,18E-04	2,42E+02	4,45E-02	3,03E-05	6,22E-07	1,55E+07	6,22E-07

2-(3-Methylhexyl)naphthalene	1,70E+01	2,26E+02	7,51E-02	4,44E+04	5,94E+04	5,46E-04	3,22E+02	1,77E-02	3,10E-05	5,34E-07	1,33E+07	5,34E-07
2-(4-Methylhexyl)naphthalene	1,70E+01	2,26E+02	7,51E-02	4,44E+04	5,94E+04	5,46E-04	3,22E+02	1,77E-02	3,10E-05	5,34E-07	1,33E+07	5,34E-07
1-Methylnaphthalene	1,10E+01	1,42E+02	2,50E+01	1,21E+03	1,62E+03	4,77E-03	5,21E+01	8,93E+00	2,65E-05	9,03E-07	2,26E+07	9,03E-07
1-Ethylnaphthalene	1,20E+01	1,56E+02	1,07E+01	2,05E+03	2,74E+03	3,39E-03	6,94E+01	6,96E+00	2,74E-05	1,32E-06	3,30E+07	1,32E-06
1-Propylnaphthalene	1,30E+01	1,70E+02	5,96E+00	2,95E+03	3,94E+03	2,77E-03	1,03E+02	9,61E-01	2,81E-05	1,13E-06	2,83E+07	1,13E-06
1-Butylnaphthalene	1,40E+01	1,84E+02	1,94E+00	5,91E+03	7,90E+03	1,77E-03	1,38E+02	4,59E-01	2,88E-05	9,72E-07	2,43E+07	9,72E-07
1-Pentylnaphthalene	1,50E+01	1,98E+02	6,29E-01	1,19E+04	1,59E+04	1,16E-03	1,82E+02	5,92E-02	2,95E-05	8,35E-07	2,09E+07	8,35E-07
1-Hexylnaphthalene	1,60E+01	2,12E+02	2,03E-01	2,40E+04	3,21E+04	7,70E-04	2,42E+02	8,03E-02	3,02E-05	7,16E-07	1,79E+07	7,16E-07

1,2-Dimethylnaphthalene	1,20E+01	1,56E+02	1,49E+01	1,67E+03	2,24E+03	4,00E-03	6,49E+01	1,69E+00	3,47E-05	5,65E-07	1,41E-07	5,65E-07
2,3-Dimethylnaphthalene	1,20E+01	1,56E+02	1,99E+00	5,82E+03	7,78E+03	1,52E-03	9,32E+01	1,47E-01	3,84E-05	5,65E-07	1,41E-07	5,65E-07
2,4-Dimethylnaphthalene	1,20E+01	1,56E+02	8,00E+00	2,46E+03	3,29E+03	2,93E-03	6,49E+01	3,09E+00	3,47E-05	5,65E-07	1,41E-07	5,65E-07
2,5-Dimethylnaphthalene	1,20E+01	1,56E+02	1,15E+01	1,96E+03	2,62E+03	3,51E-03	6,49E+01	1,95E+00	3,47E-05	5,65E-07	1,41E-07	5,65E-07
2,6-Dimethylnaphthalene	1,20E+01	1,56E+02	2,00E+00	5,80E+03	7,76E+03	1,53E-03	6,49E+01	7,57E-01	3,47E-05	5,65E-07	1,41E-07	5,65E-07
2,7-Dimethylnaphthalene	1,20E+01	1,56E+02	2,00E+00	5,80E+03	7,76E+03	1,53E-03	6,49E+01	7,57E-01	3,47E-05	5,65E-07	1,41E-07	5,65E-07
2,8-Dimethylnaphthalene	1,20E+01	1,56E+02	1,15E+01	1,96E+03	2,62E+03	3,51E-03	6,49E+01	1,95E+00	3,47E-05	5,65E-07	1,41E-07	5,65E-07
1,2,3-Trimethylnaphthalene	1,30E+01	1,70E+02	4,78E+00	3,38E+03	4,52E+03	2,49E-03	7,16E+01	3,36E-01	6,20E-05	3,53E-07	8,83E-08	3,53E-07
1,2,4-Trimethylnaphthalene	1,30E+01	1,70E+02	4,78E+00	3,38E+03	4,52E+03	2,49E-03	7,16E+01	3,37E-01	6,20E-05	3,53E-07	8,83E-08	3,53E-07

Trimethyl naphthalene	01	+02	+00	+03	+03	-03	+01	-01	-05	-07	08	07
1,2,5- Trimethyl naphthalene	1,30E+ 01	1,70E +02	4,78E +00	3,38E +03	4,52E +03	2,49E -03	7,16E +01	5,41E -01	6,20E -05	3,53E -07	8,83E- 08	3,53E- 07
2,3,4- Trimethyl naphthalene	1,30E+ 01	1,70E +02	4,78E +00	3,38E +03	4,52E +03	2,49E -03	7,16E +01	3,36E -01	6,20E -05	3,53E -07	8,83E- 08	3,53E- 07
2,3,5- Trimethyl naphthalene	1,30E+ 01	1,70E +02	4,78E +00	3,38E +03	4,52E +03	2,49E -03	7,16E +01	3,36E -01	6,20E -05	3,53E -07	8,83E- 08	3,53E- 07
2,3,6- Trimethyl naphthalene	1,30E+ 01	1,70E +02	1,70E +00	6,41E +03	8,58E +03	1,54E -03	7,16E +01	3,36E -01	6,20E -05	3,53E -07	8,83E- 08	3,53E- 07
2,3,7- Trimethyl naphthalene	1,30E+ 01	1,70E +02	1,70E +00	6,41E +03	8,58E +03	1,54E -03	7,16E +01	3,36E -01	6,20E -05	3,53E -07	8,83E- 08	3,53E- 07
2,3,8- Trimethyl naphthalene	1,30E+ 01	1,70E +02	4,78E +00	3,38E +03	4,52E +03	2,49E -03	7,16E +01	3,36E -01	6,20E -05	3,53E -07	8,83E- 08	3,53E- 07

2,4,5-Trimethylnaphthalene	1,30E+01	1,70E+02	4,78E+00	3,38E+03	4,52E+03	2,49E-03	7,16E+01	3,36E-01	6,20E-05	3,53E-07	8,83E-08	3,53E-07
2,4,6-Trimethylnaphthalene	1,30E+01	1,70E+02	4,78E+00	3,38E+03	4,52E+03	2,49E-03	7,16E+01	6,45E-01	6,20E-05	3,53E-07	8,83E-08	3,53E-07
2,4,7-Trimethylnaphthalene	1,30E+01	1,70E+02	4,78E+00	3,38E+03	4,52E+03	2,49E-03	7,16E+01	6,45E-01	6,20E-05	3,53E-07	8,83E-08	3,53E-07
2,4,8-Trimethylnaphthalene	1,30E+01	1,70E+02	4,78E+00	3,38E+03	4,52E+03	2,49E-03	7,16E+01	3,36E-01	6,20E-05	3,53E-07	8,83E-08	3,53E-07
1,2,3,4-Tetramethylnaphthalene	1,40E+01	1,84E+02	1,39E+00	7,26E+03	9,71E+03	1,53E-03	7,90E+01	1,04E-01	1,00E-04	2,21E-07	5,52E-08	2,21E-07
2,3,4,5-Tetramethylnaphthalene	1,40E+01	1,84E+02	1,39E+00	7,26E+03	9,71E+03	1,53E-03	7,90E+01	1,04E-01	1,00E-04	2,21E-07	5,52E-08	2,21E-07
2,3,4,6-Tetramethylnaphthalene	1,40E+01	1,84E+02	1,39E+00	7,26E+03	9,71E+03	1,53E-03	7,90E+01	1,04E-01	1,00E-04	2,21E-07	5,52E-08	2,21E-07

ene												
2,3,4,7-Tetramethylnaphthalene	1,40E+01	1,84E+02	1,39E+00	7,26E+03	9,71E+03	1,53E-03	7,90E+01	1,04E-01	1,00E-04	2,21E-07	5,52E-08	2,21E-07
2,3,4,8-Tetramethylnaphthalene	1,40E+01	1,84E+02	1,39E+00	7,26E+03	9,71E+03	1,53E-03	7,90E+01	1,04E-01	1,00E-04	2,21E-07	5,52E-08	2,21E-07
6-n-Butyl-2,3-dimethylnaphthalene	1,5E+01	2,12E+02	4,19E-02	6,37E+04	8,52E+04	4,03E-04	1,67E+02	1,73E-02	8,82E-05	3,80E-07	9,51E-08	3,80E-07
2,3-Dimethyl-5(4methylpentyl)naphthalene	1,7E+01	2,40E+02	6,70E-03	1,98E+05	2,66E+05	2,13E-04	2,95E+02	5,51E-03	9,01E-05	2,43E-07	6,08E-08	2,43E-07
Acenaphthylene	1,20E+01	1,52E+02	1,61E+01	1,59E+03	2,13E+03	4,06E-03	1,27E+01	8,91E-01	2,31E-04	2,61E-07	6,53E-08	2,61E-07
Methylacenaphthylene	1,30E+01	1,66E+02	7,37E-01	1,08E+04	1,44E+04	1,04E-03	6,13E+00	1,57E-01	2,22E-04	1,63E-07	4,09E-08	1,63E-07
Ethylacenaphthylene	1,40E+01	1,80E+02	2,41E-01	2,16E+04	2,88E+04	7,03E-04	8,13E+00	5,71E-02	2,22E-04	2,39E-07	5,98E-08	2,39E-07

ylene												
n-Propyl acenaphth ylene	1,50E+ 01	1,94E +02	7,81E -02	4,33E +04	5,80E +04	4,76E -04	1,08E +01	2,16E -02	2,22E -04	2,05E -07	5,13E- 08	2,05E- 07
n-Butyl acenaphth ylene	1,60E+ 01	2,08E +02	2,52E -02	8,74E +04	1,17E +05	3,21E -04	1,44E +01	8,56E -03	2,23E -04	1,76E -07	4,40E- 08	1,76E- 07
n-Pentyl acenaphth ylene	1,70E+ 01	2,22E +02	8,09E -03	1,77E +05	2,36E +05	2,13E -04	1,90E +01	4,25E -03	2,24E -04	1,51E -07	3,78E- 08	1,51E- 07
n-Hexyl acenaphth ylene	1,80E+ 01	2,36E +02	2,59E -03	3,58E +05	4,79E +05	1,39E -04	2,53E +01	1,84E -03	2,25E -04	1,30E -07	3,24E- 08	1,30E- 07
iso-Propyl acenaphth ylene	1,50E+ 01	1,94E +02	9,02E -02	3,96E +04	5,30E +04	5,05E -04	1,08E +01	4,25E -02	2,22E -04	1,12E -07	2,79E- 08	1,12E- 07
iso-Butyl acenaphth ylene	1,60E+ 01	2,08E +02	2,91E -02	7,99E +04	1,07E +05	3,40E -04	1,44E +01	1,64E -02	2,23E -04	1,53E -07	3,82E- 08	1,53E- 07
iso-Pentyl acenaphth ylene	1,70E+ 01	2,22E +02	9,35E -03	1,62E +05	2,16E +05	2,27E -04	1,90E +01	6,63E -03	2,24E -04	1,31E -07	3,28E- 08	1,31E- 07
Phenanthr ene	1,40E+ 01	1,78E +02	1,15E +00	8,17E +03	1,09E +04	1,36E -03	4,28E +00	1,61E -02	6,50E -06	5,36E -07	1,34E- 07	5,36E- 07
Anthracen	1,40E+ 01	1,78E +02	4,34E -02	6,23E +04	8,34E +04	3,43E -04	5,63E +01	3,56E -03	2,00E -04	6,52E -07	1,63E- 08	6,52E- 07

e	01	+02	-02	+04	+04	-04	+00	-04	-05	-08	08	08
Hydro- Phenanthr ene	1,40E+ 01	1,92E +02	4,87E -01	1,39E +04	1,86E +04	1,01E -03	4,84E +04	4,53E +00	1,43E -05	6,86E -08	1,71E- 08	6,86E- 08
Methyl- hydro- Phenanthr ene	1,50E+ 01	2,06E +02	1,82E -01	2,57E +04	3,43E +04	7,16E -04	6,43E +04	2,33E +00	1,51E -05	5,61E -08	1,40E- 08	5,61E- 08
Ethyl- hydro- Phenanthr ene	1,60E+ 01	2,20E +02	5,84E -02	5,19E +04	6,94E +04	4,79E -04	8,54E +04	8,44E -01	1,60E -05	8,48E -08	2,12E- 08	8,48E- 08
n-Propyl- hydro- Phenanthr ene	1,70E+ 01	2,34E +02	1,87E -02	1,05E +05	1,41E +05	3,19E -04	1,13E +05	3,16E -01	1,67E -05	7,28E -08	1,82E- 08	7,28E- 08
n-Butyl- hydro- Phenanthr ene	1,80E+ 01	2,48E +02	5,96E -03	2,13E +05	2,86E +05	2,09E -04	1,51E +05	1,23E -01	1,75E -05	6,24E -08	1,56E- 08	6,24E- 08
n-Pentyl- hydro- Phenanthr ene	1,90E+ 01	2,62E +02	1,90E -03	4,34E +05	5,81E +05	1,34E -04	2,00E +05	4,99E -02	1,82E -05	5,36E -08	1,34E- 08	5,36E- 08
n-Hexyl- hydro- Phenanthr	2,00E+ 01	2,77E +02	6,01E -04	8,86E +05	1,19E +06	8,22E -05	2,65E +05	2,11E -02	1,89E -05	4,60E -08	1,15E- 08	4,60E- 08

ene												
iso-Propyl- hydro- Phenanthr ene	1,70E+ 01	2,34E +02	2,16E -02	9,61E +04	1,29E +05	3,39E -04	1,13E +05	7,43E -01	1,67E -05	6,32E -08	1,58E- 08	6,32E- 08
iso-Butyl- hydro- Phenanthr ene	1,80E+ 01	2,48E +02	6,89E -03	1,95E +05	2,61E +05	2,23E -04	1,51E +05	2,80E -01	1,75E -05	5,42E -08	1,36E- 08	5,42E- 08
iso-Pentyl- hydro- Phenanthr ene	1,90E+ 01	2,62E +02	2,19E -03	3,97E +05	5,31E +05	1,43E -04	2,00E +05	9,36E -02	1,82E -05	4,65E -08	1,16E- 08	4,65E- 08
iso-Hexyl- hydro- Phenanthr ene	2,00E+ 01	2,77E +02	6,94E -04	8,10E +05	1,08E +06	8,82E -05	2,65E +05	3,87E -02	1,89E -05	3,99E -08	9,98E- 09	3,99E- 08
2- methylhex yl-hydro- Phenanthr ene	2,10E+ 01	2,91E +02	2,20E -04	1,65E +06	2,21E +06	5,17E -05	3,53E +05	1,67E -02	1,97E -05	3,43E -08	8,57E- 09	3,43E- 08
2- methylhep yl-hydro- Phenanthr ene	2,20E+ 01	3,05E +02	6,92E -05	3,38E +06	4,52E +06	2,84E -05	4,68E +05	7,39E -03	2,04E -05	2,94E -08	7,35E- 09	2,94E- 08

2,6-dimethylheptyl-hydro-Phenanthrene	2,30E+01	3,19E+02	2,52E-05	6,33E+06	8,47E+06	1,59E-05	6,21E+05	5,87E-03	2,11E-05	2,19E-08	5,48E-09	2,19E-08
2,6-dimethyl-octyl-hydro-Phenanthrene	2,40E+01	3,33E+02	7,91E-06	1,30E+07	1,74E+07	7,39E-06	8,24E+05	2,59E-03	2,20E-05	1,88E-08	4,70E-09	1,88E-08
2,6-dimethylnonyl-hydro-Phenanthrene	2,50E+01	3,47E+02	2,48E-06	2,66E+07	3,56E+07	3,08E-06	1,09E+06	1,13E-03	2,27E-05	1,61E-08	4,04E-09	1,61E-08
2-methyl-Adamantane	1,10E+01	1,50E+02	4,20E+00	3,66E+03	4,90E+03	2,07E-03	2,07E+04	1,33E+02	1,23E-05	1,27E-07	3,18E-08	1,27E-07
2-ethyl-Adamantane	1,20E+01	1,64E+02	1,38E+00	7,30E+03	9,76E+03	1,36E-03	2,75E+04	5,15E+01	1,32E-05	1,92E-07	4,80E-08	1,92E-07
1,3,5-Trimethyladamantane	1,30E+01	1,78E+02	4,88E-01	1,39E+04	1,86E+04	9,36E-04	3,65E+04	5,72E+01	6,30E-06	3,25E-10	8,13E-11	3,25E-10

Hydro- Chrysene	1,80E+ 01	2,46E +02	3,38E -02	7,27E +04	9,73E +04	4,28E -04	6,64E +04	4,05E -03	1,93E -05	1,18E -08	2,96E- 09	1,18E- 08
Methyl- hydro- Chrysene	1,90E+ 01	2,60E +02	1,24E -02	1,35E +05	1,81E +05	3,00E -04	8,81E +04	4,53E -02	2,02E -05	7,14E -08	1,79E- 08	7,14E- 08
Ethyl- hydro- Chrysene	2,00E+ 01	2,74E +02	3,94E -03	2,76E +05	3,69E +05	1,94E -04	1,16E +05	1,92E -02	2,11E -05	1,46E -08	3,66E- 09	1,46E- 08
n-Propyl- hydro- Chrysene	2,10E+ 01	2,89E +02	1,25E -03	5,63E +05	7,53E +05	1,21E -04	1,55E +05	8,37E -03	2,18E -05	1,25E -08	3,14E- 09	1,25E- 08
n-Butyl- hydro- Chrysene	2,20E+ 01	3,03E +02	3,94E -04	1,15E +06	1,54E +06	7,29E -05	2,07E +05	3,68E -03	2,25E -05	1,08E -08	2,69E- 09	1,08E- 08
iso-Propyl- hydro- Chrysene	2,10E+ 01	2,89E +02	1,44E -03	5,15E +05	6,88E +05	1,30E -04	1,55E +05	1,52E -02	2,18E -05	1,09E -08	2,72E- 09	1,09E- 08
iso-Butyl- hydro- Chrysene	2,20E+ 01	3,03E +02	4,55E -04	1,05E +06	1,41E +06	7,84E -05	2,07E +05	6,67E -03	2,25E -05	9,35E -09	2,34E- 09	9,35E- 09
2- methylbut yl-hydro- Chrysene	2,30E+ 01	3,17E +02	1,43E -04	2,15E +06	2,88E +06	4,48E -05	2,74E +05	2,93E -03	2,33E -05	8,02E -09	2,01E- 09	8,02E- 09
2- methylpen	2,40E+ 01	3,31E +02	4,50E -04	4,41E +06	5,91E +06	2,38E -05	3,64E +05	1,28E -03	2,40E -05	6,89E -09	1,72E- 09	6,89E- 09

tyl-hydro- Chrysene	01	+02	-05	+06	+06	-05	+05	-03	-05	-09	09	09
(5alpha)- Androstan e	1,90E+ 01	2,60E +02	1,25E -02	1,35E +05	1,81E +05	3,00E -04	8,81E +04	7,04E -02	1,37E -05	1,30E -08	3,24E- 09	1,30E- 08
(5beta)- Pregnane	2,10E+ 01	2,89E +02	1,45E -03	5,14E +05	6,87E +05	1,30E -04	1,55E +05	1,97E -02	1,51E -05	1,60E -08	4,00E- 09	1,60E- 08
Hydro- Picene	2,20E+ 01	3,01E +02	2,24E -03	3,92E +05	5,24E +05	1,65E -04	9,09E +04	2,59E -03	2,43E -05	1,82E -09	4,54E- 10	1,82E- 09
Methyl- hydro- Picene	2,30E+ 01	3,15E +02	8,15E -04	7,33E +05	9,81E +05	1,08E -04	1,21E +05	1,45E -03	2,52E -05	1,10E -08	2,74E- 09	1,10E- 08
Octahydro - phenanthr ene	1,40E+ 01	1,86E +02	2,88E +00	4,63E +03	6,20E +03	2,15E -03	7,07E +02	7,05E -01	1,03E -05	2,10E -08	5,26E- 09	2,10E- 08
Methyl- octahydro- phenanthr ene	1,50E+ 01	2,00E +02	1,08E +00	8,52E +03	1,14E +04	1,48E -03	9,39E +02	3,36E -01	1,11E -05	1,72E -08	4,30E- 09	1,72E- 08
Ethyl- octahydro- phenanthr ene	1,60E+ 01	2,14E +02	3,46E -01	1,72E +04	2,30E +04	9,73E -04	1,25E +03	1,21E -01	1,21E -05	2,60E -08	6,50E- 09	2,60E- 08
n-Propyl- octahydro-	1,70E+ 01	2,28E +02	1,11E -01	3,48E +04	4,66E +04	6,46E -04	1,65E +03	4,53E -02	1,28E -05	2,23E -08	5,58E- 09	2,23E- 08

phenanthrene												
n-Butyl-octahydro-phenanthrene	1,80E+01	2,42E+02	3,55E-02	7,07E+04	9,46E+04	4,30E-04	2,20E+03	1,77E-02	1,35E-05	1,91E-08	4,79E-09	1,91E-08
n-Pentyl-octahydro-phenanthrene	1,90E+01	2,56E+02	1,13E-02	1,44E+05	1,92E+05	2,83E-04	2,92E+03	7,29E-03	1,42E-05	1,64E-08	4,11E-09	1,64E-08
n-Hexyl-octahydro-phenanthrene	2,00E+01	2,70E+02	3,58E-03	2,93E+05	3,92E+05	1,83E-04	3,87E+03	3,09E-03	1,49E-05	1,41E-08	3,53E-09	1,41E-08
n-Heptyl-octahydro-phenanthrene	2,10E+01	2,84E+02	1,13E-03	5,97E+05	7,99E+05	1,15E-04	5,14E+03	1,32E-03	1,56E-05	1,21E-08	3,03E-09	1,21E-08
iso-Propyl-octahydro-phenanthrene	1,70E+01	2,28E+02	1,28E-01	3,18E+04	4,26E+04	6,86E-04	1,65E+03	8,93E-02	1,28E-05	1,94E-08	4,84E-09	1,94E-08
iso-Butyl-octahydro-phenanthrene	1,80E+01	2,42E+02	4,10E-02	6,46E+04	8,65E+04	4,56E-04	2,20E+03	3,41E-02	1,35E-05	1,66E-08	4,16E-09	1,66E-08
iso-Pentyl-	1,90E+01	2,56E+02	1,30E-02	1,31E+05	1,76E+05	3,01E-04	2,92E+03	1,36E-03	1,42E-05	1,43E-08	3,57E-09	1,43E-08

octahydro-phenanthrene	01	+02	-02	+05	+05	-04	+03	-02	-05	-08	09	08
iso-Hexyl-octahydro-phenanthrene	2,00E+01	2,70E+02	4,14E-03	2,68E+05	3,58E+05	1,95E-04	3,87E+03	5,72E-03	1,49E-05	1,22E-08	3,06E-09	1,22E-08
iso-Heptyl-octahydro-phenanthrene	2,10E+01	2,84E+02	1,31E-03	5,46E+05	7,31E+05	1,22E-04	5,14E+03	2,44E-03	1,56E-05	1,05E-08	2,63E-09	1,05E-08
isohexyl-octahydro-phenanthrene	2,10E+01	2,84E+02	1,31E-03	5,46E+05	7,31E+05	1,22E-04	5,14E+03	2,44E-03	1,57E-05	1,05E-08	2,63E-09	1,05E-08
isoheptyl-octahydro-phenanthrene	2,20E+01	2,99E+02	4,14E-04	1,12E+06	1,49E+06	7,37E-05	6,83E+03	1,03E-03	1,64E-05	9,02E-09	2,26E-09	9,02E-09
2,6-dimethyleptyl-octahydro-phenanthrene	2,30E+01	3,13E+02	1,51E-04	2,09E+06	2,79E+06	4,54E-05	9,06E+03	8,13E-04	1,71E-05	6,72E-09	1,68E-09	6,72E-09
bicyclohexyl-benzene	1,80E+01	2,42E+02	1,03E-02	1,52E+05	2,03E+05	2,58E-04	2,64E+03	1,81E-02	1,38E-05	6,76E-08	1,69E-08	6,76E-08

methyl- bicylohexy l-benzene	1,90E+ 01	2,56E +02	3,79E -03	2,83E +05	3,78E +05	1,78E -04	3,50E +03	9,88E -03	1,46E -05	9,74E -08	2,44E- 08	9,74E- 08
ethyl- bicylohexy l-benzene	2,00E+ 01	2,70E +02	1,20E -03	5,75E +05	7,70E +05	1,12E -04	4,66E +03	4,23E -03	1,55E -05	8,36E -08	2,09E- 08	8,36E- 08
isopropyl- bicylohexy l-benzene	2,10E+ 01	2,84E +02	4,40E -04	1,07E +06	1,44E +06	7,25E -05	6,18E +03	3,32E -03	1,62E -05	6,23E -08	1,56E- 08	6,23E- 08
isobutyl- bicylohexy l-benzene	2,20E+ 01	2,99E +02	1,39E -04	2,19E +06	2,93E +06	4,15E -05	8,21E +03	1,41E -03	1,69E -05	5,35E -08	1,34E- 08	5,35E- 08
isopentyyl- bicylohexy l-benzene	2,30E+ 01	3,13E +02	4,38E -05	4,49E +06	6,01E +06	2,21E -05	1,09E +04	6,01E -04	1,78E -05	4,59E -08	1,15E- 08	4,59E- 08
Dodecahy dro- Chrysene	1,80E+ 01	2,40E +02	2,01E -01	2,41E +04	3,22E +04	8,70E -04	9,68E +02	1,22E -02	1,53E -05	1,38E -08	3,46E- 09	1,38E- 08
Methyl- dodecahyd ro- chrysene	1,90E+ 01	2,54E +02	7,41E -02	4,48E +04	5,99E +04	6,10E -04	1,29E +03	6,60E -03	1,62E -05	8,36E -08	2,09E- 08	8,36E- 08
Ethyl- dodecahyd ro- chrysene	2,00E+ 01	2,68E +02	2,35E -02	9,11E +04	1,22E +05	4,02E -04	1,71E +03	2,80E -03	1,71E -05	1,71E -08	4,28E- 09	1,71E- 08

n-Propyl- dodecahyd ro- chrysene	2,10E+ 01	2,82E +02	7,45E -03	1,86E +05	2,49E +05	2,62E -04	2,27E +03	1,19E -03	1,78E -05	1,47E -08	3,67E- 09	1,47E- 08
iso-Propyl- dodecahyd ro- chrysene	2,10E+ 01	2,82E +02	8,61E -03	1,70E +05	2,27E +05	2,78E -04	2,27E +03	2,20E -03	1,78E -05	1,28E -08	3,19E- 09	1,28E- 08
iso-Butyl- dodecahyd ro- chrysene	2,20E+ 01	2,97E +02	2,72E -03	3,47E +05	4,65E +05	1,78E -04	3,01E +03	9,33E -04	1,85E -05	1,09E -08	2,74E- 09	1,09E- 08
Octahydro - benzo(b)th iophene	8,00E+ 00	1,42E +02	1,67E +02	3,74E +02	5,00E +02	1,40E -02	8,47E +01	6,75E +01	1,55E -05	9,68E -08	2,42E- 08	9,68E- 08
Methyl octahydro- benzo(b)th iophene	9,00E+ 00	1,56E +02	6,37E +01	6,79E +02	9,08E +02	8,74E -03	1,12E +02	3,33E +01	1,63E -05	1,39E -07	3,49E- 08	1,39E- 07
Ethyl octahydro- benzo(b)th iophene	1,00E+ 01	1,70E +02	2,09E +01	1,35E +03	1,81E +03	5,20E -03	1,49E +02	1,25E +01	1,72E -05	1,20E -07	2,99E- 08	1,20E- 07
Propyl octahydro- benzo(b)th	1,10E+ 01	1,84E +02	6,80E +00	2,72E +03	3,63E +03	3,20E -03	1,99E +02	3,85E +00	1,79E -05	1,03E -07	2,57E- 08	1,03E- 07

iophene												
Methyl benzo(b)th iophene	9,00E+ 00	1,48E +02	7,37E +01	6,19E +02	8,29E +02	9,01E -03	3,19E +01	2,35E +00	3,92E -05	2,70E -07	6,75E- 08	2,70E- 07
Ethyl benzo(b)th iophene	1,00E+ 01	1,62E +02	2,43E +01	1,23E +03	1,65E +03	5,36E -03	4,24E +01	4,25E -01	3,78E -05	3,95E -07	9,88E- 08	3,95E- 07
Dihydro- benzo(b)th iophene	8,00E+ 00	1,36E +02	2,25E +02	3,10E +02	4,15E +02	1,60E -02	7,74E +00	1,96E +01	1,09E -05	1,12E -07	2,81E- 08	1,12E- 07
Methyl dihydro- benzo(b)th iophene	9,00E+ 00	1,50E +02	6,69E +01	6,58E +02	8,81E +02	8,63E -03	8,54E +00	6,23E +00	1,27E -05	1,14E -07	2,84E- 08	1,14E- 07
Ethyl dihydro- benzo(b)th iophene	1,00E+ 01	1,64E +02	2,20E +01	1,31E +03	1,75E +03	5,15E -03	1,13E +01	1,99E +00	1,31E -05	1,03E -07	2,57E- 08	1,03E- 07
Methyl hexahydro - naphtho[2 1b]thiophe ne	1,30E+ 01	2,04E +02	9,96E -01	8,94E +03	1,20E +04	1,46E -03	9,72E +00	5,19E -02	2,98E -05	3,27E -08	8,17E- 09	3,27E- 08
Tetrahydr o- naphtho[2	1,20E+ 01	1,88E +02	2,95E +00	4,56E +03	6,10E +03	2,20E -03	2,74E +01	3,00E -02	4,80E -05	4,03E -08	1,01E- 08	4,03E- 08

1b]thiophe ne												
Methyl tetrahydro - naphtho[2 1b]thiophe ne	1,30E+ 01	2,02E +02	1,10E +00	8,39E +03	1,12E +04	1,51E -03	3,64E +01	1,55E -02	4,88E -05	3,29E -08	8,23E- 09	3,29E- 08
Ethyl tetrahydro - naphtho[2 1b]thiophe ne	1,40E+ 01	2,16E +02	3,55E -01	1,69E +04	2,27E +04	9,93E -04	4,83E +01	6,28E -03	4,97E -05	4,98E -08	1,24E- 08	4,98E- 08
Naphtho[2 1b]thiophe ne	1,20E+ 01	1,84E +02	5,30E -01	1,32E +04	1,77E +04	1,00E -03	2,83E +00	8,11E -03	4,05E -06	2,90E -07	7,25E- 08	2,90E- 07
Methyl naphtho[2 1b]thiophe ne	1,30E+ 01	1,98E +02	3,28E -01	1,78E +04	2,38E +04	8,80E -04	3,12E +00	3,09E -03	1,06E -05	1,81E -07	4,54E- 08	1,81E- 07
Ethyl naphtho[2 1b]thiophe ne	1,40E+ 01	2,12E +02	1,06E -01	3,59E +04	4,81E +04	5,89E -04	4,14E +00	1,33E -03	1,06E -05	2,65E -07	6,64E- 08	2,65E- 07
Dihydro- naphtho[2	1,20E+ 01	1,86E +02	1,32E +01	1,80E +03	2,41E +03	4,48E -03	7,56E -01	2,56E -02	4,06E -05	7,55E -08	1,89E- 08	7,55E- 08

1b]thiophe ne												
Methyl dihydro- naphtho[2 1b]thiophe ne	1,30E+ 01	2,00E +02	3,81E +00	3,89E +03	5,20E +03	2,63E -03	8,34E -01	1,08E -02	7,02E -05	4,72E -08	1,18E- 08	4,72E- 08
4- Thiacyclop enta[def]p henanthre ne	1,40E+ 01	2,08E +02	2,69E -01	2,01E +04	2,69E +04	8,50E -04	4,57E -01	3,21E -04	2,50E -05	2,37E -07	5,91E- 08	2,37E- 07
Perhydro- dibenzothi ophene	1,20E+ 01	1,96E +02	2,45E +01	1,23E +03	1,64E +03	6,51E -03	1,16E +02	8,35E -01	2,35E -05	5,67E -08	1,42E- 08	5,67E- 08
Methyl perhydro- dibenzothi ophene	1,30E+ 01	2,10E +02	9,11E +00	2,27E +03	3,03E +03	4,21E -03	1,54E +02	3,91E -01	2,43E -05	4,64E -08	1,16E- 08	4,64E- 08
Ethyl perhydro- dibenzothi ophene	1,40E+ 01	2,24E +02	2,93E +00	4,58E +03	6,13E +03	2,61E -03	2,05E +02	1,37E -01	2,52E -05	7,01E -08	1,75E- 08	7,01E- 08
Perhydro- benzo[b]n aphtho[12 d]thiophen	1,60E+ 01	2,50E +02	1,69E +00	6,43E +03	8,61E +03	2,27E -03	1,59E +02	1,56E -02	2,85E -05	9,78E -09	2,45E- 09	9,78E- 09

e												
Methyl perhydro- benzo[b]n aphtho[12 d]thiophen e	1,70E+ 01	2,64E +02	6,21E -01	1,20E +04	1,60E +04	1,54E -03	2,11E +02	8,32E -03	2,93E -05	5,91E -08	1,48E- 08	5,91E- 08
Hexahydr o- dibenzothi ophene	1,20E+ 01	1,90E +02	8,70E +00	2,33E +03	3,12E +03	3,72E -03	1,06E +01	2,36E -01	1,87E -05	2,13E -08	5,33E- 09	2,13E- 08
Methyl hexahydro - dibenzothi ophene	1,30E+ 01	2,04E +02	3,25E +00	4,29E +03	5,74E +03	2,49E -03	1,41E +01	1,15E -01	1,95E -05	1,74E -08	4,36E- 09	1,74E- 08
Ethyl hexahydro - dibenzothi ophene	1,40E+ 01	2,18E +02	1,05E +00	8,67E +03	1,16E +04	1,60E -03	1,86E +01	4,25E -02	2,04E -05	2,64E -08	6,59E- 09	2,64E- 08
Dibenzothi ophene	1,20E+ 01	1,84E +02	1,47E +00	7,02E +03	9,39E +03	1,57E -03	3,42E +00	2,73E -02	4,05E -06	2,90E -07	7,25E- 08	2,90E- 07
Methyl dibenzothi ophene	1,30E+ 01	1,98E +02	3,28E -01	1,78E +04	2,38E +04	8,80E -04	3,12E +00	3,09E -03	1,06E -05	1,81E -07	4,54E- 08	1,81E- 07
Ethyl	1,40E+ 01	2,12E +02	1,06E +00	3,59E +03	4,81E +03	5,89E -03	4,14E +01	1,33E -02	1,06E -05	2,65E -08	6,64E- 09	2,65E- 08

dibenzothiophene	01	+02	-01	+04	+04	-04	+00	-03	-05	-07	08	07
5-Phenylbenzo[b]thiophene	1,40E+01	2,10E+02	3,38E+00	4,19E+03	5,61E+03	2,61E-03	2,22E+00	1,20E-03	2,78E-05	3,56E-07	8,89E-08	3,56E-07
Decahydro-1,9-dithiafluorene	1,10E+01	2,14E+02	1,23E+01	1,88E+03	2,51E+03	4,99E-03	7,02E-01	1,00E-01	6,65E-05	3,83E-08	9,56E-09	3,83E-08
Methyldecahydro-1,9-dithiafluorene	1,20E+01	2,28E+02	4,57E+00	3,48E+03	4,65E+03	3,27E-03	9,32E-01	4,95E-02	6,74E-05	3,13E-08	7,82E-09	3,13E-08
Ethyldecahydro-1,9-dithiafluorene	1,30E+01	2,42E+02	1,46E+00	7,05E+03	9,44E+03	2,05E-03	1,24E+00	1,88E-02	6,83E-05	4,73E-08	1,18E-08	4,73E-08
5,10-Dithiaindeno[2,1a]indene	1,40E+01	2,40E+02	8,12E-02	4,23E+04	5,66E+04	5,98E-04	1,50E-01	2,67E-05	2,50E-05	3,50E-07	8,75E-08	3,50E-07
Methyl 5,10-dithiaindeno[2,1a]	1,50E+01	2,54E+02	2,31E-02	9,21E+04	1,23E+05	3,78E-04	1,65E-01	1,07E-05	6,53E-05	9,12E-07	2,28E-07	9,12E-07

lindene												
Ethyl 5,10-dithia-indeno[2,1a]lindene	1,60E+01	2,68E+02	7,35E-03	1,87E+05	2,51E+05	2,47E-04	2,20E-01	4,51E-06	6,27E-05	3,21E-07	8,01E-08	3,21E-07
2-methyloctyl - hexadecahydro-picene	3,10E+01	4,21E+02	8,08E-08	2,23E+08	2,98E+08	1,10E-07	1,18E+04	2,65E-07	3,00E-05	1,54E-10	3,85E-11	1,54E-10

ANNEXE 5 - S3 – The eighteen refined fractions obtained by applying the TPHWG method and their properties obtained from correlations

Name	MW	S _w	K _{oc}	K _{ow}	EC ₅₀	K _H	P _{vap}	k _{degA}	k _{degW}	k _{degSéd}	k _{degSol}
	g/mol	mg/L	L _w /kg _{oct}	L _w /L _{oct}	mg/L	Pa.m ³ /mol	Pa	s ⁻¹	s ⁻¹	s ⁻¹	s ⁻¹
AL_EC 11-14	1,76E+02	1,08E-01	3,53E+04	4,73E+04	1,42E-02	5,82E+04	3,59E+01	9,38E-06	5,13E-07	1,47E-07	5,13E-07
AL_EC 14-17	2,17E+02	4,51E-03	2,54E+05	3,40E+05	3,74E-03	1,85E+05	3,84E+00	1,14E-05	2,74E-07	7,84E-08	2,74E-07
AL_EC 17-18	2,45E+02	5,41E-04	9,45E+05	1,26E+06	1,42E-03	3,92E+05	8,66E-01	1,29E-05	1,81E-07	5,16E-08	1,81E-07
AL_EC 18-21	2,73E+02	6,49E-05	3,52E+06	4,71E+06	4,82E-04	8,20E+05	1,95E-01	1,46E-05	1,19E-07	3,40E-08	1,19E-07
AL_EC 21-23	3,08E+02	4,59E-06	1,82E+07	2,43E+07	9,78E-05	2,03E+06	3,03E-02	1,69E-05	7,05E-08	2,01E-08	7,05E-08
AL_EC 23-25	3,35E+02	5,51E-07	6,77E+07	9,06E+07	2,08E-05	4,16E+06	6,83E-03	1,89E-05	4,64E-08	1,33E-08	4,64E-08
AL_EC 25-27	3,63E+02	6,61E-08	2,52E+08	3,37E+08	3,25E-06	8,45E+06	1,54E-03	2,11E-05	3,06E-08	8,73E-09	3,06E-08
AL_EC 27-30	3,97E+02	4,67E-09	1,30E+09	1,74E+09	1,84E-07	2,03E+07	2,39E-04	2,41E-05	1,81E-08	5,18E-09	1,81E-08

AR_EC 10-12	1,45E+02	1,12E+01	1,99E+03	2,67E+03	1,21E-01	7,81E+01	6,02E+00	1,30E-05	1,72E-06	4,91E-07	1,72E-06
AR_EC 12-14	1,73E+02	1,56E+00	6,78E+03	9,07E+03	5,17E-02	1,43E+02	1,28E+00	1,39E-05	8,76E-07	2,50E-07	8,76E-07
AR_EC 14-16	2,01E+02	2,16E-01	2,30E+04	3,08E+04	2,26E-02	2,55E+02	2,73E-01	1,49E-05	4,46E-07	1,28E-07	4,46E-07
AR_EC 16-18	2,29E+02	3,00E-02	7,83E+04	1,05E+05	9,94E-03	4,45E+02	5,83E-02	1,59E-05	2,28E-07	6,50E-08	2,28E-07
AR_EC 18-19	2,50E+02	6,83E-03	1,96E+05	2,62E+05	5,28E-03	6,70E+02	1,83E-02	1,67E-05	1,37E-07	3,92E-08	1,37E-07
AR_EC 19-22	2,79E+02	9,49E-04	6,67E+05	8,93E+05	2,17E-03	1,14E+03	3,89E-03	1,79E-05	6,99E-08	2,00E-08	6,99E-08
AR_EC 22-23	3,07E+02	1,32E-04	2,27E+06	3,04E+06	8,18E-04	1,93E+03	8,30E-04	1,91E-05	3,57E-08	1,02E-08	3,57E-08
AR_EC 23-25	3,28E+02	3,00E-05	5,68E+06	7,60E+06	3,62E-04	2,85E+03	2,60E-04	2,01E-05	2,15E-08	6,14E-09	2,15E-08
Sulfur compounds	2,01E+02	1,05E+00	8,65E+03	1,16E+04	1,47E-03	6,52E+00	3,41E-02	2,60E-05	9,33E-08	4,02E-08	9,33E-08
Olefins	1,89E+02	2,63E-02	8,51E+04	1,14E+05	7,70E-03	1,30E+05	1,80E+01	3,24E-04	7,34E-07	2,10E-07	7,34E-07

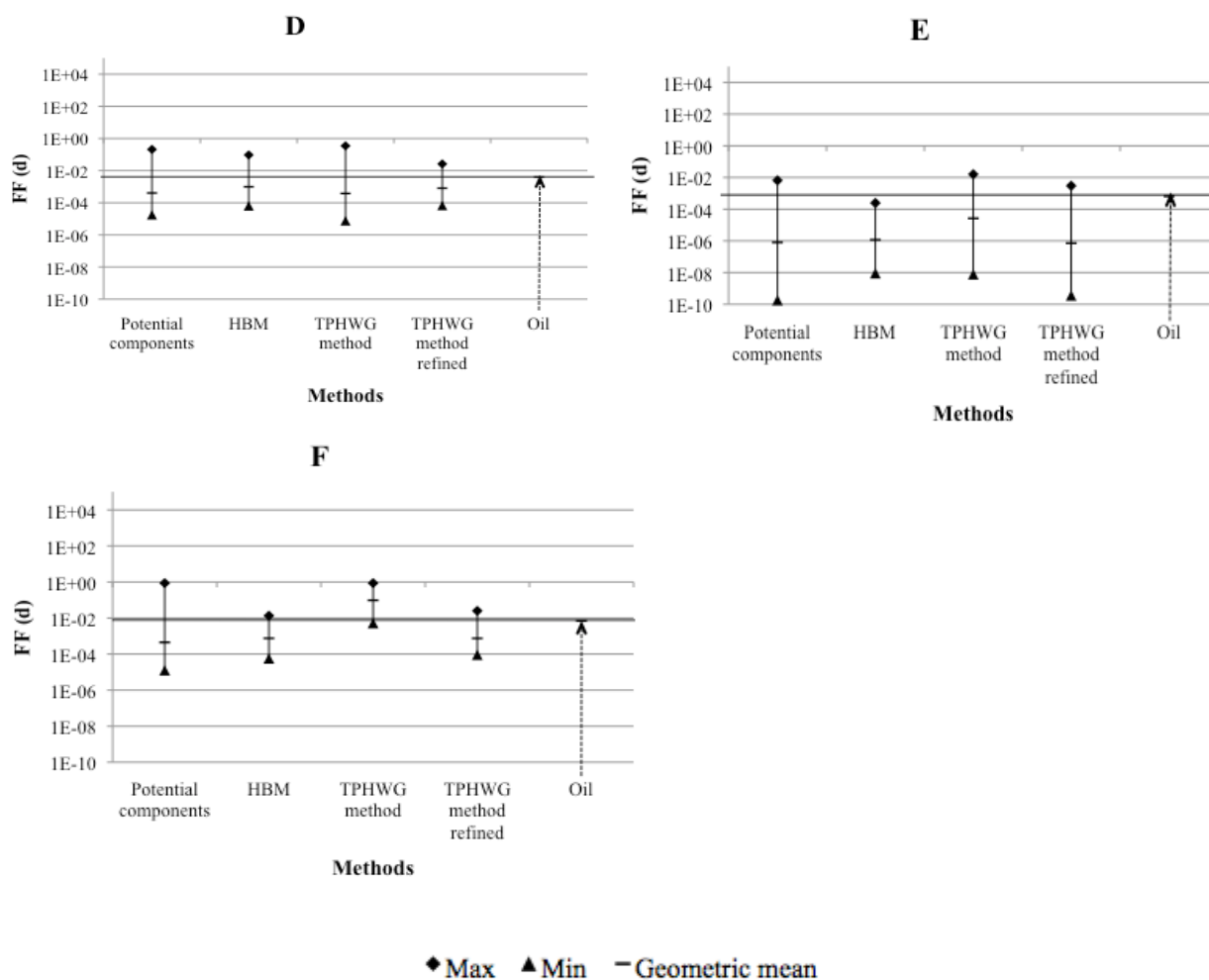
ANNEX 6 - S4 – The thirteen fractions directly taken from the TPHWG study and their properties

Name	MW	S _w	K _{oc}	K _{ow}	EC ₅₀	K _H	P _{vap}	k _{degA}	k _{degW}	k _{degSéd}	k _{degSol}
	g/mol	mg/L	L _w /kg _{oct}	L _w /L _{oct}	mg/L	Pa.m ³ /mol	Pa	s ⁻¹	s ⁻¹	s ⁻¹	s ⁻¹
AL_ECN_5-6	8,10E+01	3,60E+01	7,94E+02	1,06E+03	1,54E-01	7,98E+04	3,55E+04	3,52E-06	1,30E-07	6,58E-11	6,58E-10
AL_ECN_>6-8	1,00E+02	5,40E+00	3,98E+03	5,33E+03	4,63E-02	1,18E+05	6,38E+03	3,52E-06	1,30E-07	6,58E-11	6,58E-10
AL_ECN_>8-10	1,30E+02	4,30E-01	3,16E+04	4,23E+04	1,14E-02	1,93E+05	6,38E+02	3,52E-06	1,30E-07	6,58E-11	6,58E-10
AL_ECN_>10-12	1,60E+02	3,40E-02	2,51E+05	3,36E+05	2,77E-03	3,00E+05	6,38E+01	3,52E-06	1,30E-07	6,58E-11	6,58E-10
AL_ECN_>12-16	2,00E+02	7,60E-04	5,01E+06	6,71E+06	2,50E-04	1,28E+06	4,86E+00	3,52E-06	1,30E-07	6,58E-11	6,58E-10
AL_ECN_>16-21	2,70E+02	2,50E-06	6,31E+08	8,44E+08	5,03E-07	1,20E+07	1,11E-01	3,52E-06	1,30E-07	6,58E-11	6,58E-10
AR_ECN_5-7	7,80E+01	1,80E+03	7,94E+01	1,06E+02	1,47E+00	5,71E+02	1,32E+04	3,52E-06	1,30E-07	6,58E-11	6,58E-10
AR_ECN_>7-8	9,20E+01	5,20E+02	2,51E+02	3,36E+02	5,24E-01	6,81E+02	3,85E+03	3,52E-06	1,30E-07	6,58E-11	6,58E-10

AR_ECN_>8-10	1,20E+02	6,50E+01	1,58E+03	2,12E+03	1,22E-01	1,18E+03	6,38E+02	3,52E-06	1,30E-07	6,58E-11	6,58E-10
AR_ECN_>10-12	1,30E+02	2,50E+01	2,51E+03	3,36E+03	8,89E-02	3,32E+02	6,38E+01	3,52E-06	1,30E-07	6,58E-11	6,58E-10
AR_ECN_>12-16	1,50E+02	5,80E+00	5,01E+03	6,71E+03	5,74E-02	1,26E+02	4,86E+00	3,52E-06	1,30E-07	6,58E-11	6,58E-10
AR_ECN_>16-21	1,90E+02	6,50E-01	1,58E+04	2,12E+04	2,87E-02	3,26E+01	1,11E-01	3,52E-06	1,30E-07	6,58E-11	6,58E-10
AR_ECN_>21-35	2,40E+02	6,60E-03	1,26E+05	1,68E+05	7,18E-03	1,62E+00	4,46E-05	3,52E-06	1,30E-07	6,58E-11	6,58E-10

ANNEX 7 - S5 - The three other emission compartments for the fate factors (FFs) with continental freshwater as the receiving compartment are presented below.

The TPHWG method corresponds to the fractions taken directly from TPHWG work, while the refined TPHWG method corresponds to the fractions that were redefined by applying the entire TPHWG methodology to the study constituents. D: Emission to urban air; E: Emission to continental seawater and F: Emission to continental agricultural soil.



ANNEX 8 - S6 - The three other emission compartments for the CFs results with continental freshwater as the receiving compartment are presented below.

The TPHWG method corresponds to the fractions taken directly from TPHWG work, while the refined TPHWG method corresponds to the fractions that were redefined by applying the entire TPHWG methodology to the study constituents. D: Emission to urban air; E: Emission to continental seawater and F: Emission to continental agricultural soil.

