

UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO
POSGRADO EN CIENCIAS DEL MAR Y LIMNOLOGÍA

**EVALUACIÓN CUALITATIVA DE LOS CONTAMINANTES
ORGÁNICOS EN AGUA DE LOS CANALES DEL ÁREA NATURAL
PROTEGIDA DE XOCHIMILCO**

TESIS

QUE PARA OPTAR POR EL GRADO DE:
MAESTRO EN CIENCIAS
LIMNOLOGÍA

PRESENTA:
JORGE MEZA GONZÁLEZ

TUTORA PRINCIPAL:
DRA. CLAUDIA ALEJANDRA PONCE DE LEÓN HILL
FACULTAD DE CIENCIAS

COMITÉ TUTOR:
DRA. MARISA MAZARI HIRIART
INSTITUTO DE ECOLOGÍA
DRA. ELSA NOREÑA BARROSO
FACULTAD DE QUÍMICA
DRA. OLIVIA ZAMORA MARTINEZ
INSTITUTO DE GEOLOGIA
DR. MIGUEL BETANCOURT LOZANO
CENTRO DE INVESTIGACIÓN EN ALIMENTACIÓN Y DESARROLLO

ASESOR EXTERNO:
M. En C. FRANCISCO ROJO CALLEJAS
FACULTAD DE QUÍMICA

CD. MX., JUNIO, 2019



Universidad Nacional
Autónoma de México



UNAM – Dirección General de Bibliotecas
Tesis Digitales
Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS ©
PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

Todo el material contenido en esta tesis esta protegido por la Ley Federal del Derecho de Autor (LFDA) de los Estados Unidos Mexicanos (México).

El uso de imágenes, fragmentos de videos, y demás material que sea objeto de protección de los derechos de autor, será exclusivamente para fines educativos e informativos y deberá citar la fuente donde la obtuvo mencionando el autor o autores. Cualquier uso distinto como el lucro, reproducción, edición o modificación, será perseguido y sancionado por el respectivo titular de los Derechos de Autor.

**EVALUACIÓN CUALITATIVA DE LOS CONTAMINANTES
ORGÁNICOS EN AGUA DE LOS CANALES DEL ÁREA NATURAL
PROTEGIDA DE XOCHIMILCO**

TESIS

QUE PARA OBTENER EL GRADO ACADÉMICO DE:
MAESTRO EN CIENCIAS
LIMNOLOGÍA

PRESENTA:
JORGE MEZA GONZÁLEZ

TUTORA PRINCIPAL:
DRA. CLAUDIA ALEJANDRA PONCE DE LEÓN HILL
FACULTAD DE CIENCIAS

COMITÉ TUTOR:
DRA. MARISA MAZARI HIRIART
LABORATORIO NACIONAL DE CIENCIAS DE LA SOSTENIBILIDAD
DRA. ELSA NOREÑA BARROSO
FACULTAD DE QUÍMICA-SISAL
DRA. OLIVIA ZAMORA MARTINEZ
INSTITUTO DE GEOLOGIA
DR. MIGUEL BETANCOURT LOZANO
CENTRO DE INVESTIGACIÓN EN ALIMENTACIÓN Y DESARROLLO

ASESOR EXTERNO:
M. En C. FRANCISCO ROJO CALLEJAS
FACULTAD DE QUÍMICA

MÉXICO, CD. MX., JUNIO, 2019

DEDICATORIAS

A la Fundación **Meza-Cástelan / González-Ardidth**: por ser mi pilar, mi fuerza y refugio. Por ser el árbol que ha sostenido este hogar y le dio dirección, por mostrarme el valor de la vida y por su amor e incondicional apoyo. Los amo.

A **Lizbeth y Karina**: por compartir el camino y seguir dibujándolo juntos a pesar de todo, siempre. Son las mejores hermanas que pude tener.

A **Rafael**: por transitar juntos casi cinco años y por los que nos faltan. Por tu cariño, paciencia, amor y apoyo incondicional. Te repito lo que un día te dije: No olvides que el otro lado de la colina siempre será más verde. ¡Siempre estás presente! El resto tú lo sabes.

A mis amigos: **Andrés, Mónica, Danaé, Rafael, Lorena, Berenice, Gimmell, Grisel, Fernando, Enrique, Sinué, Luis, Alberto y Adrián**. Por ser y estar; y que, aunque pasen los años, seguimos juntos. A **Malu y Mau**, por abrirme las puertas de su hogar, su cariño, sus palabras y apoyo.

A la banda del posgrado de Ciencias del Mar y Limnología: **Socorro, Alan, Bibiana, Abraham, Itandehui, Fernando y Ana**. Por compartir juntos esta marcha en el maravilloso mundo de las ciencias acuáticas.

A la banda de la Unidad de Análisis Ambiental: **Diana, Eloisa y Alejandro**. Por su invaluable amistad y por todo el apoyo a lo largo de esta marcha. Esto no hubiera sido lo mismo sin ustedes.

A tantos más que han estado, siguen y a los que ya no están; de corazón les digo: muchas gracias.

AGRADECIMIENTOS

Al **pueblo de México**, porque es gracias a ellos que se financia la educación y preparación de cientos de miles de universitarios en este país.

A mi casa de estudios y segundo hogar: la **Universidad Nacional Autónoma de México (UNAM)**, a la **Facultad de Química** e Instituto de Química por brindarme las herramientas y el conocimiento en mi formación profesionalista como Químico.

Al **posgrado en Ciencias del Mar y Limnología** en conjunto con el Instituto de Ciencias del Mar y Limnología por brindarme los conocimientos, las herramientas y las oportunidades otorgadas en el camino para mi formación académica en las Ciencias Ambientales.

A la **Facultad de Ciencias**, que me abrió sus puertas como estudiante y como docente. Particularmente a la **Unidad de Análisis Ambiental**, por el uso ilimitado de sus instalaciones y la facilidad de los recursos para la realización de este proyecto.

A mi tutora y mentora, la **Doctora Claudia Alejandra Ponce de León-Hill**. Por su guía, dirección, paciencia y enseñanza durante este proyecto; así como también sus llamadas de atención que me aterrizaron las ideas en más de una ocasión. Por empujarme a creer más en mi y por creer en mi. Por su confianza y por permitirme formar parte de este maravilloso equipo de trabajo que no solamente me ha dejado gratas experiencias y aprendizajes, sino que me ha enseñado que, en este mundo de las Ciencias Ambientales no se navega solo. Que la cooperación y trabajo en equipo es la clave.

Al **Maestro Manuel Hernández Quiroz**, por todo su apoyo, paciencia y enseñanza en el aprender constante del análisis ambiental. Por ser un pilar en la Unidad de Análisis Ambiental al cual siempre podremos recurrir. Por su amistad y guía, así como las llamadas de atención que me permitieron ser mejor en lo que hago y poder enseñarles a otros. Por abrirme las puertas de su casa y por todos sus consejos. Por lidiar con nuestros lapsos de frustración y seguir impulsándonos hacia adelante.

Al grupo de **Restauración Ecológica y Desarrollo A. C. REDES** por su apoyo durante los muestreos realizados, particularmente a la **Mtra. Elsa Valiente Riveros**. A **Earthwatch Institute** por el financiamiento al proyecto de Análisis de Riesgo y Restauración ambiental del Área Natural Protegida de Xochimilco y San Gregorio Atlapulco del cual, este proyecto forma parte.

A todos mis **compañeros** de la Unidad de Análisis Ambiental, por crear juntos un ambiente de solidaridad, amistad, cariño y respeto. Por el apoyo y las palabras de aliento cada que era necesario. Por las horas de convivencia, por compartir y apoyarnos mutuamente cada que lo necesitábamos. Porque sin ustedes, este transitar no hubiera sido el mismo.

A la **Dra. Marisa Mazari Hiriart** y al **Laboratorio Nacional de Ciencias de la sostenibilidad LANCIS**, por facilitarnos el uso de sus instalaciones del laboratorio de Cromatografía. Asimismo, agradezco al **Biol. Erick Ricardo Hjört Colunga** por toda su ayuda con el manejo del software *Unknown Analysis*. También por permitirme trabajar en su proyecto de maestría con el objetivo de familiarizarme en el Análisis ambiental.

Al resto de los miembros de mi comité tutorial y jurado. Agradezco de nuevo a la **Dra. Marisa Mazari Hiriart**, la **Dra. Olivia Zamora Martinez**, la **Dra. Elsa Noreña Barroso**, el **Dr. Miguel Betancourt Lozano** y el **Mtro. Francisco Rojo Callejas**; agradezco por su tiempo, seguimiento, sugerencias e ideas que nutrieron este proyecto, así como la revisión de este escrito. Por sus valiosas y acertadas observaciones que son pauta para realizar en un futuro inmediato un análisis de mayor profundidad e integral.

Al **Dr. Rodolfo Omar Arellano Aguilar**, por su tiempo y enseñanza en el uso y manejo del software ECOSAR, así como adentrarme en el uso de herramientas QSAR para la evaluación de riesgo.

Al **M. En C. Antonio Calzada Villafuerte** por el apoyo con el trabajo de las bases de datos cromatográficos.

Al **Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología CONACyT** por la beca otorgada de maestría con número 1140056057 mediante el Programa Nacional de Posgrados de Calidad.

INDICE

RESUMEN	10
1. Introducción	11
2. Marco teórico.....	12
2.1 Esquema global.....	12
2.2 Contaminantes orgánicos.....	14
2.2.1 Contaminantes orgánicos persistentes	14
2.2.2 Contaminantes orgánicos emergentes	19
2.2.2.1 Productos de cuidado personal (PCP)	21
2.2.2.2 Compuestos de uso industrial	22
2.2.2.3 Productos farmacéuticos.....	22
2.2.2.4 Disruptores endócrinos	24
2.2.3 Fuentes de contaminación	26
2.3 Método de análisis de residuos múltiples o “Screening”	28
2.4 Modelo QSAR (Quantitative Structure-Activity Relationship)	33
2. 4. 1 ECOSAR (Ecological Structure Activity Relationships).....	35
2.5 Xochimilco, zona de estudio.....	37
2.5.1 Contexto	37
2.5.2 Localización de la zona de estudio.....	39
2.5.2.1 Clima.....	40
2.5.2.2 Geología.....	40
2.5.2.3 Hidrología	41
2.5.3 Actividades agrícolas y pecuarias	42
2.5.4 Problemática de la zona	42
3. OBJETIVOS	44
3.1 Objetivo General.....	44
3.1.1 Objetivos Particulares	44
4. METODOLOGÍA.....	45
4.1 Sitio de muestreo.....	45

4.2 Descripción del muestreo.....	46
4.3 Procesamiento de las muestras y trabajo de laboratorio.....	47
4.3.1 Preparación de las soluciones de los compuestos modelo	47
4.3.2 Procesamiento de muestras	49
4.3.3 Extracción	49
4.3.4 Cromatografía de gases acoplado a espectrometría de masas.....	52
4.3.5 Evaluación cualitativa (<i>Screening</i>)	56
4.3.6 Semicuantificación	58
4.3.7 Análisis Ecotoxicológico	59
5. RESULTADOS Y ANÁLISIS	60
6. CONCLUSIONES	98
7. APORTES:	99
8. LIMITACIONES:	99
BIBLIOGRAFÍA.....	101
ANEXO I.....	107
ANEXO II.....	119

Tabla 1. Contaminantes orgánicos persistentes	16
Tabla 2. Datos de geoposicionamiento en UTM de los sitios de muestreo	46
Tabla 3. Compuestos modelo o estándares para la semicuantificación.	47
Tabla 4. Condiciones cromatográficas iniciales para el análisis cualitativo (screening).....	52
Tabla 5. Condiciones cromatográficas modificadas para el análisis cualitativo (screening).	53
Tabla 6. Tiempos de retención de los compuestos modelo y sus correspondientes iones característicos.	55
Tabla 7. Datos de los parámetros fisicoquímicos de cada sitio.	60
Tabla 8. Número de contaminantes identificados por sitio	60
Tabla 9. Frecuencia de los contaminantes más comunes encontrados en los sitios de estudio.	94
figura 1. estructura de los compuestos dibenzoparadióxina y dibenzofurano	18
Figura 2. Ubicación de xochimilco dentro de la ciudad de México	39
Figura 3. Ubicación de la ANP y sitio de estudio de San Gregorio Atlapulco al sur de la CDMX.	40
Figura 4. Sitios muestreados en la zona de los canales de San Gregorio Atlapulco.....	45
Figura 5. Composición del copolímero del cartucho hlb oasis	49
Figura 6. Sistema de extracción Manifold en fase sólida de las muestras de agua.....	51
Figura 7. Elución y colecta de los extractos.....	51
Figura 8. Secado de los extractos bajo flujo de nitrógeno	52
Figura 9. Cromatograma de la mezcla con los 14 compuestos modelo	53
Figura 10. Cromatograma de la mezcla con los 14 compuestos modelo con las nuevas condiciones de rampeo	54
Figura 11. Información obtenida a través del reporte de deconvolución.....	57
Figura 12. Cromatograma deconvolucionado proveniente del sitio Puente de Urrutia, Xochimilco.	58
Figura 13. Gráfica de barras agrupadas respecto a la composición de los grupos químicos de contaminantes por sitio.	62
Figura 14. Gráfica de caja y bigotes acerca de la variabilidad de los grupos químicos en función de su clasificación	62
Figura 15. Proporción de contaminantes orgánicos de un sitio con impacto agrícola (Tecaltitla) ...	64
Figura 16. Cromatograma en modo SCAN de una muestra proveniente del sitio de Tecaltitla.....	65
Figura 17. Gráfico de barras de concentración de contaminantes ($\mu\text{g L}^{-1}$) identificados en Tecaltitla agrupados de acuerdo con su clasificación.	66
Figura 18. Proporción de contaminantes orgánicos de un sitio con impacto agrícola (Tlilac) en Xochimilco.....	67
Figura 19. Cromatograma en modo SCAN de una muestra proveniente del sitio de Tlilac.	68
Figura 20. Gráfica de barras de concentración de contaminantes ($\mu\text{g L}^{-1}$) identificados en Tlilac agrupados de acuerdo con su clasificación.	69
Figura 21. Proporción de contaminantes orgánicos de un sitio con impacto agrícola (Potrero).....	70
Figura 22. Cromatograma en modo SCAN de una muestra proveniente del sitio de Potrero.	70
Figura 23. Gráfico de barras de concentración de contaminantes ($\mu\text{g L}^{-1}$) identificados en potrero agrupados de acuerdo con su clasificación.	72
Figura 24. Proporción de contaminantes orgánicos de un sitio con impacto agrícola (La Espejera), Xochimilco.....	73

Figura 25. Cromatograma en modo SCAN de una muestra proveniente del sitio de La Espejera. ...	73
Figura 26. Gráfica de barras de concentración de contaminantes identificados en La Espejera agrupados de acuerdo con su clasificación.	74
Figura 27. Proporción de contaminantes orgánicos de un sitio de la zona ejidal distanciada de la zona urbana (El Bordo).....	75
Figura 28. Cromatograma en modo SCAN de una muestra proveniente del sitio de El Bordo, Xochimilco.	76
Figura 29. Gráfica de barras de concentración de contaminantes ($\mu\text{g L}^{-1}$) identificados en El Bordo agrupados de acuerdo con su clasificación.	77
Figura 30. Proporción de contaminantes orgánicos de un sitio de la zona ejidal distanciada de la zona urbana (San Sebastián).	78
Figura 31. Cromatograma en modo SCAN de una muestra proveniente del sitio de San Sebastián, Xochimilco.	78
Figura 32. Gráfica de barras de concentración de contaminantes ($\mu\text{g L}^{-1}$) identificados en San Sebastián agrupados de acuerdo con su clasificación.	80
Figura 33. Proporción de contaminantes orgánicos de un sitio con impacto urbano (La Fábrica) ...	81
Figura 34. Cromatograma en modo SCAN de una muestra proveniente del sitio de La Fábrica, Xochimilco.	81
Figura 35. Gráfica de barras de concentración de contaminantes identificados en La Fábrica agrupados de acuerdo con su clasificación.	83
Figura 36. Proporción de contaminantes orgánicos de un sitio con impacto urbano (Coapatitla)...	84
Figura 37. Cromatograma en modo SCAN de una muestra proveniente del sitio de Coapatitla, Xochimilco.	84
Figura 38. Gráfica de barras de concentración de contaminantes ($\mu\text{g L}^{-1}$) identificados en Coapatitla agrupados de acuerdo con su clasificación.	85
Figura 39. Proporción de contaminantes orgánicos de una zona de descarga de aguas tratadas (Puente de Urrutia), Xochimilco.....	86
Figura 40. Cromatograma en modo SCAN de una muestra proveniente del sitio de Puente de Urrutia.	87
Figura 41. Gráfica de barras de concentración de contaminantes ($\mu\text{g L}^{-1}$) identificados en Puente de Urrutia agrupados de acuerdo con su clasificación.	89
Figura 42. Valores UT total por sitio de muestreo en San Gregorio Atlapulco, Xochimilco.	90

RESUMEN

Xochimilco es un sitio de gran riqueza cultural, histórica y natural. Por este motivo el 11 de diciembre de 1987 fue inscrito en el catálogo del Patrimonio Cultural de la Humanidad por la UNESCO. En 2004, la Convención Internacional sobre Humedales RAMSAR suscribió a la zona lacustre en la lista de Humedales de Importancia Internacional. Recientemente en 2017 fue nombrado como uno de los 13 nuevos entornos paisajísticos celebrados como Sistemas Importantes del Patrimonio Agrícola Mundial por la Organización de las Naciones Unidas para la Alimentación y la Agricultura. Sin embargo, la urbanización desmedida ha incrementado la demanda de agua lo que ha propiciado la sobreexplotación de los pozos de Xochimilco y consecuentemente problemas de subsidencia. Este proceso de urbanización en conjunto con la actividad agrícola ha producido como consecuencia un aumento en la descarga de aguas residuales que son las que continuamente están recargando los canales de Xochimilco; liberando al medio acuático cientos de sustancias químicas como agroquímicos, productos de cuidado personal, residuos de origen industrial, fármacos entre otros y que son sustancias tóxicas para la flora y fauna del lugar. El proyecto propuesto tuvo como objetivo identificar y evaluar la toxicidad de los contaminantes orgánicos presentes en muestras de agua de los canales de San Gregorio Atlapulco, perteneciente al sistema lacustre de Xochimilco.

La investigación de este proyecto consistió en el desarrollo de una metodología de análisis de residuos múltiples o *Screening* en modo Scan mediante la técnica de Cromatografía de Gases acoplado a Espectrometría de Masas. La identificación de los contaminantes se realizó mediante el uso del software *Unknown Analysis* el cual con base en su modelo de deconvolución permite identificar compuestos *no objetivo* en una muestra ambiental y establece un factor de coincidencia entre el compuesto identificado experimentalmente y el compuesto reportado y almacenado en la librería digital del software (NIST 2.0). En esta investigación el factor de coincidencia o *Match Score* aceptado fue mayor o igual a 70. Sumado a la optimización de la etapa cualitativa, se realizó la semicuantificación de los contaminantes identificados mediante la adición de estándares o Compuestos Modelo a las muestras; los cuales fueron seleccionados con base en su familia química y poder así establecer similitudes estructurales y/o de propiedades fisicoquímicas entre los contaminantes y los compuestos modelo. Posteriormente a la identificación y semicuantificación de los contaminantes, se obtuvo información respecto a la toxicidad de dichas sustancias (LC_{50} y $\log K_{ow}$) mediante el uso del software ECOSAR que se basa en el modelo predictivo QSAR. Una vez obtenida esta información se calculó la Unidad Tóxica Total (UT_{total}) de la mezcla compleja de contaminantes por cada sitio y con base en ello, establecer el nivel de toxicidad de cada sitio, así como identificar a los potenciales contaminantes más tóxicos para el medio acuático.

1. Introducción

La zona lacustre de Xochimilco y particularmente, la zona chinampera de San Gregorio Atlapulco, ubicada al sur de la Ciudad de México, es reconocida por su importancia y riqueza cultural, e histórica, así como su impacto económico producto de la actividad agrícola, pecuaria, pesquera e incluso turística. Sin embargo, en las últimas décadas la creciente urbanización ha propiciado su desgaste ecológico por la sobreexplotación del agua de sus pozos para cubrir la demanda. Este proceso de urbanización en conjunto con la actividad agrícola ha producido como consecuencia un aumento en la descarga de aguas tratadas y residuales liberando en el medio acuático cientos de sustancias químicas, como agroquímicos, fertilizantes; así como productos de cuidado personal, residuos de origen industrial, doméstico, hidrocarburos aromáticos policíclicos (HAP's), medicamentos, entre otros, y que son potencialmente tóxicos para la flora y fauna del lugar. Así, la presencia en agua de estos contaminantes tiene consecuencias negativas para la microfauna en el medio ambiente, por ende, es necesario obtener los datos relativos a la concentración y el destino ambiental de estos contaminantes. Con este fin, se requieren métodos de análisis para la determinación rápida, sensible y selectiva de una amplia gama de compuestos en diversas matrices ambientales (compuestos *–no objetivo–*). Las metodologías de “análisis de residuos múltiples” (Screening) se están convirtiendo en las herramientas necesarias, ya que proporcionan un conocimiento exhaustivo sobre la contaminación orgánica del agua, reducen el tiempo de análisis general, del muestreo en campo y del costo. A pesar de los diversos estudios que se han realizado sobre compuestos orgánicos como plaguicidas o contaminantes emergentes en el sitio de estudio no se ha realizado con anterioridad una evaluación cualitativa o *Screening* que identifique los contaminantes orgánicos más importantes en el agua, por lo que este debe ser un análisis obligado para entender y dimensionar mejor la problemática de la calidad del agua de los canales de Xochimilco.

En este trabajo se analizaron muestras de agua con el objetivo de identificar los compuestos orgánicos con un mayor riesgo potencial para el sistema acuático mediante la implementación y aplicación de un método de análisis de residuos múltiples cualitativo mediante la técnica de Cromatografía de gases acoplada a espectrometría de masas (CG-EM) en sitios ambientalmente diferentes en Xochimilco. Para ello fue necesario llevar a cabo el análisis semi-cuantitativo mediante la comparación estructural y/o fisicoquímica con respecto a una serie de compuestos que pertenecen a diferentes clases químicas. Además, mediante el uso del software ECOSAR, basado en el modelo QSAR, se determinaron

parámetros toxicológicos con el objetivo de identificar en función de su toxicidad y sus concentraciones aproximadas, a los contaminantes que puedan representar un mayor riesgo ecológico.

2. Marco teórico

2.1 Esquema global

El agua es un recurso natural que es vital para los seres humanos, y que es indispensable para todo ecosistema. El acceso al agua limpia es esencial para la salud, es un derecho humano básico y un efectivo componente en políticas de protección a la salud. Sin embargo, las crisis por escasez empiezan a incrementarse en muchas regiones del mundo. Lo que resulta de un consumo desmedido, una inequitativa distribución a escala regional, así como de la distribución irregular del agua a nivel mundial, el cambio climático al que la Tierra se enfrenta y el aumento en el número de actividades antropogénicas (Sousa, 2018), por lo que la calidad y cantidad del agua son temas prioritarios en las agendas internacionales de política ambiental para responder a la creciente demanda junto con el abastecimiento y sanidad del recurso.

Durante las décadas de los 80 y 90 la Organización Mundial de la Salud (OMS) publicó las primeras dos ediciones del documento *Lineamientos para la calidad del agua potable*. Para 1995 se anexó a la segunda edición un apéndice que contemplaba aspectos químicos y microbiológicos. Fue hasta el año 2000 que se publicó la tercera edición en la cual fue incluido el programa en Seguridad Química y Seguridad Radiológica (Hespanhol, 1994).

Por otro lado, algunos lineamientos europeos han sido publicados desde el año 2000, cuando la Directiva 2000/60/EC fue presentada para establecer un marco de acción comunitaria en el área de políticas del agua, la Directiva Marco del Agua de la Unión Europea (*EU FWD European Union Framework Water Directive* por sus siglas en inglés) representó una gran mejoría en las políticas de protección al agua con el objetivo de lograr una mejoría en la calidad de la estructura y del funcionamiento de ecosistemas acuáticos asociados a cuerpos de agua superficiales (Ioana, 2016)

La Organización de las Naciones Unidas (ONU) (Sostenible, 2016) ha reconocido el acceso al agua segura y asequible como uno de los objetivos planteados en la Agenda 2030, asimismo, se reconoce la necesidad y el objetivo de mejorar la calidad del agua reduciendo su contaminación, restringiendo los tiraderos de residuos sólidos y disminuyendo las

descargas de materiales y sustancias químicas peligrosas. También, reducir a la mitad la proporción de aguas residuales no tratadas y aumentar substancialmente el reciclaje y la reutilización segura a nivel mundial.

De la misma forma se plantea en la agenda, el ampliar la cooperación internacional y el apoyo al desarrollo de capacidades para los países en desarrollo de diferentes bloques regionales como América Latina, África y Asia en actividades y programas relacionados con el agua y se saneamiento, incluyendo la recolección de agua, desalinización, tratamiento de aguas residuales, reciclaje y tecnologías de reutilización (Sostenible, 2016), ya que, a nivel mundial 2500 millones de personas viven sin un saneamiento apropiado del agua. (UNICEF, 2008)

De la misma manera, la ONU reconoce que, más del 80% de las aguas residuales son descargadas en diversos cuerpos de agua y/u océanos sin previo tratamiento para remover contaminantes presentes. Desde la década de los 90, la contaminación del agua ha empeorado en casi todos los ríos de África, Asia y América Latina (Sostenible, 2016).

La causa inmediata del aumento de la contaminación del agua es el crecimiento de las cargas de aguas residuales en ríos y lagos. Las fuentes actuales de contaminación más importantes varían de contaminante en contaminante. Las principales causas del aumento de la contaminación del agua son el crecimiento de la población, el aumento de la actividad económica, la intensificación y expansión de la agricultura, y el aumento de sistemas de alcantarillado con un nivel bajo o nulo tratamiento. De acuerdo con datos de la ONU se estima que la cantidad de aguas residuales producidas anualmente es aproximadamente 1,500 Km³, lo que es seis veces más agua de la que existe en todos los ríos del mundo (NORMAN, 2016).

La recolección de aguas residuales en el alcantarillado reduce el contacto directo de las personas con residuos y patógenos lo que representa una estrategia importante para proteger la salud pública. Sin embargo, la instalación de alcantarillas también ha concentrado la descarga de contaminantes en aguas superficiales y ha transferido el lugar de riesgo para la salud de las personas.

Son miles los productos químicos que constantemente son producidos y liberados al medio acuático (Bu, 2015) por el escaso o nulo tratamiento de los efluentes residuales, ya sea por contribución urbana, industrial o de diversas prácticas económicas como la agrícola, ganadera entre otras.

Alrededor de 8.400.000 sustancias han sido enumeradas en la página web del Servicio de resúmenes químicos, de los cuales 240,000 productos químicos fueron regulados e inventariados (Gómez, 2009). Por otra parte, alrededor de 82,000 productos químicos se enumeran en la Agencia de Protección Ambiental de Estados Unidos (*US Environmental Protection Agency*, US EPA) catalogados dentro del *Toxic Substances Control Act Inventory* (TSCAI) (EPA, 2018).

De estos compuestos químicos, el 95 % de los productos consisten en sustancias orgánicas. De esta manera, en las últimas décadas, los riesgos presentados por los contaminantes orgánicos han llamado cada vez más la atención de la clase gobernante y las correspondientes autoridades en materia de protección ambiental, así como desde la academia, por lo que debe ser una prioridad su monitoreo con el objetivo de proporcionar medidas de mitigación (Bu, 2013).

2.2 Contaminantes orgánicos

La contaminación del medio ambiente por sustancias orgánicas de origen sintético es una de las problemáticas más relevantes en la actualidad, ello es debido a la gran producción de dichas sustancias que ha ocurrido en las décadas recientes. En la actualidad, la producción mundial de compuestos orgánicos es de varios centenares de millones de toneladas al año, lo cual corresponde a un incremento de un orden de magnitud con respecto a la producción correspondiente a mediados del siglo pasado (Antúnez, 2014).

A pesar de que se han tomado muchas medidas para prevenir la contaminación del agua, sobre todo a partir de la segunda mitad del siglo pasado, la cantidad de sustancias potencialmente peligrosas que pueden llegar a los ecosistemas acuáticos es alarmante, además de que constantemente se están desarrollando nuevas sustancias de las cuales no se sabe el impacto que pueda tener en el medio ambiente. Por lo que, en los últimos años, la investigación y el monitoreo de los contaminantes nombrados como de “Prioridad” se ha extendido a los llamados “contaminantes emergentes” (Gómez, 2009).

2.2.1 Contaminantes orgánicos persistentes

Los contaminantes orgánicos persistentes COPs, o POPs por sus siglas en inglés (Persistent Organic Pollutants) son sustancias químicas que poseen las siguientes características:

- *Capacidad para el transporte atmosférico transfronterizo.* Su presión de vapor ha de ser inferior a 1000 Pa y tener una vida media en la atmósfera mayor a dos días o, bien que se dispongan de evidencias de que la sustancia hay sido detectada en lugares remotos.
- *Toxicidad.* Que afecten negativamente a la salud humana o al medio ambiente.
- *Persistencia.* Que la vida media del compuesto sea mayor a: 1) dos meses en la hidrósfera, 2) seis meses en suelos, o 3) seis meses en sedimentos, o alternativamente, si se considera suficientemente persistente como para causar problemas.
- *Bioacumulación.* Si el factor de bioconcentración del compuesto (relación en el equilibrio entre las concentraciones de compuesto en fase lipídica y en el agua), es mayor a 5000, o bien que el valor de $\log K_{ow}$ es superior a 5.

Por lo que suponen una fuerte amenaza tanto para la salud como para el medio ambiente (Antúnez, 2014). Debido a esta problemática, la Comisión Económica Europea de las Naciones Unidas (*United Nations Economic Commission for Europe, UNECE*) empezó en 1992 un programa para determinar cuáles son los compuestos químicos de mayor preocupación ambiental, con el objetivo de restringir su uso. En 1998, la Convención sobre Contaminación Atmosférica Transfronteriza de Largo Alcance (*Convention on Long Range Transboundary Air Pollution, LRTAP*) de la UNECE, desarrolló un protocolo para identificar estas sustancias bajo los criterios mencionados anteriormente.

Posteriormente en el año 2001 surge el convenio de Estocolmo, el cual es un tratado a nivel mundial para proteger la salud humana y el medio ambiente de los contaminantes orgánicos persistentes. Este convenio fue adoptado y abierto a la firma en una conferencia de plenipotenciarios, celebrada del 22 al 23 de mayo de 2001 en Estocolmo, Suecia. Entró en vigor en mayo de 2004 (SEMARNAT, 2015).

El convenio de Estocolmo tiene como objetivo eliminar o reducir las emisiones de 12 contaminantes orgánicos persistentes, la llamada "Docena sucia". Establece un sistema para hacer frente a otros productos químicos identificados como peligrosos.

Actualmente se sabe que causan daños de importancia a nivel local, regional y global. Por otra parte, sus efectos biológicos pueden ocurrir a corto y a largo plazo y, en el caso de los

seres humanos, estar relacionados con una exposición directa, ya sea ocupacional o ambiental, o bien, con una indirecta, sobre todo de origen ambiental.

Los COPs pertenecen a dos subgrupos: los hidrocarburos poliaromáticos y los hidrocarburos halogenados. En este último grupo, el halógeno puede ser cloro o bromo, pero, generalmente en los COPs predomina el cloro. A causa de la baja polaridad y la estabilidad de los enlaces C-X, estos compuestos son poco reactivos y resistentes a la degradación biológica y fotoquímica.

En general, los compuestos aromáticos clorados son más estables y, por tanto, son más persistentes que los alifáticos clorados, por lo que la mayoría de los COPs clorados son aromáticos, aunque pueden tener uno o más sustituyentes de cadena lineal o ramificada.

Se acepta que, a mayor número de átomos de halógeno en la molécula, la liposolubilidad, la tendencia a la bioacumulación y la estabilidad de las moléculas también son mayores (Antúnez, 2014).

De acuerdo con el convenio de Estocolmo se consideran como COPs a las siguientes sustancias que se presentan en la tabla 1.

TABLA 1. CONTAMINANTES ORGÁNICOS PERSISTENTES

COP	Aplicación/Tipología	Límites de uso
Aldrin	Plaguicida organoclorado	E.t.
Clordano	Plaguicida organoclorado	E.t.ex
DDT	Plaguicida organoclorado	E.t.ex
Dieldrín	Plaguicida organoclorado	E.t.
Endrín	Plaguicida organoclorado	E.t.

COP	Aplicación/Tipología	Límites de uso
Heptacloro	Plaguicida organoclorado	E.t.
Mírex	Plaguicida organoclorado	E.t.ex
Toxafeno	Plaguicida organoclorado	E.t.
Policlorobifenilo	Compuestos industriales	E.t.*
Hexacorobenceno	Plaguicida organoclorado	Reducción
Dibenzo-p-dioxinas policlorados	Subproducto	Reducción
Dibenzofuranos policlorados	subproducto	Reducción

E.t: eliminación total; E.t*: retirado de sus aplicaciones en el 2025. E.t.ex: eliminación total con excepciones.

Los plaguicidas organoclorados son compuestos orgánicos sintéticos constituidos por hidrocarburos cíclicos o aromáticos, en los que se ha introducido un cierto grado de cloración, por medio de la sustitución de átomos de hidrógeno por cloro. Estos compuestos sintéticos fueron los primeros en ser desarrollados, ya que resultaban muy apreciados debido a su estabilidad química, su baja solubilidad y elevada toxicidad para los insectos.

Uno de los plaguicidas más utilizado es el compuesto *p*-dicloro difenil tricloro etano (DDT). Este compuesto orgánico fue sintetizado por primera vez en 1874, pero no fue utilizado como plaguicida hasta mitad del siglo pasado. La mayoría de los plaguicidas organoclorados se comercializaron a mediados del siglo pasado, en el que hubo un elevado consumo a lo largo de las décadas de los años 50 y 60, a partir de las cuales se inició una drástica reducción que tuvo lugar a lo largo de la década de los años setenta.

Por otro lado, los PCBs (PoliClorados Bifenilos) son sustancias sintéticas que fueron ampliamente utilizadas en el siglo pasado en una variada gama de aplicaciones (fluidos dieléctricos y refrigerantes, plastificantes en pinturas y cementos, aditivos en plásticos, recubrimientos en conductores y componentes eléctricos, en aceites lubricantes, como retardantes de flama, etc.) llegándose a producir más de 1 millón de toneladas hasta que a finales de los años 70 se prohibió su fabricación en la mayoría de países industriales, debido a su persistencia en el medio ambiente y a su toxicidad. No obstante, en la actualidad hay PCBs en dispositivos que siguen en uso. Los acuerdos por la UNECE prevén su eliminación total hacia el 2025.

Otras familias de compuestos orgánicos persistentes son las dibenzo-p-dioxinas policloradas y los dibenzofuranos policlorados. Estas sustancias se basan en las moléculas de dibenzo-p-dioxina y dibenzofurano, respectivamente:

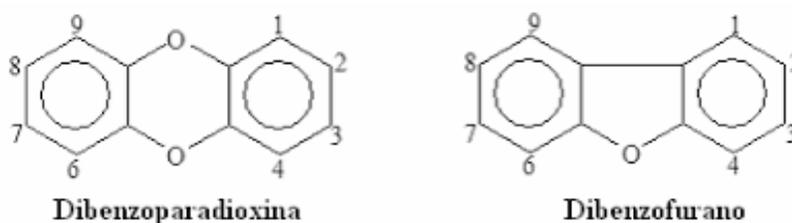


FIGURA 1. ESTRUCTURA DE LOS COMPUESTOS DIBENZOPARADIOXINA Y DIBENZOFURANO

Este grupo de sustancias se forman en los procesos de combustión de hidrocarburos fósiles, incendios, incineración de residuos, en los que se queman hidrocarburos y sustancias orgánicas que contienen una cierta cantidad de cloro en su composición. También se forman como productos no deseados en ciertos procesos sintéticos. Así pues, son subproductos de diferentes procesos que difícilmente se pueden eliminar totalmente, aunque si reducir su producción o evitar su liberación al medio ambiente.

En el año 2009, se añadió a la lista generada por el convenio de Estocolmo, nueve compuestos orgánicos más: el lindano, la clordecona, el hexabromobifenilo (retardantes de flama en plásticos), los éteres de tetra-, hexa-, penta-, y heptabromobifenilo (aditivos de espumas de poliuretano) y el pentaclorobenceno (intermediario en la producción de plaguicidas), para los cuales se regula la eliminación total.

2.2.2 Contaminantes orgánicos emergentes

A pesar de que se han tomado diversas medidas tanto a nivel regional como global para poder restringir y mitigar la presencia de contaminantes con alto impacto a la salud y al medio ambiente, el desarrollo de recursos y de tecnologías han producido un mayor número de sustancias químicas de las cuales se desconoce su comportamiento en el ambiente, así como sus efectos adversos potenciales a la salud y al medio acuático; por lo que uno de los principales problemas es la inexistencia de regulaciones que sean restrictivas, especialmente para nuevos compuestos, subproductos, productos farmacéuticos y productos de cuidado personal relacionado con su presencia en aguas residuales.

Son muy pocos los controles y las precauciones para garantizar que estos compuestos y subproductos que no están regulados no sean liberados a cuerpos de agua superficiales de acuerdo con la Comisión Europea (1999). Sin embargo, algunas acciones se han tomado de manera activa; por ejemplo, la Comisión Europea ha desarrollado estrategias para tratar urgentemente con disruptores endocrinos. Una de ellas es la modificación de la Comunidad Europea de Evaluación de Riesgos y la directiva sobre la clasificación de sustancias peligrosas (Communities, 2016). En el año 2000, se generó una lista inicial de 33 contaminantes prioritarios que fueron identificados bajo el *Marco Directivo del Agua de la Unión Europea (EU WFD) 2000/60/EC* para ser usado como medida de control por los próximos 20 años.

La Unión Europea en conjunto con la Agencia de Protección al Ambiente de los Estados Unidos (US EPA) ha desarrollado listas de contaminantes prioritarios, por lo que se fueron identificando una amplia gama de sustancias químicas que están presentes en aguas residuales, así como en cuerpos de agua alimentados por la escorrentía de aguas pluviales. Mientras que en los E. U. no se ha regulado el límite máximo de estas sustancias en agua potable o en cuerpos de agua naturales. Sin embargo, la Administración de Alimentos y Medicamentos (*Food and Drug Administration, FDA*) solicita una evaluación de la presencia de productos farmacéuticos cuando la concentración ambiental excede 1 µg/L (Huang, 2003).

En 1996, el Acta de Protección de la Calidad Alimentaria (*Food Quality Protection Act, FQPA*) y las enmiendas al Acta de Agua Potable Segura (*Safe Drinking Water Act, SDWA*), autorizaron a la Agencia de Protección al Ambiente de Los Estados Unidos (US EPA) para que examinaran todos los productos químicos, así como las formulaciones para evaluar

cualquier actividad endócrina potencial. Tanto en la etapa de manufactura o en algún otro proceso en donde el agua y/o línea de alimentación podría estar contaminada.

En la actualidad, más de 700 contaminantes emergentes, sus metabolitos y subproductos, están registrados como presentes en el ambiente acuático de Europa (Bu, 2015).

Los contaminantes emergentes se definen como sustancias químicas sintéticas o de origen natural que no son monitoreadas comúnmente en el medio ambiente pero que tienen el potencial de ingresar al medio ambiente y causar efectos adversos a la salud o ecológico. En muchos casos, la liberación de estos contaminantes en el medio ambiente ocurre de manera prolongada y pudo no haber sido reconocida hasta el desarrollo de diversos métodos de análisis que fueron capaces de detectarlo. Por otra parte, la síntesis de nuevos compuestos químicos o cambios en el uso y/o disposición final de sustancias químicas ya presentes pudiera generar nuevas fuentes de contaminantes (Bu, 2015).

Los contaminantes emergentes pueden clasificarse en cuatro grandes grupos (Antúnez, 2014):

1. Fármacos y productos de higiene personal
2. Disruptores endócrinos
3. Compuestos orgánicos industriales y de impacto global
4. Nanomateriales

Una característica de estos contaminantes es que si bien los compuestos químicos fueron sintetizados en lugares puntuales y controlados (fábricas, instalaciones o complejos químicos), estos se incorporan en matrices de productos que son consumidos diariamente por la población en general, o bien son sustancias que se consumen directamente por buena parte de la población. En consecuencia, la emisión al medio ambiente de estos contaminantes emergentes es difusa.

Mayoritariamente, la entrada de estas sustancias a los diferentes receptores ambientales es a través de distintos mecanismos de descarga, como lo es a través de las plantas de tratamiento de aguas residuales, de la escorrentía terrestre, como, por ejemplo, el “lavado” de calles, techos, pavimento...etc., las escorrentías de zonas agrícolas, urbanas, y la deposición atmosférica.

La mayoría de estos contaminantes se encuentran en el medio ambiente a concentraciones muy bajas, en el rango de partes por trillón y partes por billón (contaminantes traza). A pesar

de las bajas concentraciones de estos contaminantes, la exposición continua a ellos puede dar lugar a efectos tóxicos crónicos, difíciles de evaluar puesto que se requiere llevar a cabo estudios toxicológicos de manera longitudinal.

Los contaminantes emergentes usualmente no son incluidos en programas de monitoreo nacional o internacional y sus destinos, comportamientos y efectos ecotoxicológicos no están del todo estudiados.

Su liberación al medio ambiente puede ubicarse en ciertas fuentes puntuales como zonas de descarga de plantas de tratamiento de aguas residuales, y las fuentes difusas podrían ser deposición atmosférica, producción agrícola o zootecnia. Otra característica que poseen es que no necesitan estar constantemente en el ambiente para causar efectos negativos, puesto que sus altas tasas de transformación/remoción se pueden compensar por su introducción continua en el ambiente (Usma, 2012).

Además de los cuatro grupos ya mencionados, también se ha encontrado que este tipo de contaminantes pueden clasificarse en más de 20 grupos con relación a su origen (Geissen, 2015). Algunos grupos relevantes son productos de cuidado personal (agentes de lavado y de limpieza, higiene, cosméticos, fragancias, antimicrobianos, filtros de protección solar entre otros), de uso industrial (plastificantes, retardantes de flama, aditivos, recubrimientos, intermediarios en síntesis, farmacéuticos (fármacos, de uso médico/hospitalario), aditivos alimentarios (antioxidantes, saborizantes, colorantes).

2.2.2.1 Productos de cuidado personal (PCP)

Son sustancias usadas principalmente para mejorar la calidad de vida diaria (Ebele, 2016). Son un grupo de compuestos usados en jabones, lociones, dentífricos, fragancias, protectores solares, por nombrar algunos. Los principales tipos incluyen desinfectantes (e.g. triclosan), fragancias (e.g. almizcle), repelente de insectos (e.g. DEET), conservadores (e.g. parabenos), filtros UV (e.g. metilbencilideno alcanfor). A diferencia de los productos farmacéuticos los cuales están destinados para uso "interno", los PCP son productos destinados para uso externo en cuerpo humano, en consecuencia, no están sujetos a alteraciones metabólicas. Por lo tanto, grandes cantidades de PCP entran al medio ambiente inalterados mediante su uso regular. Muchos de estos compuestos son usados en grandes cantidades y recientes estudios han indicado que muchos son ambientalmente persistentes, bioactivos y tienen potencial de bioacumulación (Peck, 2006). Durante los últimos años aumentó el sentido de responsabilidad acerca de la presencia de los PCP en

distintas matrices ambientales a concentraciones necesarias para causar un deterioro en la salud de los organismos acuáticos.

Debido a propiedades fisicoquímicas de una gran variedad de PCPs es complicado removerlos de aguas residuales mediante procesos convencionales como lo demuestra su presencia en agua potable (Snyder, 2007) y si bien, no son considerados persistentes, por su uso y su continua liberación al medio ambiente, muchos de ellos se consideran “pseudopersistentes”, muchas de estas sustancias tienen un mayor potencial para la persistencia ambiental que otros contaminantes orgánicos como los plaguicidas, ya que su fuente se repone continuamente incluso cuando actúan sobre procesos ambientales como la biodegradación, la fotodegradación y la absorción a partículas. Por lo que, a pesar de ser degradados, eventualmente se comportarían como compuestos persistentes debido a su constante liberación al medio ambiente (Houtman, 2004).

2.2.2.2 Compuestos de uso industrial

Este tipo de compuestos normalmente son utilizados como aditivos en productos de consumo y que manifiestan un cierto impacto global ya que, como los contaminantes orgánicos persistentes (COPs), han sido detectados en lugares remotos del planeta. En este grupo se encuentran aditivos de plásticos, como los *difeniles éteres polibromados*, que son utilizados ampliamente como retardantes de flama en carcasas de electrodomésticos y computadoras, en tejidos, muebles y materiales de construcción. También se encuentran los *ésteres ftalato*, utilizados como plastificantes para mejorar la flexibilidad de plásticos, fibras y pinturas. Asimismo, también se utilizan en cosméticos como agentes de soporte (Antúnez, 2014).

2.2.2.3 Productos farmacéuticos

Los productos farmacéuticos son compuestos químicos sintéticos o naturales diseñados para curar y prevenir la propagación de enfermedades, así como mejorar la calidad de vida humana y animal (Maletz, 2013). Sin embargo, a pesar de sus propiedades benéficas, estas sustancias representan un riesgo potencial que no es intencionado para una gran cantidad de organismos, así como para los seres humanos, debido a la exposición crónica por una constante liberación de estas sustancias al medio ambiente y que su principal contribución son los efluentes provenientes de las plantas de tratamiento de aguas residuales. En la literatura se reportan diversas propuestas en cuanto al agrupamiento de productos farmacéuticos (Tijani, 2016), una de las propuestas más recientes la plantea Rivera-Utrilla

(2013) en la cual categoriza a los productos farmacéuticos en: anti-inflamatorios y analgésicos (paracetamol, ibuprofeno), antidepresivos (benzodiazepinas), antiepilépticos (carbamacepina), hipolipemiantes (fibratos), β -bloqueadores (atenolol, metoprolol), sustancias anti-histamínicas y anti-ulceras (famotidina), anti-cancerígenos (ciclofosfamida, ifosfamida) antibióticos (tetraciclinas), tranquilizantes, antipiréticos y estimulantes.

En principio, las moléculas activas farmacéuticas están diseñadas para intervenir en procesos metabólicos específicos en el ser humano, así como también en animales en el caso de productos veterinarios. Además, son diseñados para ser altamente biodisponibles y hasta cierto punto, resistentes a la degradación. Por lo que estas propiedades positivas en relación con el efecto terapéutico de los fármacos devienen impactos negativos una vez que los fármacos residuales se introducen en el medio ambiente. La mayoría de las moléculas activas en los fármacos tiene poca afinidad a asociarse a las fases sólidas ambientales, concentrándose en las aguas subterráneas, ríos, lagos, etc. En este sentido, se ha detectado la presencia de residuos farmacéuticos en sistemas acuáticos tanto cercanos a núcleos urbanos como en lugares remotos. Las concentraciones detectadas en lugares próximos a los puntos de salida de aguas tratadas en plantas de tratamiento están en el orden de algunas unidades a decenas de $\mu\text{g L}^{-1}$, mientras que en lugares lejanos de los puntos de emisión se han detectado concentraciones de fármacos de hasta algunas unidades de ng L^{-1} .

Los efectos adversos causados en la salud del medio ambiente y de los organismos presentes pueden no observarse de manera inmediata, sino en el mediano o largo plazo, por lo que los efectos de toxicidad aguda pueden no ser tan evidentes en comparación con los efectos de toxicidad crónica.

Tomando en cuenta que los fármacos y productos veterinarios están diseñados para interactuar con receptores en seres humanos y animales, o bien para que sean tóxicos a organismos infecciosos (bacterias, hongos, parásitos, etc.) es importante considerar que de igual manera puede tener un efecto negativo a otros organismos que pudieran poseer receptores similares a los de los seres humanos o algunos animales. Es por ello por lo que los fármacos representan un riesgo potencial hacia los organismos acuáticos y terrestres. Entre los efectos adversos ocasionados por la presencia de estas sustancias en el medio acuático resaltan la disrupción endócrina, los efectos crónicos y el aumento a la resistencia de cepas bacterianas a los medicamentos.

No solamente existe un riesgo de toxicidad en la exposición a los residuos de fármacos por parte de los organismos acuáticos, sino que además pueden existir impactos negativos que afecten a la población humana. Se ha detectado la presencia de distintos fármacos en el agua de consumo a bajas concentraciones y que pasaron por diversas etapas de potabilización (Antúnez, 2014). Bajo esta situación, se deben tener en cuenta los efectos crónicos como consecuencia de la exposición de una mezcla de residuos de fármacos a baja concentración, pero durante largos periodos de tiempo debido al consumo continuo de agua contaminada.

Se reportan que más de 5000 productos farmacéuticos fueron sintetizados y puestos a disponibilidad en el mercado para consumo humano o animal (Van Doorslaer, 2014). Los principios activos farmacéuticos, una vez consumidos, son en parte metabolizados a otros compuestos derivados. El fármaco no metabolizado y los metabolitos correspondientes son excretados a través de las heces y la orina, incorporándose a las aguas residuales o aguas negras, sin embargo, las plantas de tratamiento de aguas residuales que actualmente operan no están diseñadas para la eliminación de micro-contaminantes como por ejemplo son los fármacos, los cuales están presentes en los efluentes residuales en baja concentración y tienen propiedades fisicoquímicas distintas dependiendo de la naturaleza del fármaco (Antúnez, 2014).

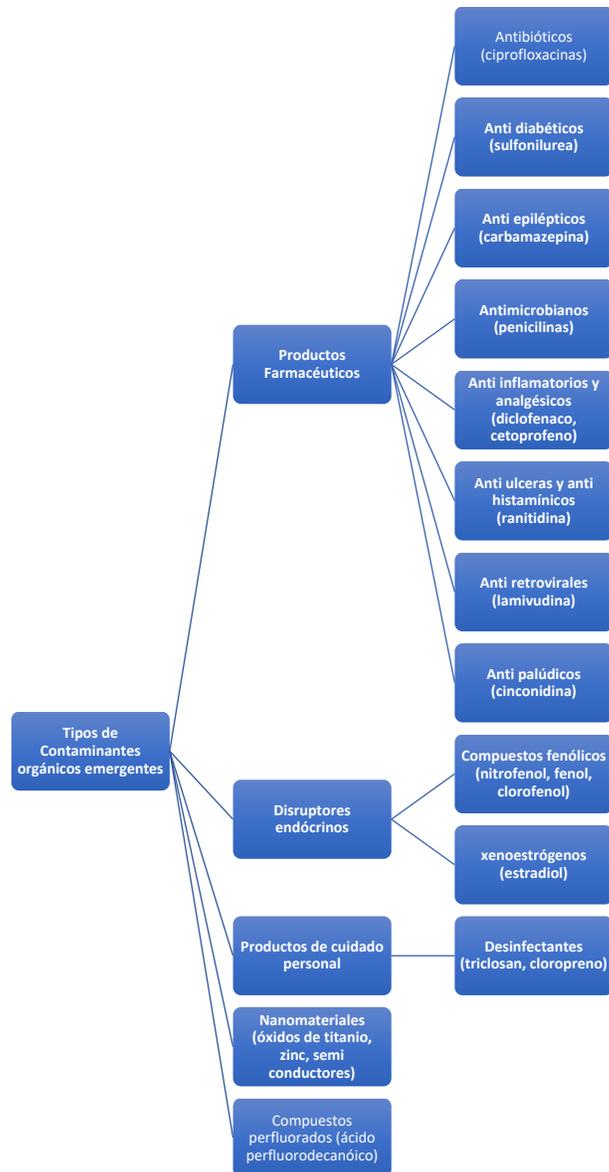
Por esta razón, los fármacos y los micro-contaminantes en general presentes en el agua residual no son removidos completamente, o por lo menos de manera significativa en las plantas de tratamiento. En consecuencia, los fármacos junto con sus metabolitos salen inalterados de la instalación de tratamiento; debe tomarse en cuenta además que una parte significativa de las aguas residuales que se generan en un núcleo urbano (entre 10 y un 20 %) no son tratadas. Todo ello hace que haya una entrada continua de fármacos y sus metabolitos al medio ambiente.

2.2.2.4 Disruptores endócrinos

El sistema endócrino se compone de las glándulas endócrinas, hormonas y receptores que regulan procesos fisiológicos del cuerpo como el proceso reproductivo que incluye desarrollo embrionario, diferenciación sexual y desarrollo metabólico (Flint, 2012). Las glándulas endócrinas secretan hormonas que circulan a través del torrente sanguíneo, sin embargo, se han encontrado que diversos compuestos imitan o interrumpen el funcionamiento adecuado de las glándulas endócrinas. Este tipo de compuestos han sido

nombrados como Disruptores Endócrinos, Disruptores Químicos Endócrinos o Moduladores Endócrinos. Pueden ser de origen sintético o natural e interactúan con los receptores estrogénicos y mejoran o inhiben el funcionamiento adecuado de las hormonas (Jackson, 2008). Otra definición es que los disruptores endócrinos interfieren con la síntesis, secreción, transporte, unión, activación o eliminación de las hormonas naturales en el cuerpo que son responsables del desarrollo, comportamiento, fertilidad y mantenimiento de la homeostasis. Estos xenobióticos están presentes en la mayoría de los productos de consumo manufacturados como botellas de plástico, juguetes, cosméticos, pasta dentífrica, detergentes, tubos de PVC, entre otros. Estas sustancias causan efectos adversos en organismos acuáticos o su progenia mediante la alteración de mensajeros químicos del cuerpo o enlazándose con receptores del sistema endócrino a niveles de exposición hasta un millón de veces menor que a niveles de exposición carcinógena (Burger, 2006). Entre los disruptores que se han convertido en foco de atención y preocupación debido a sus salidas de producción y patrones de consumo se encuentran los ftalatos, compuestos fenólicos (bisfenol A, nitrofenol, nonil fenol, alquil fenoles y clorofenoles), triclosan, etinil estradiol, dietilstilbestrol, 17β -estradiol.

A pesar del hecho de la existencia de base de datos epidemiológicos respecto a la exposición de disruptores endócrinos en la salud humana, está incrementando la incidencia de efectos adversos como conteo anormal de espermatozoides en varones, altas tasas de infertilidad, ovulación acelerada y cáncer de próstata, testicular y de senos. También se ha reportado deficiencia inmune, algunos efectos neurológicos como deterioro del desarrollo intelectual en la niñez, así como efectos psicológicos y del comportamiento. La ausencia de un principio precautorio y el monitoreo regular ha llevado a un incremento en la concentración de contaminantes en el ambiente dando lugar a un aumento en la preocupación colectiva sobre la presencia de disruptores endócrinos en agua; por lo que la identificación, cuantificación así como estrategias efectivas de tratamiento serán necesarias para la remoción de estas sustancias en el agua (Tijani, 2016).



Esquema 1. Tipos de contaminantes emergentes, tomado de Tijani (2016).

2.2.3 Fuentes de contaminación

Las categorías de contaminación que impactan a los recursos hídricos se derivan de fuentes puntuales y no puntuales. Éstas afectan y alteran las características naturales de los recursos hídricos, ocasionalmente por actividades naturales. Pero, en su mayoría el mayor de los impactos es de origen antropogénico. La contaminación del agua puede clasificarse de la siguiente manera (Ambiental, 2006):

Contaminación puntual: es aquella que proviene de una fuente específica, como suele ser un tubo o dique. En este punto el agua puede ser medida, tratada o controlada. Este tipo de contaminación está asociada a las industrias y las aguas negras municipales.

Contaminación difusa: es el tipo de contaminación producida en un área abierta, sin ninguna fuente específica; este tipo de contaminación está generalmente asociada con actividades de uso de tierra tales como, la agricultura, urbanizaciones, pastoreo y prácticas forestales. Asimismo, distintos mecanismos de transferencia como escorrentía, deposición, precipitación, volatilización etc.

La contaminación puntual es más sencilla de manejar y controlar ya que se conoce la fuente, a diferencia de la contaminación difusa, que es más complicado su control debido a que generalmente posee una naturaleza intermitente y posee una mayor cobertura, por lo que el origen de la contaminación puede ser muy variado y complejo, se ha atribuido a tres causas principales: crecimiento de la población, industrialización y aprovechamiento de recursos naturales. Sin embargo, también podemos considerar los drenados por jales mineros, la erosión, el derrame de sustancias tóxicas, subproductos de procesos industriales, un mal funcionamiento por el sistema de drenaje entre otros. Por lo que el agua no sólo disuelve, sino, además, arrastra y emulsiona a gran número de sustancias lipofílicas con los que entra en contacto a lo largo de su ciclo y, por lo tanto, modifican su calidad (González, 2010). La contaminación se puede considerar un costo social que toda actividad económica genera y que implica una pérdida de bienestar general, ya que el saneamiento para volverla potable demanda un costo extra (Aguilar, 2010).

Existen diversas fuentes de contaminación del agua, sin embargo, en México las principales fuentes son (Ambiental, 2006):

- Prácticas agrícolas. De esta práctica derivan muchos contaminantes principalmente plaguicidas que son arrastrado hasta los ríos por la lluvia y la erosión del suelo cuyo polvo pueden transportarse vía atmosférica por su dispersión depositándose en otros ríos e incluso en los océanos. Las aguas de retorno agrícola son una fuente de contaminación importante cuyo impacto se manifiesta en el alto porcentaje de cuerpos de agua que se encuentran en condiciones de eutrofización.
- Urbanización. Son descargas de residuos de origen doméstico y público que constituyen las aguas residuales municipales. Está relacionada con la cobertura de

los servicios de agua potable y alcantarillado, se incrementa en los grandes asentamientos urbanos.

- Descargas industriales. Son descargas que son generadas por las actividades de extracción y de transformación de recursos naturales usados como bienes de consumo y satisfactorias para la población. Las descargas industriales contienen una gran cantidad de sustancias tóxicas y de metales pesados, muchas de estas sustancias no se degradan bajo condiciones naturales. El volumen aproximado de agua usada en la industria es de 6 km³/año, del cual se descargan alrededor de 5.36 km³/año como aguas residuales. Es decir, más de 6 millones de toneladas al año de carga orgánica expresada como demanda biológica de oxígeno (DBO), de las cuales son tratadas sólo el 15 %. Entre las actividades más contaminantes destacan la industria azucarera, química, petrolera, metalúrgica y de papel y celulosa.
- Sector pecuario. Constituido por los efluentes de las instalaciones dedicadas a la crianza y engorda de ganado mayor y menor.
- Uso turístico y de navegación. Hay más de 850 sitios asociados a cuerpos de agua que podrían destinarse al establecimiento de lugares recreativos. Algunos ríos y estuarios son aprovechados, también, por embarcaciones de pequeño calado para el transporte de productos comerciales y para el turismo.

En México no se cuenta con la suficiente disponibilidad de agua para poder satisfacer la demanda de abastecimiento para todos los sectores, sumado al creciente deterioro de la calidad de los recursos hídricos por descargas de aguas residuales que no están reguladas, y sin tratamiento, incrementa sustancialmente el riesgo de afectar la salud de la población y al ecosistema.

Para poder disminuir el riesgo a la salud y al ecosistema por la presencia de contaminantes orgánicos, es importante llevar a cabo medidas de monitoreo que sea constante, sumado a una regulación y medidas de mitigación con el objetivo de poder mejorar la calidad de agua dependiendo del uso que se le dé.

2.3 Método de análisis de residuos múltiples o “*Screening*”

Debido a las consecuencias potencialmente peligrosas de la presencia de estos contaminantes en el medio ambiente, se necesita con urgencia los datos relativos a la concentración, el destino y el comportamiento de estos contaminantes en el medio ambiente. Con este fin, se requieren métodos de análisis para la determinación rápida,

sensible y selectiva de una amplia gama de compuestos en diversas matrices ambientales. Las metodologías de “análisis de residuos múltiples” (*screening* en inglés) se están convirtiendo en las herramientas necesarias, ya que proporcionan un mayor conocimiento sobre la contaminación del agua (Pérez-Carrera, 2007), reducen el tiempo de análisis general, el muestreo de campo y el costo. Los documentos relacionados con las metodologías analíticas de “residuos múltiples” han aumentado en los últimos años para lograr el estudio de un gran número de compuestos y sus productos de degradación. Los métodos analíticos para la detección y cuantificación de contaminantes orgánicos en general se basan en la Cromatografía de Gases (CG) o Cromatografía Líquida (CL) acoplada a Espectrometría de Masas (EM). La elección entre CG y CL depende de las propiedades fisicoquímicas de los analitos de interés. A su vez, el desarrollo e incorporación de softwares más sofisticados que permiten la detección de picos sobrelapados como Software de Informe de Deconvolución (*Deconvolution Reporting Software*, DRS), Bloqueo del Tiempo de Retención (*Retention Time Locking*, RTL) y monitoreo discriminatorio por masas específicas de los compuestos como: Monitoreo Selectivo de Iones (*Selected Ion Monitoring*, SIM), Exploración Completa (*Full Scan*), SIM/Scan, Monitoreo de Reacción Múltiple (*Multiple Reaction Monitoring*, MRM), Análisis de Ion Producto (*Product Ion Scan*), Exploración de Ion Principal (*Parent Ion Scan*) entre otros, han permitido el “barrido” de todas, o una gran parte, de las sustancias orgánicas contaminantes presentes en las matrices ambientales. De tal manera que es posible obtener la información necesaria para conocer la identidad de dichos contaminantes.

En 2003, se identificaron alrededor de 200 contaminantes orgánicos presentes en aguas grises de origen doméstico, Eriksson y colaboradores (2003) identificaron una gran variedad de fragancias como citronellol, cumarina, eugenol, farnesol, geraniol, isoeugenol y aldehído hexil cinámico. Así como algunos conservadores presentes en alimentos procesados como ácido cítrico, ácido salicílico y triclosan. Otros compuestos presentes son los ftalatos como dimetil ftalato, asimismo, productos de cuidado personal como agentes en pantallas solares (parasol). También detectaron la presencia de algunos fármacos, retardantes de flama, detergentes, emulsificantes, saborizantes, colorantes, antioxidantes y suavizantes (Eriksson, 2003).

En 2008 se identificaron 934 contaminantes objetivos (uno o más analitos en específico) y -no objetivos- (grupo de analitos desconocidos) en muestras de aguas residuales, provenientes de distintas plantas de tratamiento localizadas en las ciudades de Barcelona,

Cantabria, Madrid y Almería en España (Gómez, 2009). Se observa la presencia de fragancias, desinfectantes, plastificantes, productos de cuidado personal, agroquímicos, etc. Algunos de los compuestos identificados fueron: triclosan, galaxolida, endosulfan, octocrileno, dietil fatalato, benzofenona, DEET, timol, tomalida, entre otros.

El equipo de Pan (2014), realizó un análisis de cribado con muestras de sedimentos provenientes de la Bahía de Tokio, Japón. Una de las áreas más densamente pobladas, industrializadas y modernas en el mundo. Fueron identificados alrededor de 940 contaminantes orgánicos. Se identificaron algunos contaminantes persistentes como DDT, Clordano, Hexaclociclohexano (HCH), nonaclor, dieldrin, endrin y heptaclorepoxido. Así como algunos PCBs. De la misma manera, fueron identificados una gran variedad de sustancias químicas de origen doméstico como: antioxidantes, retardantes de flama, PCPs, plastificantes, productos de degradación de detergentes no iónicos entre otros (Pan, 2014).

Bu y colaboradores (2014) identificaron 1094 contaminantes en muestras de agua provenientes del embalse de Danjiangkou, China; debido a la intensa actividad humana en el área. En este estudio se realizó una evaluación para determinar el grado de peligrosidad de los contaminantes identificados mediante la aproximación de Evaluación de Peligrosidad Química y Estrategias de Manejo (*Chemical Hazard Evaluation and Management Strategies*, CHEMS-1), la cual fue adaptada con la tecnología de deconvolución para la identificación de los contaminantes. Los resultados arrojados mostraron que fueron identificados 15 contaminantes considerados de prioridad, entre ellos, algunos HAP's, cafeína, benzofenona, trietil fosfato, cloroanilinas entre otros. Asimismo, fueron identificados derivados de fenoles, PCPs como triclosan, desinfectantes domésticos, fungicidas, plaguicidas y pigmentos (Bu, 2014).

Asimismo, en 2015 se implementó este método de análisis para identificar contaminantes orgánicos presentes en aguas superficiales de la ciudad de Yakarta, Indonesia (Dsikowitzky L. e., 2016). Donde se identificaron 71 compuestos *-no objetivo-* provenientes de las descargas de aguas residuales. Los compuestos identificados son utilizados en la manufactura industrial como plastificantes, retardantes de flama, residuos de surfactantes, antioxidantes, productos de cuidado personal, desinfectantes, productos farmacéuticos, estimulantes y agroquímicos, por nombrar algunos. Dentro de las sustancias identificadas se encuentran: cafeína, DEET, nicotina, diclofenaco, ibuprofeno, benzotiazol, triclosan, trietil citrato, indol, isoquinolina, mentol, bisfenol A, entre otros.

Ese mismo año, Dsikowitzky y colaboradores (2015) realizaron un análisis de cribado en Alemania para identificar contaminantes orgánicos provenientes de la industria del papel, muestreando aguas utilizadas en la producción del papel directamente adentro de la planta, efluentes provenientes de dichas plantas de producción y muestras de agua de río que recibe la descarga de los efluentes tratados provenientes de dicha planta procesadora. Se identificaron 23 contaminantes *-no objetivo-* y que fueron agrupados en distintas clases químicas. La presencia de los contaminantes fue relacionada con diferentes etapas o procesos en la producción del papel como los fotoiniciadores, constituyentes presentes en las tintas, constituyentes térmicos en el papel, constituyentes presentes en la madera y subproductos en el proceso de fabricación y blanqueamiento. Se determinó que el bisfenol A y el 2,4,7,9-tetrametil-5-decin-4,7-diol estuvieron presentes en prácticamente todas las muestras provenientes de los efluentes industriales en altas concentraciones (hasta 3400 y 1700 μgL^{-1} respectivamente (Dsikowitzky, 2015).

A pesar de que el análisis de residuos múltiples o *screening* arroja mucha información acerca de la identidad de los compuestos orgánicos presentes en una muestra, existe el reto de identificar dichas sustancias de muestras complejas como aquellas que son provenientes de matrices ambientales que arrojan cromatogramas en los cuales la identificación manual de los picos se dificulta demasiado y la probabilidad de no identificar correctamente a las sustancias presentes es mayor. Por lo que se vuelve necesario el uso de algunos softwares basados en el método de deconvolución y que nos permitan detectar los picos sobrelapados o enmascarados en la línea base (Wylie, 2006).

El método de deconvolución es comúnmente utilizado en cromatografía, y se parte de la premisa que los espectros de las mezclas son un conjunto de sumas lineales de los componentes presentes en los espectros. Asimismo, dichos componentes son linealmente independientes y donde los principales componentes son iguales en número a los compuestos presentes. De la misma manera, podemos asumir que un espectro puede ser representado como la combinación lineal de los principales componentes. Cada componente, cuya modelación matemática se basa en una transformada discreta de Fourier (Lacey, 1986) se representan como una función en forma de pico (*peak-shaped function*) con simetría gaussiana, los cuales, en una muestra pueden sobrelaparse o enterrarse en la línea base.

El proceso general de la deconvolución consiste en cuatro pasos secuenciales (Du, 2013): 1) análisis de ruido, 2) percepción de componentes, 3) determinación de la forma del modelo

y 4) el espectro de deconvolución. En el primer paso el ruido es extraído de los datos del archivo CG-EM mediante el cálculo del factor de ruido que se utiliza para representar la magnitud de la señal en unidades de ruido. En el segundo paso, percepción de componentes, se perciben los componentes cromatográficos individuales. La noción detrás de la percepción del componente es que el componente existe cuando una magnitud suficiente de iones maximiza juntos. El tercer paso determina el modelo del pico para ser usado en el siguiente paso de la deconvolución. La forma del modelo por cada componente percibido es tomada como la suma de los cromatogramas de iones individuales que maximizan juntos y cuyos valores de las formas están dentro del 75% de valor máximo para este componente. El último paso (deconvolución) extrae los espectros purificados de los cromatogramas de iones individuales de cada componente usando la forma del modelo y el método de mínimos cuadrados (Du, 2013).

Para poder realizar la identificación de las sustancias presentes en las muestras de agua, es necesario primero generar los cromatogramas correspondientes en modo Scan. Una vez generado el archivo, es procesado mediante el Software de Informe de Deconvolución (DRS). El DRS está diseñado para simplificar este proceso mientras produce identificaciones de picos mucho más precisas. El DRS de Agilent® combina los resultados de tres paquetes complementarios de análisis de datos CG/EM. Primero, el software CG/EM ChemStation realiza un análisis cualitativo normal para todos los compuestos calibrados utilizando un ion objetivo y hasta tres calificadores. Se informa una cantidad para todos los compuestos calibrados que se detectan. Luego, el DRS envía el archivo de datos a un paquete de deconvolución espectral desarrollado por el Instituto Nacional de Estándares y Tecnología (NIST). Este software, denominado Sistema Automático de Descomposición e Identificación Espectral de Masas (*Automated MassSpectral Deconvolution and Identification System, AMDIS*) deconvoluciona los espectros de picos de cromatografía que se superponen. El AMDIS deconvoluciona el cromatograma y extrae "espectros limpios" de los picos superpuestos. En la mayoría de los casos, el AMDIS tiene mucho éxito en aislar el espectro de un compuesto del sangrado de la columna, otros analitos e interferencias extraídas, incluso cuando las abundancias de interferencia son mucho mayores que el analito objetivo.

Como un requisito adicional para la identificación de compuestos, el analista puede requerir que el tiempo de retención (t_R) del analito se encuentre dentro de una ventana de tiempo específica. Debido a que el bloqueo de tiempo de retención (RTL) se usa para reproducir

los t_R de la base de datos con alta precisión, esta ventana puede ser bastante pequeña, generalmente de 10 a 20 segundos. Como paso de confirmación, los espectros deconvolucionados de todos los aciertos de AMDIS se comparan con la biblioteca de espectros de masas provenientes de la base de datos del NIST.

Cada compuesto identificado se reporta con su t_R , número de CAS y nombre de compuesto. También se genera un factor de coincidencia entre el espectro de masas generado experimentalmente y algún espectro similar que se encuentre registrado en la biblioteca de espectros de masas. Este factor de coincidencia o *match factor* se considera recomendable cuando es ≥ 70 , sin embargo, en trabajos previos se acepta un valor mínimo del factor de coincidencia ≥ 60 (Bu, 2014).

2.4 Modelo QSAR (Quantitative Structure-Activity Relationship)

Debido a la gran cantidad de sustancias químicas que constantemente son desarrolladas y producidas, sumado al hecho de que solo un número muy reducido de sustancias están caracterizadas toxicológicamente, fue necesario generar dicha información de manera empírica, lo que no siempre llevó a generar información precisa y confiable acerca del potencial tóxico de las sustancias químicas (Reuschenbach, 2008). Debido al gran reto que representa generar información precisa de cientos de miles de sustancias químicas que constantemente son liberadas al medio ambiente y/o se desarrollan para fines de investigación o industrial, fue necesario generar nuevas herramientas que nos permita caracterizar estos compuestos de manera rápida, factible, económica y precisa. Para esto, se desarrollaron diversos modelos que permita generar o en su defecto, explicar el comportamiento de diversas sustancias en el medio ambiente, así como su potencial tóxico. En el campo de la evaluación de riesgo ambiental, el uso de modelos QSAR se ha incrementado con el tiempo para predecir el destino y los efectos de las sustancias químicas cuando es muy poca la información disponible. Acoplado con el uso de estos modelos están las técnicas de selección análoga en las cuales los datos asociados con similitudes estructurales de las sustancias químicas son usados para estimar los niveles de riesgo de las sustancias para las cuales no hay datos disponibles (Lipnick, 1995).

El modelo QSAR por sus siglas en inglés (*Quantitative-Structure Activity Relationship*) tuvo su origen a inicios del siglo XX con la publicación de la regla de Meyer-Overton (Lipnick, Charles Ernest Overton: Narcosis studies and a contribution to general pharmacology, 1986). La regla establece que la potencia de un anestésico o un narcótico del sistema

nervioso central está correlacionada con su carácter lipofílico. Durante los últimos 100 años, se han planteado diversas hipótesis en relación con los mecanismos de acción de este tipo de sustancias y que van desde perturbaciones generales de las membranas celulares debido a la partición no-específica de xenobióticos hasta mecanismos que involucran partición específica en micrositios de membrana (Bradbury, 2003). Por lo que la regla de Meyer-Overton, con sus correspondientes modificaciones, proporciona las bases para el desarrollo del modelo QSAR y que en la actualidad es capaz de estimar la toxicidad de diversas sustancias químicas orgánicas.

El desarrollo del modelo QSAR se ha dirigido a predecir de manera precisa, efectos adversos en organismos acuáticos mediante el desarrollo de diversas técnicas o reglas. Estas aproximaciones incluyen sistemas expertos que utilizan subestructuras químicas, fragmentos moleculares o varios parámetros físicos y químicos como el coeficiente de partición octanol-agua, el potencial de ionización y el potencial REDOX, para identificar las vías específicas de los modos de acción. Además de alimentación progresiva en redes neuronales, combinados con correlaciones lineales que han sido propuestas para este propósito (Bradbury, 2003).

Como premisa inicial, se parte de la idea de que sustancias que pertenecen a una misma clase química, deben comportarse toxicológicamente de una manera similar. Consecuentemente la serie homóloga de dichos compuestos fueron utilizados para desarrollar Relaciones de estructura-toxicidad asumiendo que los efectos tóxicos fueron por causa de un componente estructural en común. El coeficiente de partición octanol-agua ha sido utilizado para predecir respuestas de toxicidad. Por lo que, al establecer relaciones lineales, se esperaría observar que las pendientes en estas regresiones fueran cercanas a la unidad si la partición fuera el único proceso responsable por las diferencias en el potencial de respuesta de las sustancias químicas con una clase definida. Sin embargo, diversos estudios en fenoles policlorados, ésteres, isotiocianatos y acrilatos arrojan pendientes mucho menores que la unidad. Por lo que implica el uso de una mayor cantidad de información como parámetros estéricos y electrónicos, para explicar la variabilidad en la toxicidad observada; bajo la suposición que los efectos adversos de estos químicos y su potencial está relacionado con diversos procesos toxicodinámicos y toxicocinéticos (Bradbury, 2003).

2. 4. 1 ECOSAR (Ecological Structure Activity Relationships)

Desde 1981, la Agencia de Protección al Medio Ambiente de los Estados Unidos (*United States Environmental Protection Agency*, US EPA) ha usado modelos SARs (*Structure-Activity relationship*, SAR) para predecir la toxicidad acuática de nuevas sustancias químicas en ausencia de datos experimentales. La toxicidad aguda de estas sustancias para peces (agua marina y aguas epicontinentales), pulgas de agua (dáfidos) y algas verdes han sido foco de desarrollo de los modelos SARs (Sanderson, 2003).

ECOSAR es un programa computacional de fácil uso que fue desarrollado y aplicado por la US EPA para predecir toxicidad de compuestos químicos en diversos organismos acuáticos como peces, invertebrados acuáticos (dáfidos) y algas verdes basado en el modelo de QSAR (Nabholz, 1993).

La relación estructura-actividad (SAR) de más de 50 clases químicas distintas son integrados en el programa ECOSAR, los SARs están todos basados en algoritmos que reflejan la relación entre el logaritmo de la toxicidad acuática de los químicos utilizados en el desarrollo de los SAR para una clase química específica (*training set*) y el logaritmo del coeficiente de partición octanol agua mediante una regresión lineal (Reuschenbach, 2008). Inicialmente, se sabe que 37 SARs fueron documentados para la predicción de toxicidad aguda en peces, 30 SARs para la predicción de toxicidad aguda en especies *Daphnia* y 20 SARs para la inhibición del crecimiento de algas. Con el tiempo, una mayor cantidad de clases químicas y sus respectivos SARs fueron añadidos al programa (Cash, 2001).

Actualmente, la única información requerida para poder acceder a la información ecotoxicológica de un compuesto, es su notación SMILES o su número CAS. Si el valor experimental de $\log K_{ow}$ no está disponible, dicho valor es calculado por ECOSAR usando sub-rutinas KOWWIN y/o CLOGP. Todas las predicciones de toxicidad dependen los valores calculados o medidos de $\log K_{ow}$. En los casos donde ECOSAR arroje dos resultados para la misma clase química, uno basado en KOWWIN y el otro en CLOGP, la media geométrica de los dos valores fue usada para la comparación con el resultado experimental (Reuschenbach, 2008).

Algunos estudios han concluido que la exactitud de ECOSAR con respecto a los datos de toxicidad aguda en *Daphnia magna*, así como la inhibición de crecimiento en algas, se encuentra dentro de los intervalos de predictibilidad reportados. No así para organismos ubicados en niveles tróficos superiores. Por lo que es importante mejorar la documentación

de la información de los SARs con la intención de poder mejorar el carácter de predictibilidad del software. El cual, además de generar información de toxicidad de sustancias que experimentalmente no han sido evaluadas, es de fácil manejo y disponible de manera gratuita.

El uso de ECOSAR como instrumento en la evaluación de riesgo ambiental ha sido ampliamente utilizado para poder estimar el nivel de riesgo de diversas sustancias químicas que son liberadas a los ecosistemas acuáticos. Algunos estudios arrojan que las predicciones de datos de toxicidad generados por ECOSAR de químicos β -bloqueadores y algunos otros fármacos para algunas especies como *Daphnia magna*, *Desmodesmus subspicatus* y *Lemma minor* son muy cercanas a los datos generados de manera empírica, algunas de las sustancias estudiadas fueron el metropolol, atenolol y propanolol debido a su amplio uso como agente primordial en el control de enfermedades cardiovasculares en Alemania, donde se observó que los valores de toxicidad predichos para algas y dáfnidos son bastante cercanos y aceptables en comparación con los datos de toxicidad empíricos (Cleuvers, 2005).

Asimismo, se han realizado estudios dirigidos a la comparación de los datos predichos por ECOSAR con respecto a los generados experimentalmente, como el realizado por Dom (2010), el cual estudió la toxicidad aguda de una serie de compuestos derivados de la anilina (anilina, 4-cloroanilina, 3,5-dicloroanilina y 2,3,4-tricloroanilina) a causa de que este tipo de compuestos son ampliamente utilizados en la producción de poliuretanos, caucho, productos cosméticos, pigmentos y plaguicidas. Por lo que este tipo de compuestos están presentes en el medio ambiente a niveles detectables y son considerados como contaminantes prioritarios en la evaluación de riesgo ambiental (Abe, 2001). Esta evaluación toxicológica se llevó a cabo con diferentes organismos como *Escherichia coli*, *Pseudokirchneriella subcapitata*, *Daphnia magna* y *Danio rerio*.

Particularmente para *Daphnia magna*; la tendencia de toxicidad predicha por ECOSAR con la experimental es la misma, sin embargo, las pruebas de inmovilización con este organismo mostraron diferentes patrones de toxicidad de acuerdo con las clasificaciones de toxicidad utilizadas. A pesar del hecho de que la toxicidad de algunos grupos químicos para algunos organismos puede ser predecible, la toxicidad también se ve modificada por procesos que pueden ser multivariados, no lineales o específicos de cada especie la mayoría de los modelos de predicción pueden ser utilizados para obtener una primera impresión general del potencial tóxico de los contaminantes (Dom, 2010).

Por otra parte, en algunos estudios, ECOSAR se ha utilizado en el desarrollo de métodos de Evaluación Probabilística de Riesgos (*Probabilistic Risk Assessment*, PRA) los cuales reconocen que no hay absolutos en la evaluación de riesgo, sin embargo hay continuos de potencial exposición, efectos de situaciones y un rango de certeza. En el caso particular de este estudio, la información de EC₅₀ obtenida mediante ECOSAR y el diseño de curvas para exposición permitieron calcular cocientes de peligrosidad (*Hazard Quotients*, HQ) para sustancias químicas, particularmente los fármacos y algunos PCPs (Sanderson, 2003).

El uso de este software nos permite obtener información de ecotoxicidad de los compuestos identificados, gracias a su carácter predictivo para organismos pertenecientes a la especie *Daphnia magna*, debido a que es un organismo que ocupa una posición clave en la red trófica acuática además de que es posible determinar la calidad del agua a través de su consumo selectivo de algas, su alta tasa de reproducción, su falta de una efectiva respuesta de escape. Es un organismo representativo del grupo de zooplancton y, por ende, habitar y desarrollarse a lo largo de la columna de agua, lo vuelve más susceptible a la presencia y biodisponibilidad de contaminantes presentes en el agua (Dom, 2010).

2.5 Xochimilco, zona de estudio

2.5.1 Contexto

El papel de Xochimilco y San Gregorio Atlapulco como proveedor de agua a la capital del país, ha sido determinante en la degradación de sus lagos, y debido al desecamiento de la cuenca de México, Xochimilco y San Gregorio Atlapulco empezó a sufrir escasez de agua desde 1883. A inicios del siglo XX se construyó un acueducto por medio del cual los manantiales de Xochimilco empezaron a aportar agua para la Ciudad de México, en cantidades cada vez mayores hasta que los manantiales comenzaron a agotarse. Por lo que la necesidad conllevó a la construcción de pozos para extraer agua subterránea por lo que poco a poco provocó una disminución en el nivel de los canales. Asimismo, la extracción de agua mediante pozos ha favorecido el constante hundimiento del terreno y que actualmente continua, sin embargo, el periodo entre 1950-1980 fue el más crítico en el cual la zona central se hundió 5 m. En la zona lacustre del sur y en el ejido de San Gregorio, ubicado entre el canal de Chalco y Xochimilco, hubo en el mismo periodo, hundimientos de 4 m (GPPA, 2012).

A consecuencia de esto, en 1957 se empezó a mantener artificialmente el nivel de los canales mediante la descarga de aguas residuales provenientes de la capital, sin embargo, las aguas tratadas no fueron medida suficiente para detener el hundimiento y desecamiento del sistema lacustre. Su condición como área de alta actividad agrícola y pecuaria y que abastecía al centro del país, aunado a la carencia de agua de la zona, hizo que los agricultores empezaran a desecar el humedal para evitar la pérdida de ganado, y se introdujeron plantas de ornato como el lirio acuático (*Eichhornia crassipes*) y que posteriormente se convirtió en plaga de los canales. Por lo que la carencia crónica de agua inició el proceso de desecación y con ello la degradación ecológica y económica de Xochimilco (GPPA, 2012).

Debido a que, en la época prehispánica, Xochimilco fue un centro productivo agrícola, además de representar una de las formas de cultivo más productivas en el mundo fue que el 11 de diciembre de 1987, el Centro Histórico, la zona lacustre, la zona chinampera y la zona agrícola de Xochimilco, fueron inscritas en el catálogo del Patrimonio de la Humanidad por la UNESCO, con el objetivo de que el valor que representa debe ser protegido en beneficio de la humanidad.

A pesar del impacto ambiental derivado del cambio en la calidad del agua, así como la modificación hidrológica natural y la presión demográfica, Xochimilco y San Gregorio Atlapulco aún conservan características bióticas, abióticas y culturales, que las identifican entre las más importantes reservas ecológicas de la Ciudad de México. Por lo que en 1992 y por Decreto del Ejecutivo Federal, fue publicado en el Diario Oficial de la Federación la declaración de los Ejidos de Xochimilco y San Gregorio Atlapulco como Área Natural Protegida (ANP) bajo la categoría de Zona Sujeta a Conservación Ecológica; por ser una zona prioritaria de preservación y conservación del equilibrio ecológico (hábitat y resguardo de diversas especies de flora y fauna, sistema termorregulador y captador de carbono), la conservación del suelo agrícola y del sistema de chinampas. Esto con la finalidad de incrementar la capacidad de recarga de los acuíferos y evitar inundaciones y hundimientos que afectan a la región.

En 2004, la Convención Internacional sobre Humedales Ramsar suscribió a la zona lacustre de Xochimilco en la lista de Humedales de Importancia Internacional (GPPA, 2012). En el mismo año, Xochimilco fue reconocido como sitio AICA (área importante para la conservación de las aves) y recientemente, el pasado 2017 fue nombrado como uno de los 13 nuevos entornos paisajísticos celebrados como Sistemas Importantes del Patrimonio

Agrícola Mundial (SIPAM) por la Organización de las Naciones Unidas para la Alimentación y la Agricultura (FAO, 2018).

2.5.2 Localización de la zona de estudio

San Gregorio Atlapulco se encuentra ubicado en la alcaldía de Xochimilco, que se localiza al sur de la Ciudad de México, colinda al norte con las delegaciones Tlalpan, Coyoacán, Iztapalapa y Tláhuac, al este con Tláhuac y Milpa Alta, al sur con Milpa Alta y Tlalpan, y al oeste con Tlalpan. Presenta una superficie de 122 km², la cuál equivale al 8.4 % de la superficie de la CDMX. Se encuentra entre las coordenadas geográficas 19° 09' latitud norte y 99° 09' de longitud oeste.



FIGURA 2. UBICACIÓN DE XOCHIMILCO DENTRO DE LA CIUDAD DE MÉXICO

La alcaldía de Xochimilco, y particularmente San Gregorio Atlapulco, es predominantemente rural con extensos campos y bosques, con una parte minoritaria de su territorio densamente urbanizada. El territorio en la zona de llanuras tiene una altitud promedio de 3,200 m.s.n.m. Entre los pueblos que se localizan en la delegación Xochimilco, San Gregorio Atlapulco siempre ha sido uno de los más grandes (GPPA, 2012). En San Gregorio Atlapulco se localiza la mayor cantidad de chinampas activas con 1530 chinampas, que representan el 42.7 % del total activo, con una abundante red canalera fina. Además de 530 chinampas potenciales, lo que da un total de 2,060 chinampas existentes, distribuidas en 23 sectores, que comprenden una superficie 484 ha, correspondiente al 22 % de la superficie total que ocupa el sistema chinampero (González-Pozo, 2016). Hacia al norte, en la parte colindante con el ejido hay 382 chinampas inundadas a causa de los

hundimientos graduales de la zona, originados por la extracción del agua del subsuelo, esto corresponde a un aproximado de 25.4% de las chinampas existentes. En la Figura 2 se presenta un mapa de la zona de estudio.



FIGURA 3. UBICACIÓN DE LA ANP Y SITIO DE ESTUDIO DE SAN GREGORIO ATLAPULCO AL SUR DE LA CDMX.

2.5.2.1 Clima

El clima es tipo C (W_2) (w) b (i'), que corresponde a templado subhúmedo, con lluvias en verano. La precipitación total anual en la zona es de 973.2 mm para la planicie lacustre; las lluvias más abundantes se presentan en los meses de junio y septiembre, la temperatura media anual promedio es de 15.4 °C, entre noviembre y enero se presentan de 7 a 15 días de heladas (INEGI, 1997).

2.5.2.2 Geología

El origen de la cuenca de México sucedió en los últimos 25 millones de años, resultado de una actividad volcánica y tectónica que inició en la época del Mioceno. A finales del Plioceno se genera una efusión de basalto que crea la sierra de Chichinautzin. Esta formación de Sierra resultó en una represa natural dando origen a cuerpos de agua ; actualmente en la zona lacustre de Xochimilco sedimentos arcillosos con arenas de grano fino, con alrededor del 50 % de cenizas volcánicas, cuya textura va de arenosa hasta limo-arcillosa, los cuales retienen una alta cantidad de humedad. En cuanto a los suelos se caracterizan por ser

profundos y discontinuos debido a que se originaron como pequeños islotes rodeados de agua, se componen de basalto tipo Feozem háplico (Hh) o tierra parda, suelos que se pueden caracterizar por poseer una capa superficial oscura, suave, con alto contenido de materia orgánica y nutrientes, gleysol (Hg), pantanosos y/o saturados de humedad la mayor parte del año y por último un suelo antrópico (INEGI, 1997).

2.5.2.3 Hidrología

En el año de 1908 se inició el bombeo de los manantiales que fluían hacia la zona lacustre para abastecer de agua a la Ciudad de México. Posteriormente, en el año de 1925, comenzó la explotación de los mantos acuíferos. Actualmente pertenece a la región del Pánuco, forma parte de la cuenca hidrológica del río Moctezuma y la subcuenca lago de Texcoco-Zumpango; la mayor parte de las corrientes de Xochimilco, son de escorrentía intermitente, ya que solo tiene caudales importantes después de fuertes precipitaciones. La zona forma un humedal en una cuenca cerrada, tal secuela es un remanente del lago que sufrió cambios a lo largo del tiempo; está conformado por canales “apantles”, lagos permanentes y temporales, así como de las llamadas “chinampas”. En San Gregorio, existía una red canalera de 205 Km, conformada por acalotes, apantles y canales; sin embargo, en las últimas décadas muchos de éstos se han secado y rellenado. A diferencia de Xochimilco, donde los canales conservados solo son los de navegación, en San Gregorio aún se conservan parte de la red canalera conformada entre apantles y acalotes, que son de gran utilidad para llevar agua a las chinampas. Actualmente, el 45 % de los canales de San Gregorio Atlapulco se encuentran cegados y solo un 20 % es navegable (González-Pozo, 2016).

Los canales y lagunas de la región están sustentados de manera artificial con la utilización de agua residual para mantener los niveles de agua en los canales, con el fin de abastecer agua para el riego de cultivo de los productos agrícolas, así como para cubrir las necesidades de actividades recreativas. Conforme a la Ley de Aguas Nacionales (LAN, 1992) se define a las aguas residuales como aguas con componentes variados provenientes de descargas de uso público urbano, doméstico, comercial, agrícola, pecuario, de servicios, y en general de cualquier otro uso. El aporte de agua residual proviene de tres plantas de tratamiento: Cerro de la Estrella, construida en 1971, San Luis Tlaxiatemalco construida en 1989; Ambas plantas poseen tratamiento terciario de lodos activados con filtración y desinfección mientras que San Pedro Actopan construida en 1997, solamente posee un tratamiento secundario. La planta de tratamiento de Cerro de la Estrella presenta

un gasto de diseño de 4000 lps, mientras que su gasto de operación es de 2200 lps. En la planta de San Luis Tlaxiatemalco presenta un gasto de diseño de 150 lps y su gasto de operación es de 65 lps, asimismo la planta de San Pedro Actopan presenta un gasto de diseño de 15 lps, mientras que su gasto de operación es de 10 lps (Zambrano, 2014).

2.5.3 Actividades agrícolas y pecuarias

Dentro de este sector, existe el uso intensivo de los recursos naturales y económicos, así como la presencia de actividad de horticultura y floricultura. Los cultivos más recurrentes son la lechuga, verdolaga, arúgula y cilantro. La cosecha puede ser cultivada hasta las orillas de la chinampa, la tecnología empleada no es total en la producción, puesto que las prácticas empleadas como el barbechado, rastreo, nivelación, siembra y la transportación al punto de venta, se sigue empleando entre los miembros de la comunidad local, y se ha transmitido generacionalmente. Se tiene registro de que en San Gregorio, cuya superficie es de un total de 482.2 ha, aproximadamente el 2.1 % (10ha) de las chinampas se cultivan productos a través de invernaderos, así mismo, el 26 % de los productores utilizan métodos agroecológicos. Por otra parte, el 2 % de las chinampas son de uso pecuario (González-Pozo, 2016).

2.5.4 Problemática de la zona

En las últimas décadas la urbanización desmedida ha incrementado la demanda de agua lo que ha propiciado la sobreexplotación del agua y el agotamiento de sus pozos y, por consiguiente, un hundimiento diferencial por la sobreexplotación de los mantos acuíferos. De acuerdo con González-Pozo (2016), las pequeñas construcciones rústicas y ligeras, normalmente empleadas para guardar implementos o insumos necesarios para las labores de cultivo, no son motivo de preocupación; en cambio, sí lo son las 110 construcciones de cemento/block o cualquier material duradero sobre suelo chinampero. Casi todas las construcciones están provistas con tinacos de capacidad suficiente para las necesidades de una familia, aunque casi ninguna con drenaje sanitario, lo que quiere decir que casi todas vierten sus aguas servidas a la red canalera, contaminando sus cauces. Son este tipo de pequeñas unidades que aparecen gradualmente lo que constituye la llamada “invasión hormiga” de viviendas no autorizadas. además de que el 14.4 % de las chinampas en San Gregorio (68.9 ha) se encuentran en proceso de urbanización. Este proceso de urbanización en conjunto con la actividad agrícola ha producido como consecuencia un aumento en la descarga de aguas tratadas y negras que son las que continuamente están

recargando los pozos naturales de Xochimilco liberando al medio acuático cientos de sustancias químicas, como agroquímicos utilizados como plaguicidas (organofosforados, organoclorados, carbamatos entre otros), fertilizantes; así como productos de cuidado personal, residuos de origen industrial, doméstico, hidrocarburos aromáticos policíclicos (HAP's), medicamentos y otros compuestos que son tóxicos para la flora y fauna del lugar, aunado a la introducción de microorganismos patógenos oportunistas (Baken, 2011). Asimismo, la presencia de contaminantes en el agua reduce su aprovechamiento o (re-uso) ambiental, constituye un riesgo para la vida acuática, limita su utilización para la agricultura (e.g. riego de hortalizas) y no es apta para el consumo humano (Ponce de Leon-Hill, 2017).

La actividad turística en la zona chinampera, aunque poca, introduce también contaminantes a los canales, básicamente metales por la degradación de las pinturas de las trajineras y por la remoción de los sedimentos de los canales al utilizar los palos para su propulsión, lo cual contribuye a solubilizar los contaminantes atrapados en éstos.

El manejo inadecuado de recursos acuáticos, originado en la década de los setentas por un programa gubernamental federal de producción acuícola, se relaciona con la introducción de especies no nativas (tilapia y carpa), competidoras y depredadoras de especies nativas, como el ajolote, que han contribuido con su extinción ecológica. (Dalkmann, 2012). Dado que estas especies introducidas no tienen depredadores naturales, su población ha crecido exponencialmente y, con ello, la introducción de patógenos oportunistas, aunado al incremento de materia orgánica y nutrientes por la producción de heces y la excreción de productos nitrogenados. La tilapia, en particular, ha contribuido a la vez, con la erosión de los bordos de las chinampas por su comportamiento reproductivo. A la fecha, se realizan programas para la extracción de estas especies en un intento por controlar sus poblaciones y reducir el impacto a las especies nativas y el deterioro de bordos y canales (Ponce de Leon-Hill, 2017).

A pesar de los diversos estudios que se han realizado sobre compuestos orgánicos como plaguicidas o contaminantes emergentes en Xochimilco, nunca se ha realizado una evaluación cualitativa o *screening* de todos los contaminantes orgánicos en el agua de los canales de Xochimilco y menos aún en San Gregorio. Este debe ser un análisis obligado para entender y dimensionar mejor el problema de contaminación de la zona.

3. OBJETIVOS

3.1 Objetivo General

Identificar los compuestos orgánicos de mayor riesgo potencial en el agua para el ecosistema acuático en sitios ambientalmente diferentes en los canales de San Gregorio Atlapulco.

3.1.1 Objetivos Particulares

- Implementar y aplicar un método de análisis de residuos múltiples cualitativo y posteriormente semi-cuantitativo mediante la técnica de Cromatografía de Gases Acoplado a Espectrometría de Masas (CG-EM).
- Identificar los contaminantes principales en función de su toxicidad y una aproximación de sus concentraciones.

4. METODOLOGÍA

4.1 Sitio de muestreo

Se seleccionaron los puntos de muestreo de acuerdo con los siguientes criterios:

- a) El impacto agrícola
- b) El impacto urbano
- c) Zona de descarga
- d) Zona ejidal distanciada de la zona urbana

Con base en los criterios ya mencionados se seleccionaron 9 sitios de muestreo en los siguientes canales (sitios): Tecaltitla, Tlilac, Potrero y la Espejera (impacto agrícola), Fábrica y Coapatitla (Impacto urbano), Puente de Urrutia (zona de descarga), Bordo y San Sebastián (Zona ejidal distanciada de la zona urbana). En la tabla 2 se presentan las coordenadas de los sitios de muestreo.

En los canales de Tecaltitla, Tlilac, Potrero y La Espejera predomina la actividad agrícola, también se observan asentamientos irregulares cercanos a estos sitios.

Mientras que en Fábrica y Coapatitla el impacto urbano es mayor debido a que se encuentran en el límite con la zona urbana, por lo que, en estos sitios, la descarga de aguas domésticas provenientes directamente del drenaje urbano es mayor.



FIGURA 4. SITIOS MUESTREADOS EN LA ZONA DE LOS CANALES DE SAN GREGORIO ATLAPULCO.

TABLA 2. DATOS DE GEOPOSICIONAMIENTO EN UTM DE LOS SITIOS DE MUESTREO

Sitio	X	Y
Fábrica	493538	2129268
Tecaltitla	492620	2130494
Coapatitla	494007	2129180
El bordo	494287	2130297
Potrero	493352	2129792
San Sebastián	495450	2129964
Tlilac	493088	2130128
La Espejera	494072	2129936
Puente de Urrutia	492177	2129669

4.2 Descripción del muestreo

La recolección de las muestras se realizó durante la época de estiaje, en el periodo de abril-junio del 2018. Las muestras de agua fueron tomadas por medio de una botella Van Dorn, la toma de las muestras se realizó a media profundidad de los canales, el agua se vació en botellas de vidrio color ámbar de 4 L adecuadamente etiquetadas y que previamente habían sido lavadas con ácido y agua destilada. Asimismo, se midieron distintos parámetros fisicoquímicos *in situ* por medio de un equipo multiparamétrico (Hanna HI9829). Los parámetros medidos fueron:

- pH
- Conductividad
- Temperatura
- Oxígeno disuelto (mg L^{-1} y %)
- Salinidad
- Sólidos disueltos totales

Una vez obtenidas las muestras, se almacenaron en hielo a 4 °C conservándose así durante su transportación hasta el laboratorio para su posterior procesamiento y análisis.

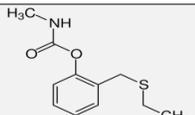
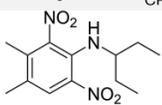
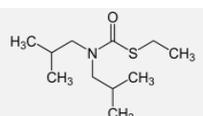
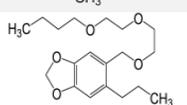
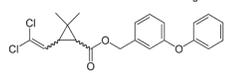
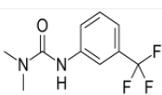
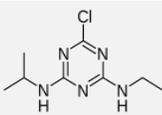
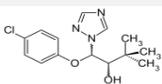
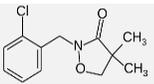
4.3 Procesamiento de las muestras y trabajo de laboratorio

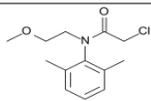
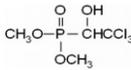
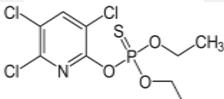
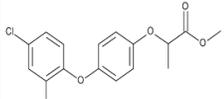
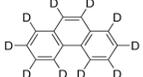
4.3.1 Preparación de las soluciones de los compuestos modelo

Para poder llevar a cabo la semi-cuantificación fue necesario definir y proponer compuestos modelo, de acuerdo con la literatura sobre estudios previos para la semi-cuantificación de contaminantes *-no objetivo-*. La selección se llevó a cabo con base en su familia química y así, poder establecer similitudes estructurales y/o de propiedades fisicoquímicas entre los contaminantes y los compuestos modelo (Bu, 2014).

Los compuestos modelo, seleccionados fueron los siguientes: *pendimetalina*, *clorofos*, *fluometuron*, *dimetacloro*, *fenantreno d-10*, *metil diclofop*, *clomazona*, *atrazina*, *butilato*, *etiofencarb*, *clorpirifos*, *triadimenol*, *butóxido de piperonilo* y *permetrina*. Todos en presentación de 1mL ampolletado, todos con una pureza entre 95 y 99% (CHEM SERVICE INC).

TABLA 3. COMPUESTOS MODELO O ESTÁNDARES PARA LA SEMICUANTIFICACIÓN.

Nombre	CAS	Familia Química	Masa molecular (g/mol ¹)	Concentración comercial (mgL ⁻¹)	Estructura
Etiofencarb	29973-13-5	Carbamato	225.31	100	
Pendimetalina	40487-42-1	Anilina	281.31	100	
Butilato	2008-41-5	Herbicida nitrogenado	217.38	100	
Butóxido de piperonilo	51-03-6	Éter	338.44	100	
Permetrina	52645-53-1	Piretroide	391.29	100	
Fluometuron	2164-17-2	Urea	232.2	100	
Atrazina	1912-24-9	Triazina	215.68	100	
Triadimenol	55219-65-3	Triazol	295.76	100	
Clomazona	81777-89-1	Cetona	239.7	100	

Nombre	CAS	Familia Química	Masa molecular ($g\text{mol}^{-1}$)	Concentración comercial (mgL^{-1})	Estructura
Dimetacloro	50563-36-5	Amida	255.74	Sólido	
Clorofos	52-68-6	Organofosforado	257.44	Sólido	
Clorpirifos	2921-88-2	Organofosforado	350.59	100	
Metil diclofop	51388-27-3	Éster	341.19	100	
Fenantreno-d10	1517-22-2	otros	188-29	100	

Una vez obtenidos los compuestos modelo se prepararon disoluciones patrón de cada uno para facilitar la realización de ensayos posteriores. Los compuestos en disolución ampolletada con una concentración equivalente a 100 mgL^{-1} se llevaron a un volumen final de 10 mL con diclorometano (grado HPLC), para obtener una concentración de final 10 mgL^{-1} para cada analito.

Por otro lado, se preparó una disolución que contenía dimetacloro y clorofos y cuya concentración final de ambos componentes fuese de 100 mgL^{-1} , para ello se pesaron 5 mg de cada analito y se llevaron a un volumen final de 50 mL con diclorometano (grado HPLC). Posteriormente se tomó una alícuota de 1 mL y se llevó a un volumen final de 10 mL con diclorometano (grado HPLC) para obtener una concentración final de 10 mgL^{-1} .

A partir de las disoluciones que contenían 10 mgL^{-1} de cada analito se prepararon 2 mezclas, cada una de ellas contenía 7 de los compuestos modelo a una concentración equivalente de 1 mgL^{-1} . Para ello se tomó 1 mL de cada disolución y se llevó al aforo con la cantidad suficiente de diclorometano para tener un volumen total de 10 mL de disolución. Posteriormente, se preparó un multiestándar de concentración equivalente a $500 \mu\text{gL}^{-1}$, para ello fue necesario tomar una alícuota de 5 mL de cada disolución de las mezclas previamente preparadas y llevarla a 10 mL con diclorometano (grado HPLC).

Finalmente se realizó una tercera mezcla con los 14 compuestos a una concentración de $500 \mu\text{gL}^{-1}$ tomando 5 mL de cada mezcla hasta 10 mL.

Una vez obtenida la mezcla de $500 \mu\text{gL}^{-1}$ con los 14 compuestos fue necesario identificar cada uno de los compuestos modelo a través de sus espectros de masas, así como de sus correspondientes tiempos de retención en el cromatograma. En secciones posteriores se presenta el cromatograma obtenido y las condiciones en que se realizó el análisis cromatográfico.

4.3.2 Procesamiento de muestras

Una vez en el laboratorio, a las muestras se les removió el material particulado suspendido mediante un sistema de filtración al vacío con un embudo buchner y un matraz Kitasato (filtros de $2.5 \mu\text{m}$ tamaño de poro). Este procedimiento se realizó para un volumen de 1 L de muestra (el cual fue medido con una probeta graduada de vidrio) y cada muestra se analizó por duplicado.

4.3.3 Extracción

Una vez filtrada la muestra de agua se procedió con la etapa de extracción. Después de varios ensayos previos, se optó por emplear la extracción en fase sólida (*Solid Phase Extraction*, SPE) y se decidió emplear cartuchos HLB Oasis® 6 cc (WATERS INSTRUMENT). Se seleccionaron estos cartuchos debido a su composición hidrofílica y lipofílica, ya que contiene una resina de un co-polímero de divinilbenceno y N-vinilpirrolidona. La vinilpirrolidona actúa como grupo hidrofílico por lo que este fragmento en la resina es afín a compuestos polares. Por otra parte, el divinilbenceno actúa como fase inversa. En la figura 5 se presentan las estructuras químicas de los compuestos empleados como fase adsorbente en el cartucho de SPE.

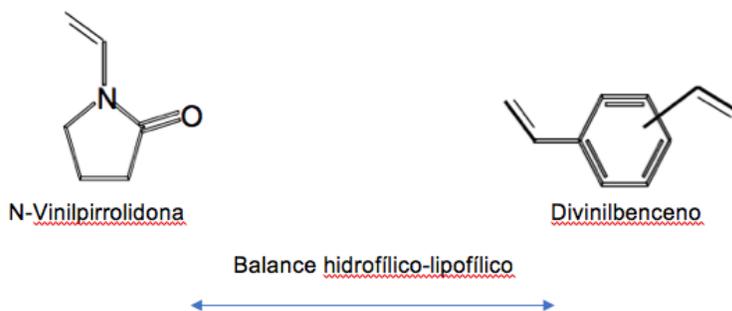


FIGURA 5. COMPOSICIÓN DEL COPOLÍMERO DEL CARTUCHO HLB OASIS

Los cartuchos se montaron en un sistema manifold para realizar inicialmente el acondicionamiento (Figura 6).

El acondicionamiento consiste en hacer pasar un volumen determinado de disolvente o mezcla de disolventes a través del cartucho con el objetivo de hidratar y activar al adsorbente para obtener una mejor extracción de los analitos.

El acondicionamiento se realizó mediante la adición de (5 mL x 2) de diclorometano (grado HPLC), seguido de (5 x 2 mL) de metanol (grado HPLC) y finalmente (5 mL x 2) de agua desionizada. Terminando la etapa de acondicionamiento de los cartuchos se prosiguió con la etapa de la carga de la muestra en el cartucho. En esta etapa es importante mencionar que el acondicionamiento no debe ser muy prolongado, debido a que la fase sólida puede secarse y consecuentemente agrietarse y perder la humectación, dificultando el paso de la muestra a través del cartucho. La carga de la muestra consiste en hacer pasar todo el volumen de muestra a través del cartucho desde las botellas mediante un sistema de mangueras y con ayuda de una bomba de vacío. Debido a que es complicado regular la presión de vacío, la manera para controlar la carga de la muestra es mediante el flujo de goteo de la muestra que pasa a través de la manguera hasta el lecho acuoso del cartucho; para poder regularlo se utiliza el sistema de llaves de entrada del sistema manifold. El flujo se mantiene a una velocidad aproximada de 10.3 mL/min.

Para favorecer una buena adsorción es necesario mantener bajo flujo constante el goteo de la muestra que pasa a través del cartucho, ya que un flujo irregular puede comprometer la integridad del material adsorbente dentro del cartucho. Si la presión de vacío es excesiva la superficie del material adsorbente puede agrietarse presentándose volumen de fuga y, por lo tanto, la pérdida de los analitos.

FIGURA 6. SISTEMA DE EXTRACCIÓN MANIFOLD EN FASE SÓLIDA DE LAS MUESTRAS DE AGUA.

Una vez que se terminó la carga de las muestras en los cartuchos de trabajo (figura 6), la elución de los analitos retenidos debe llevarse a cabo de manera inmediata, en su defecto, es necesario llevar a sequedad total el cartucho haciendo pasar aire a través del cartucho con ayuda de la bomba de vacío durante 20 min. Posteriormente se hace pasar un flujo de nitrógeno a través de los cartuchos por otros 20 minutos, lo cual permite remover trazas de húmedas retenidas en la fase sólida y desplaza el aire de manera que el adsorbente es saturado de una fase gaseosa inerte y que impide la degradación o hidrólisis de los analitos. Consecutivamente se realizó la elución de las muestras, mediante la adición de diclorometano (5 mL x 2) (grado HPLC), el flujo del goteo es a gravedad y a velocidad constante (figura 7).



FIGURA 7. ELUCIÓN Y COLECTA DE LOS EXTRACTOS.

El eluato fue colectado en un vial de vidrio ámbar de 12 mL y se trató con sulfato de sodio anhidro para remover la humedad presente. Posteriormente, la fase orgánica se transfirió

de manera cuantitativa a otro vial ámbar para evaporar el disolvente y llevar a sequedad total la mezcla bajo un flujo suave de nitrógeno gaseoso (figura 8).



FIGURA 8. SECADO DE LOS EXTRACTOS BAJO FLUJO DE NITRÓGENO

Finalmente, la muestra se reconstituyó con 1000 μL de diclorometano y ésta se analizó en el sistema CG-EM. Como ya se mencionó, todo el procedimiento se llevó a cabo por duplicado.

4.3.4 Cromatografía de gases acoplado a espectrometría de masas

Los análisis cromatográficos se llevaron a cabo utilizando un cromatógrafo de gases acoplado a un espectrómetro de masas de la marca Hewlett-Packard GCD Series II HP G1800C dentro de la Unidad de Análisis Ambiental de la Facultad de Ciencias.

Las condiciones cromatográficas iniciales con las que se llevaron a cabo los primeros ensayos son las siguientes (Tabla 4):

TABLA 4. CONDICIONES CROMATOGRÁFICAS INICIALES PARA EL ANÁLISIS CUALITATIVO (SCREENING)

Parámetro	Condición
Temperatura del inyector ($^{\circ}\text{C}$)	230
Columna	DB-5 ms (30.0 m, 0.25 mm, 0.25 μm)
Rampas de temperatura	Ramp1: velocidad 40 $^{\circ}\text{C}/\text{min}$, desde 60 hasta 170 $^{\circ}\text{C}$ durante 3.75 min. Ramp2: velocidad 10 $^{\circ}\text{C}/\text{min}$, hasta 295 $^{\circ}\text{C}$ durante 4 min.

Gas acarreador	helio
Flujo (mL/min)	1
Volumen de inyección (μL)	2
Temperatura del detector (° C)	300

En la Figura 9, se presenta el cromatograma obtenido al inyectar la mezcla de 14 compuestos modelo en una concentración de $500\mu\text{gL}^{-1}$ bajo las condiciones descritas en la Tabla 4. Se observa que los compuestos seleccionados eluían con tiempos de retención muy cercanos entre ellos. Por lo que no hubiera sido posible distinguir con claridad una asociación de cada analito con algún compuesto modelo en función de sus similitudes en el tiempo de retención y/o similitud fisicoquímica.

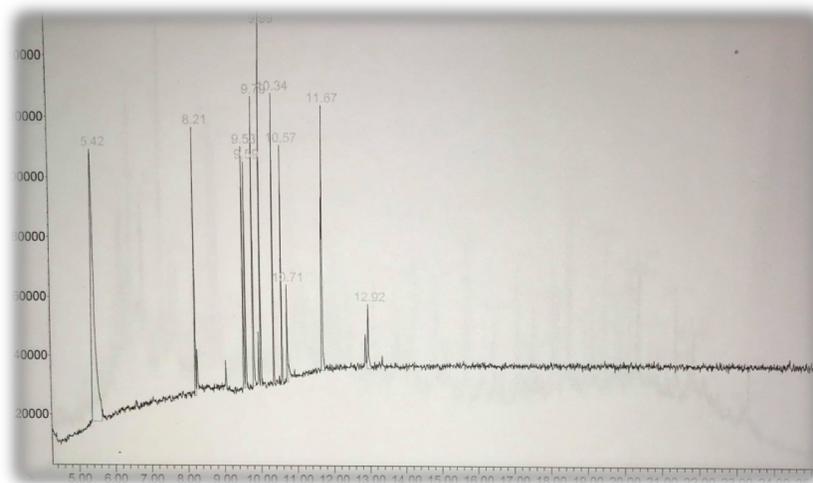


FIGURA 9. CROMATOGRAMA DE LA MEZCLA CON LOS 14 COMPUESTOS MODELO

Debido a eso, fue necesario cambiar las condiciones inicialmente propuestas de rampas de temperatura del horno y tiempo, por las descritas en la tabla 5.

TABLA 5. CONDICIONES CROMATOGRÁFICAS MODIFICADAS PARA EL ANÁLISIS CUALITATIVO (SCREENING).

Parámetro	Condición
Temperatura del inyector (°C)	270
Columna	DB-5 ms (30.0 m, 0.25 mm, 0.25 μm)

Parámetro	Condición
Rampas de temperatura	Ramp1: velocidad 25 ° C/min, desde 70 hasta 150 ° C. Ramp2: velocidad 13 ° C/min, hasta 200 ° C. Ramp3: velocidad 8 ° C/min, hasta 280 durante 15 min.
Gas acarreador	helio
Flujo (mL/min)	1
Volumen de inyección (µL)	2
Temperatura del detector (° C)	300

Los cromatogramas obtenidos bajo estas nuevas condiciones muestran una mayor distribución de las señales a lo largo del tiempo de Scan al hacer un barrido de todas las masas (Modos Scan). Asimismo, se facilita la identificación individual de cada compuesto modelo sin el traslapamiento de las mismas. Lo que permite cubrir ampliamente la ventana cromatográfica. (figura 10).

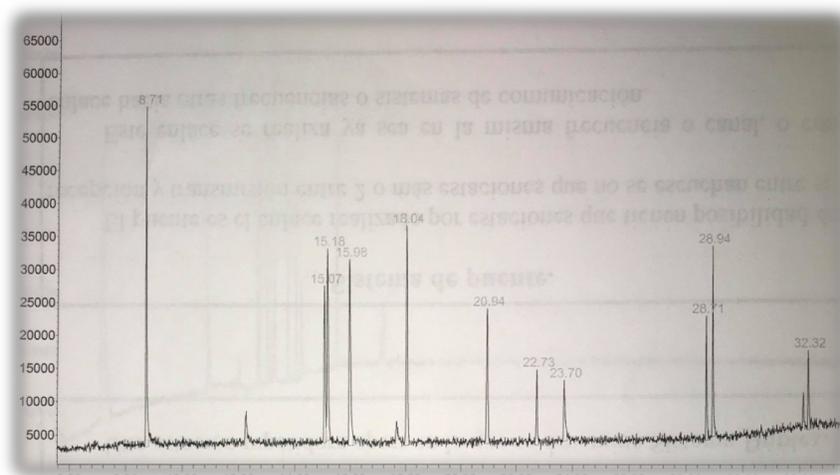


FIGURA 10. CROMATOGRAMA DE LA MEZCLA CON LOS 14 COMPUESTOS MODELO CON LAS NUEVAS CONDICIONES DE RAMPEO

Posteriormente se realizó la identificación de cada compuesto modelo, así como de su tiempo de retención comparando el espectro de masas obtenido experimentalmente con el espectro reportado por el NIST auxiliándonos de la librería NIST MS *search* 2.0. En la Tabla 6 se presentan los tiempos de retención y los iones considerados para cada compuesto.

TABLA 6. TIEMPOS DE RETENCIÓN DE LOS COMPUESTOS MODELO Y SUS CORRESPONDIENTES IONES CARACTERÍSTICOS.

Estándar	Tiempo de retención (t_R)	Masa molecular (g/mol)	Iones característicos
<i>Butilato</i>	8.71	217.37	217, 203, 188, 203, 174, 156, 146, 57
<i>Fluometuron</i>	12.25	232.20	232, 213, 187, 168, 145, 72
<i>Atrazina</i>	15.07	215.68	215, 200, 187, 173
<i>Clomazona</i>	15.18	239.69	239, 204, 188, 174, 138, 125
<i>Fenantreno d-10</i>	15.98	188.29	188, 170, 160, 146, 132, 94, 80
<i>Etiofencarb</i>	17.67	225.31	225, 168, 150, 139, 107
<i>Dimetacloro</i>	18.04	255.74	255, 240, 224, 210, 197, 148, 134
<i>Clorpirifos</i>	20.94	350.58	351, 314, 286, 276, 258, 244, 208, 197, 97
<i>Pendimetalina</i>	22.73	281.30	281, 263, 252, 236, 220, 208, 191
<i>Triadimenol</i>	23.70	295.76	295, 280, 238, 168, 128, 112, 99
<i>Metil diclofop</i>	28.71	341.18	340, 281, 253, 218, 202, 184, 162
<i>Butóxido de piperonilo</i>	28.94	338.43	338, 295, 193, 176
<i>Permetrina</i>	32.32	391.28	390, 375, 311, 255, 183
<i>clorofos</i>	n.d	257.43	n.d

El compuesto modelo *clorofos* no pudo ser detectado en la mezcla, por lo que se preparó una solución individual de dicho compuesto para poder identificarlo y caracterizarlo. Sin embargo, en el cromatograma no se observó ninguna señal que pudiera asociarse a la presencia del *clorofos*. Esto puede deberse a que presenta interacciones muy polares y, por lo tanto, no fue posible volatilizarlo en el inyector del cromatógrafo para poder ser detectado, por lo que se descartó su uso en los análisis posteriores.

4.3.5 Evaluación cualitativa (*Screening*)

Esta etapa consiste en la identificación de los compuestos que se encuentran presentes en la muestra de agua. El siguiente esquema muestra las etapas empleadas para poder llevar a cabo esta identificación.



Esquema 2. Etapas de la evaluación cualitativa

Análisis CG-EM en modo SCAN

La etapa inicial consiste en la obtención de los archivos TIC (Total Ion Chromatogram) de cada muestra inyectada. Estos cromatogramas “crudos” son exportados para posteriormente ser procesados mediante el uso de otras herramientas de software.

Traducción

Los archivos exportados son procesados con el software *MSD Chemstation*, con la finalidad de “traducirlos” y ser sometidos a la deconvolución.

Deconvolución

Una vez traducidos los archivos, se aplica la deconvolución para cada archivo TIC mediante el software *Unknown analysis* bajo los criterios:

- Match score ≥ 70
- Peak-shaped function: gaussiana
- Ancho del pico: 0.1 min
- Relación señal-ruido 1:3

Finalmente se genera un reporte de deconvolución con el nombre de los compuestos identificados, el número de CAS, su área y el factor de coincidencia (*Match score*) de cada cromatograma (Figura 11).

Component RT	Compound Name	CAS#	Formula	Area	Match Score
5.5709	Cyclopentasiloxane, decamethyl-	541-02-6	C10H30O5Si5	8805	69.4
6.2890	Sulfurous acid, dimethyl ester	616-42-2	C2H6O3S	7754	69.0
6.3730	Glutaric acid, 3-methylbut-2-yl pent-4-en-2-yl ester	1000404-97-5	C15H26O4	7807	60.4
6.7124	4-Pyrrolidin-1-ylmethyl-thiazol-2-ylamine	1000300-56-5	C8H13N3S	8227	68.2
6.9862	Cyclohexasiloxane, dodecamethyl-	540-97-6	C12H36O6Si6	5307	71.2
7.1651	Formamide, N,N-dibutyl-	761-65-9	C9H19NO	24515	71.4
7.3459	1,3-Cyclohexanediamine	3385-21-5	C6H14N2	48972	60.1
7.4397	Benzene, 1-fluoro-2-methoxy-	321-28-8	C7H7FO	45879	62.8
7.7146	Hydantoin, 1-butyl-	33599-32-5	C7H12N2O2	6244	73.3
7.8077	4-Chlorobutanoic anhydride	1000333-91-1	C8H12Cl2O3	8820	78.8
7.8427	2-Heptene, 5-ethyl-2,4-dimethyl-	74421-06-0	C11H22	70542	70.2
8.0040	Dimannonic acid, 2-methyl-, butyl ester	97-87-0	C8H16O7	12869	72.8

FIGURA 11. INFORMACIÓN OBTENIDA A TRAVÉS DEL REPORTE DE DECONVOLUCIÓN.

En la Figura 12 se observa el perfil de un cromatograma que fue procesado por medio de la deconvolución, el perfil de color negro, corresponde al cromatograma “crudo” y una vez deconvolucionado se genera el nuevo perfil del cromatograma (color verde).

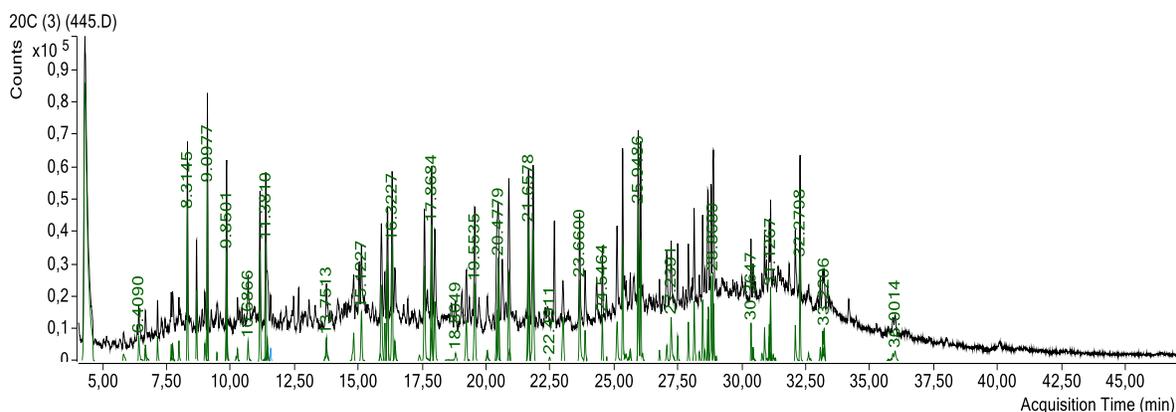


FIGURA 12. CROMATOGRAMA DECONVOLUCIONADO PROVENIENTE DEL SITIO PUENTE DE URRUTIA, XOCHIMILCO.

4.3.6 Semicuantificación

Una vez identificados los compuestos orgánicos, se procedió a realizar la semicuantificación mediante la comparación estructural entre la sustancia identificada y uno de los 13 compuestos modelo descritos anteriormente.

Una vez establecida la relación estructural se obtiene el valor de concentración relativa mediante la siguiente relación matemática:

$$[CCO] = \left([STD] \times \frac{CCOpa}{STDpa} \right) \times \frac{1}{1000}$$

Dónde:

[CCO]: Concentración del compuesto orgánico $\mu\text{g L}^{-1}$

[STD]: Concentración del estándar o compuesto modelo $\mu\text{g L}^{-1}$

CCOpa: Área del compuesto orgánico

STDpa: Área del estándar o compuesto modelo

Posteriormente, los archivos fueron exportados y procesados con el software *MSD chemstation*, con la finalidad de “traducir” y ser procesados posteriormente con el software *Unknown analysis* el cual nos permite aplicar la técnica de deconvolución a cada cromatograma generado.

La evaluación cualitativa o *screening* se basa en la identificación de las sustancias observadas en un cromatograma obtenido previamente en modo Scan mediante la comparación del espectro de masas.

4.3.7 Análisis Ecotoxicológico

Una vez identificados los compuestos y generados los datos de concentración, se obtuvieron los valores de LC_{50} para *Daphnia magna*, $\log K_{ow}$ y la solubilidad en agua de cada compuesto mediante el uso del software ECOSAR.

Asimismo, se calculó la unidad tóxica individual (UT_{ind}) de cada contaminante semicuantificado mediante la siguiente fórmula:

$$UT_{ind} = \frac{\text{Concentración contaminante (ppm)}}{LC50}$$

Posteriormente, se obtiene un valor de Unidad Tóxica total (UT_{total}) de la mezcla de contaminantes por sitio:

$$UT_{total} = \sum_{i=1}^n UT_{ind.}$$

El criterio utilizado para establecer la Toxicidad de un sitio en función del cálculo de la Unidad Tóxica total (UT_{total}) se muestra a continuación (Bulich, 1982):

<i>Toxicidad</i>	<i>Valor de Unidad Tóxica UT</i>
<i>Nula o baja</i>	< 1
<i>Tóxico</i>	1 - 10
<i>Muy tóxico</i>	11 - 100
<i>Extremadamente tóxico</i>	> 100

5. RESULTADOS Y ANÁLISIS

Se midieron los parámetros fisicoquímicos en una sola determinación de cada sitio y de manera *in situ*, en la tabla 7 se observan los valores registrados por sitio:

TABLA 7. DATOS DE LOS PARÁMETROS FISICOQUÍMICOS DE CADA SITIO.

Sitio	pH	Temperatura (°C)	Conductividad (μS/cm)	OD (mg L ⁻¹)	% O ₂	TDS (mg L ⁻¹)	Salinidad (UPS)	Profundidad (cm)	Transparencia (cm)
Fábrica	7.82	20.09	741-671	0.62	7.00	370	0.36	30	20
Tecaltitla	7.35	19.22	1047-952	0.07	0.60	565	0.56	88	67
Coapatitla	7.96	17.55	925-798	0.06	0.60	461	0.46	24	5
El bordo	7.51	16.40	1260-1065	0.00	1.00	673	0.69	200	30
Potrero	7.30	16.64	2010-1705	0.15	1.50	1002	1	200	30
San Sebastián	7.12	14.90	2230-1179	0.22	2	1086	1.11	170	23
Tiilac	7.37	16.24	1035-859	0	0	518	0.52	90	60
La Espejera	7.37	17.42	1129-1320	0.00	0.00	663	0.66	150	40
Puente de Urrutia	8.0	20.21	946-860	1.24	13.00	473	0.47	210	35

Una vez generado el *Screening*, y mediante la deconvolución de los cromatogramas, se generó un reporte en donde un total de 190 compuestos orgánicos diferentes fueron identificados en los nueve sitios muestreados. Es importante aclarar que fue mayor el número de compuestos identificados en el *Screening*; sin embargo, al momento de generar el reporte de la deconvolución se redujo el número de contaminantes identificados bajo el criterio del valor de Match Score (≥ 70). Para analizar cada sitio, nos enfocamos en aquellos contaminantes que se encontraban en mayor proporción. Se observa que las proporciones de áreas de los compuestos identificados en los nueve sitios es aproximadamente 3 %, por lo que se sólo se considerará a los compuestos que presenten una proporción ≥ 5 %.

En la Tabla 8 se observa el número de contaminantes identificados por sitio.

TABLA 8. NÚMERO DE CONTAMINANTES IDENTIFICADOS POR SITIO

Sitio	Tipo de impacto	Número de contaminantes
Tecaltitla	Agrícola	32

Sitio	Tipo de impacto	Número de contaminantes
Puente de Urrutia	Zona de descarga de aguas tratadas	30
Tlilac	Agrícola	22
Potrero	Agrícola	40
Fábrica	Urbano	59
La Espejera	Agrícola	36
Coapatitla	Urbano	46
Bordo	Zona ejidal distanciada de la zona urbana	41
San Sebastián	Zona ejidal distanciada de la zona urbana	23

Los sitios de Fábrica y Coapatitla, que son sitios con impacto urbano y El Bordo que es zona ejidal abandonada, fueron las zonas en donde se identificaron la mayor cantidad de sustancias (59, 46 y 41 respectivamente). Mientras que en Tlilac y en San Sebastián se identificaron 22 sustancias en cada uno, ambos sitios presentan la menor cantidad de compuestos identificados.

Una vez identificados los compuestos, es importante conocer su uso o aplicación con la intención de identificar su origen. Para lo cual se consideró la siguiente clasificación:

- Doméstico/urbano: sustancias como cosméticos, fármacos, productos de cuidado personal (PCP), cosméticos, alimentarios.
- Industrial: petroquímica, farmacéutica, química, disolventes, plastificantes, retardantes de flama.
- Agroquímicos: plaguicidas, herbicidas, fungicidas.
- Degradación: subproductos de plaguicidas, detergentes, nicotina. PCPs, plásticos, excreción, etc.
- Otros: desconocidos, metabolitos de origen vegetal.

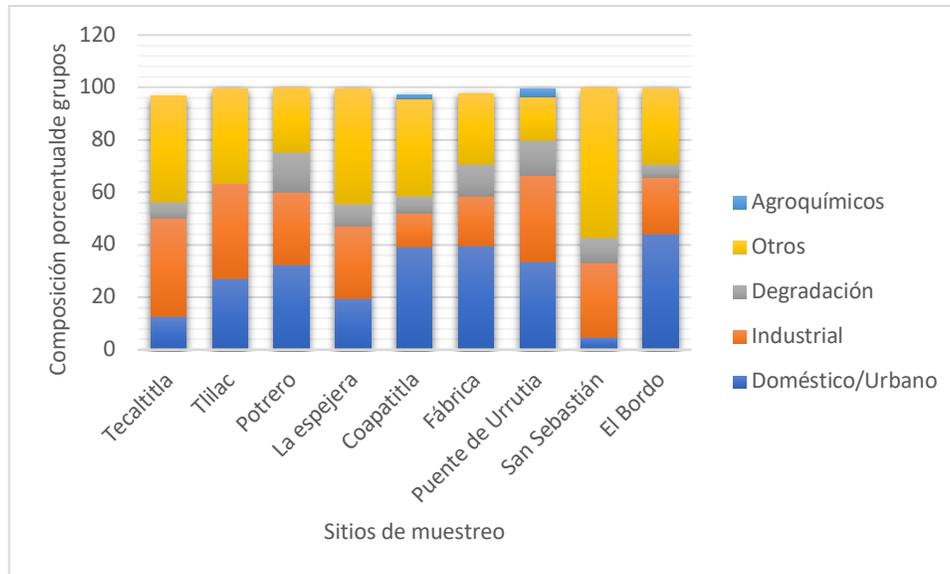


FIGURA 13. GRÁFICA DE BARRAS AGRUPADAS RESPECTO A LA COMPOSICIÓN DE LOS GRUPOS QUÍMICOS DE CONTAMINANTES POR SITIO.

De manera breve se puede observar en la Gráfica de la figura 13, la contribución de cada grupo por sitio. El grupo de sustancias de uso industrial se observa como mayor componente en sitios como Tlilac y Puente de Urrutia, los de uso doméstico/urbano representan una mayor fracción en los sitios de Fábrica, Coapatitla y El Bordo, mientras que en Tecalitla, la mayor contribución corresponde al grupo de productos de degradación, en los sitios de la Espejera y San Sebastián el mayor componente corresponde al grupo de “otros” y finalmente el grupo de agroquímicos representa la menor contribución en los sitios de Potrero, San Sebastián, Tlilac, Tecalitla, Fábrica, Coapatitla, El bordo y Puente de Urrutia.

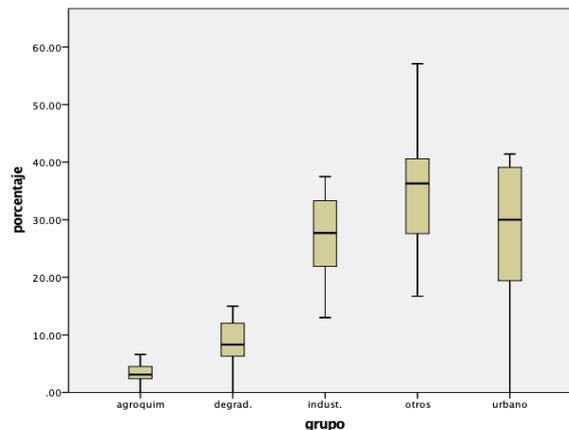


FIGURA 14. GRÁFICA DE CAJA Y BIGOTES ACERCA DE LA VARIABILIDAD DE LOS GRUPOS QUÍMICOS EN FUNCIÓN DE SU CLASIFICACIÓN

En la Gráfica de la figura 14 se observa y se explica la variabilidad en la composición porcentual de cada grupo, así como su distribución. En los cinco grupos se observa una distribución asimétrica, dos de los cinco grupos (uso industrial y doméstico/urbano) poseen un sesgo negativo debido al alargamiento de la cola inferior de la curva. En el caso particular de los compuestos de uso doméstico/urbano los valores se concentran entre 20 % y 40 %. En ambos grupos el 50 % de la distribución se muestra simétrico entorno a las medianas. El grupo "otros" la distribución se encuentra ligeramente desplazada hacia abajo con un sesgo positivo y una mayor variabilidad entre el tercer cuartil y el límite interior del bigote. Asimismo, en la caja se observa que el 25 % de los valores están más concentrados entre 35 % y 40 % correspondiente a la composición porcentual de los grupos de contaminantes en las muestras mientras que hay una mayor dispersión entre el primer y segundo cuartil. Los datos del grupo de "productos de degradación" se encuentran desplazados ligeramente hacia la cola superior de la distribución y el 25 % de los datos de composición porcentual se encuentran más "próximos" entre el primer y segundo cuartil, es decir, el 25 % de los datos se encuentran concentrados entre 6 % y 8 %, además se observan más dispersos entre el segundo y tercer cuartil. Finalmente, los datos de composición porcentual en el grupo de agroquímicos además de ser los más bajos, fueron los que mostraron la menor dispersión en su distribución, dicha distribución fue entre cero y 6.7 %, en la caja se observa comportamiento similar que en el grupo de productos de degradación, es decir, la cercanía o proximidad entre los datos de composición porcentual es mayor entre el primer y segundo cuartil en comparación del intervalo comprendido entre el segundo y tercer cuartil, en este caso el 25 % de los datos se encuentran concentrados en el intervalo de 3 % a 4 % de la composición porcentual.

Tecaltitla

En el sitio de Tecaltitla se identificaron 32 sustancias de las cuales alrededor del 40.6 % fueron reconocidas como sustancias de producto de degradación que provienen principalmente de la degradación de materia vegetal. La fracción de sustancias de uso industrial representa un 37.5 %; mientras que el grupo de sustancias de uso doméstico/urbano representan un 15.6 %. La contribución más baja corresponde al grupo de productos de degradación donde se identificó solo un compuesto y éste representa sólo el 6.2 % (figura 15).

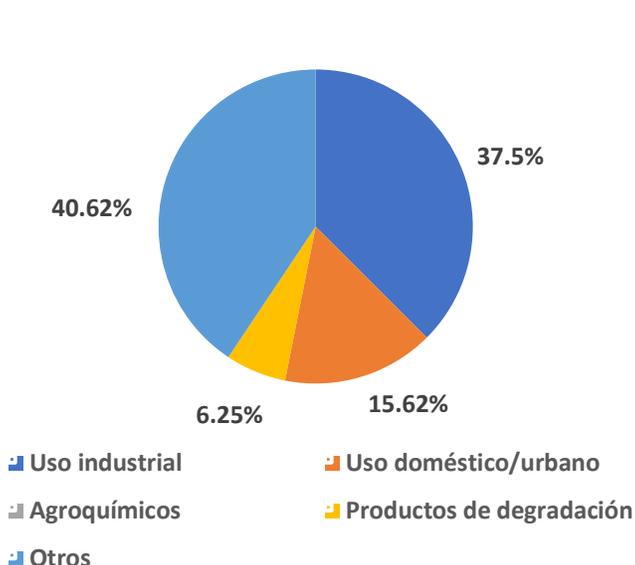


FIGURA 15. PROPORCIÓN DE CONTAMINANTES ORGÁNICOS DE UN SITIO CON IMPACTO AGRÍCOLA (TECALTITLA)

En la tabla de contaminantes identificados en el sitio de Tecaltitla (Ver Anexo I) se observan los compuestos identificados, así como los valores de la semi-cuantificación de cada uno de ellos, obtenidos mediante la normalización del área obtenida en el respectivo pico presente en el cromatograma. La mayoría de los compuestos poseen valores de % área que van de 0.3 hasta 6 %. Se observa esta uniformidad en el cromatograma (Figura 16) donde se muestra a la mayoría de los picos con una altura comparable entre ellos. Sin embargo, resaltan dos señales que representan el 31.2 % y el 12.8 %, siendo ambos compuestos los que mayor proporción presentan y que corresponden al 1,2-bencendicarboxilato de bis(2-metilpropilo) y el ftalato de dibutilo. Ambos compuestos son plastificantes con una concentración estimada de $5.01 \mu\text{gL}^{-1}$ y $2.06 \mu\text{gL}^{-1}$ respectivamente, seguidos del hexadecano con una concentración aproximada de $0.97 \mu\text{gL}^{-1}$, el 1,3-dimetil-

5,7-di-n-propiladamantano con una concentración de $0.51 \mu\text{gL}^{-1}$ y el oxalato de alil octadecilo con una concentración de $1.32 \mu\text{gL}^{-1}$. La concentración estimada de 1,2-bencendicarboxilato de bis(2-metilpropilo) o DiBP se encuentra en valores similares a los reportados por Wang y colaboradores (2003), quienes detectan la presencia de DiBP en muestras de agua provenientes del lago Taihu en un intervalo de concentraciones de 0.598 a $7.85 \mu\text{gL}^{-1}$ con una fuerte influencia de industrialización de la región en las últimas décadas. Por otro lado, el mismo plastificante fue detectado en el embalse de Mopanshan, China, actual fuente de abastecimiento de agua potable de la ciudad de Harbin, en un intervalo de concentraciones de 40 - 658.8 ngL^{-1} (Liu, 2013).

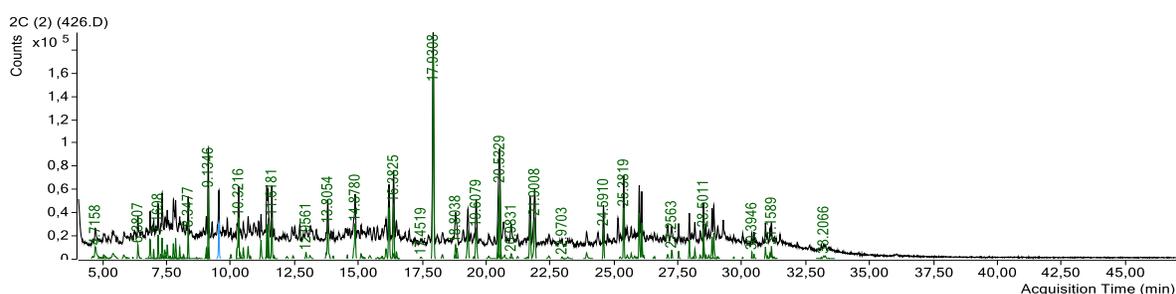


FIGURA 16. CROMATOGRAMA EN MODO SCAN DE UNA MUESTRA PROVENIENTE DEL SITIO DE TECALITLA

La concentración estimada del dibutil ftalato (DBP) es similar a las concentraciones medidas en el mismo estudio de Mopanshan (Liu, 2013) que varían entre 52.5 a 4498.2 ngL^{-1} . De la misma manera, se realizó otro estudio similar en el río Tanshui, Taiwan para detectar la presencia de plastificantes en agua y sedimentos donde se detectó DBP en concentraciones que varían desde 1 a $13.5 \mu\text{gL}^{-1}$ (Yuan, 2002).

Ambos plastificantes, como con muchos de sus homólogos químicos (ftalatos) se han relacionado con diversas alteraciones metabólicas tanto en organismos acuáticos como en seres humanos, debido a su potencial como disruptor endócrino. Asimismo, están asociados a procesos de mutagenicidad, teratogenicidad y carcinogenicidad incluso en bajas concentraciones. Es importante mencionar que este tipo de sustancias son ampliamente utilizadas en diversos procesos industriales como plastificantes, aditivos en resinas, cosméticos, materiales a base de PVC, repelentes de insectos, propelentes, etc. (Wang, 2003) (Yuan, 2002).

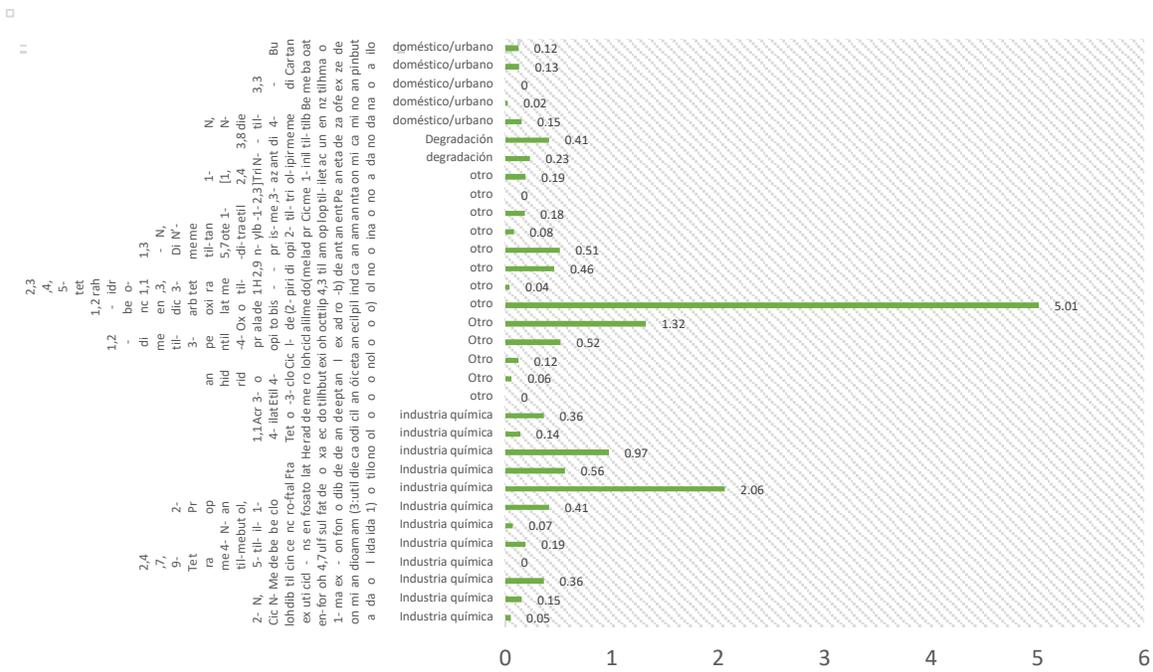


FIGURA 17. GRÁFICO DE BARRAS DE CONCENTRACIÓN DE CONTAMINANTES (µG L⁻¹) IDENTIFICADOS EN TECALTITLA AGRUPADOS DE ACUERDO CON SU CLASIFICACIÓN.

Se observa en la figura 17 las concentraciones de los contaminantes identificados agrupados en la clasificación utilizada. Se observa que en el sitio de Tecaltitla los que presentan una concentración menor son los compuestos clasificados como doméstico/urbano y los compuestos agrupados como productos de degradación. Por otro lado, los compuestos de mayor concentración son los clasificados como “otros”. Dicho grupo es también el más abundante en el sitio de Tecaltitla, esto se debe a su cercanía a la zona agrícola y la degradación de la materia vegetal de la zona, así como la liberación de los metabolitos vegetales. Asimismo, se observa que en este grupo es mayor el número de compuestos identificados a diferencia de los compuestos del resto de los grupos exceptuando el grupo de uso industrial, que presenta un número de contaminantes similar. Es importante mencionar que los contaminantes del grupo de uso industrial representan el 37.5%, siendo solo superada su proporción por el grupo de “otros”.

De los cuatro contaminantes que presentan una mayor proporción de su área, tres de ellos (el 1,2-Bencendicarboxilato de bis(2-metilpropilo), el ftalato de dibutilo y el oxalato de alil octadecilo) poseen valores de unidad tóxica (UT) menores a 1. De acuerdo con el criterio de toxicidad utilizado (Bulich, 1982), valores de UT menores a 1 responden a una toxicidad baja o nula. Sólo el hexadecano posee un valor de UT mayor a 1 (1.91), recordando que contaminantes con valores de UT entre 1-10, son considerados como tóxicos. La suma de

UT total que corresponde a la mezcla de todos los contaminantes identificados y semi cuantificados es de 3.0098, por lo que, de acuerdo con la misma escala, la mezcla de contaminantes identificados y presentes en el sitio puede considerarse como tóxica (Ver Anexo I).

Tlilac

En el sitio de Tlilac se identificaron 22 sustancias. Las sustancias de uso industrial representan un 31.8 %, por otra parte, el grupo de “otros” representan un 31.8 % los cuales se componen de metabolitos de origen vegetal y de uso desconocido, asimismo el grupo de sustancias de origen doméstico/urbano representan un 31.8 % y finalmente los productos de degradación con un 4.5% (figura 18).

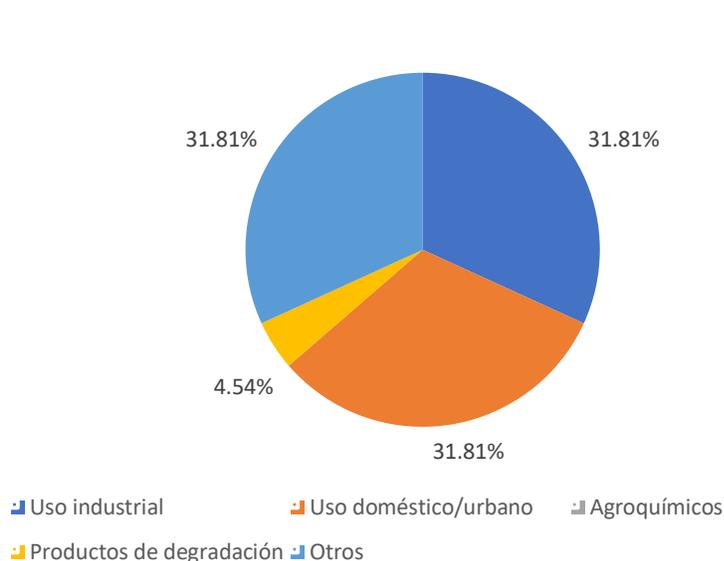


FIGURA 18. PROPORCIÓN DE CONTAMINANTES ORGÁNICOS DE UN SITIO CON IMPACTO AGRÍCOLA (TLILAC) EN XOCHIMILCO.

En el sitio de Tlilac, seis contaminantes poseen un % de área mayor al 5 %. Se observa un patrón similar en la proporción del área al observado en el sitio de Tecaltitla, seis compuestos presentan una proporción mayor al 5 %, sin embargo, se observan dos señales que resaltan por encima del promedio de las señales en el cromatograma (Figura 19) estas dos señales se ubican en los tiempos de retención de 9.11 y 11.17 min.

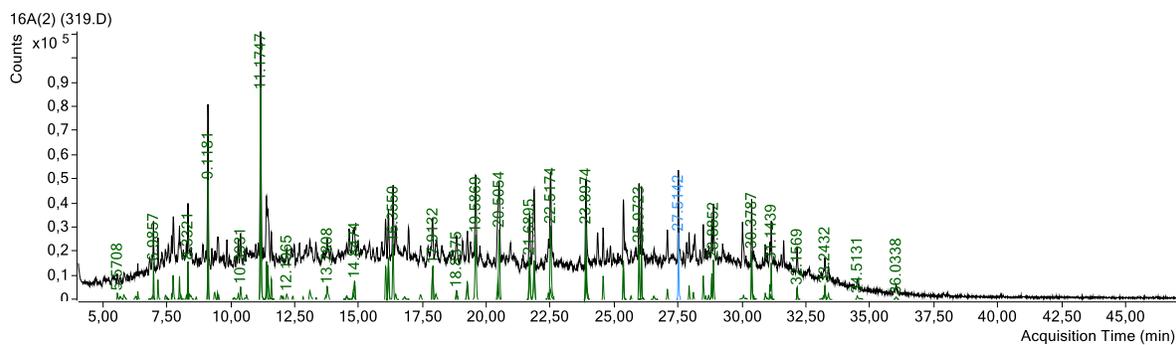


FIGURA 19. CROMATOGRAMA EN MODO SCAN DE UNA MUESTRA PROVENIENTE DEL SITIO DE TLILAC.

Estas dos señales corresponden al 2,6-bis(1,1-dimetiletil)-4-hidroxi-4-metil-2,5-ciclohexadien-1-ona y al N,N-dietil-4-metilbenzamida, respectivamente. Ambas sustancias fueron identificadas como un metabolito subproducto de plásticos y un isómero presente en el insecticida DEET, respectivamente. Ambos compuestos están presentes en concentraciones aproximadas de $0.59 \mu\text{gL}^{-1}$ y $0.57 \mu\text{gL}^{-1}$ cada uno. El resto de los compuestos con mayor proporción son el oxalato de alil pentadecilo con una concentración aproximada de $0.59 \mu\text{gL}^{-1}$, la oxibenzona con una concentración de $0.35 \mu\text{g L}^{-1}$, el ciclotetradecano con una concentración de $0.33 \mu\text{gL}^{-1}$ y el acrilato de dodecilo a una concentración de $0.38 \mu\text{gL}^{-1}$ (Ver Anexo I).

Estudios recientes realizados indicaron la presencia de N,N-dietil-4-metilbenzamida (p-DEET) en aguas residuales provenientes de la planta de tratamiento de Bekkelaget, en la ciudad de Oslo, Noruega, en un intervalo de concentraciones de 169 a 257 ngL^{-1} (Krzeminski, 2017). Siendo mayor la concentración estimada en el sitio de Tlilac, aunque similar en orden de magnitud. Asimismo la oxibenzona, sustancia que ha sido evaluada e identificada como responsable de alteraciones endócrinas en diversas especies acuáticas (Coronado, 2008), ha sido reportada en algunos estudios como el realizado en las aguas residuales provenientes de los efluentes de la planta de tratamiento de Salt River, Arizona, en concentraciones de 20 ngL^{-1} a $1 \mu\text{gL}^{-1}$ (Chiu, 2010), encontrándose un valor intermedio de la concentración estimada en el sitio de Tlilac. Por otro lado, la concentración estimada de ciclotetradecano ($0.33 \mu\text{gL}^{-1}$) es menor a la reportada por Eriksson (2003), donde detectó este compuesto a una concentración de $4.8 \mu\text{gL}^{-1}$ en aguas residuales urbanas.

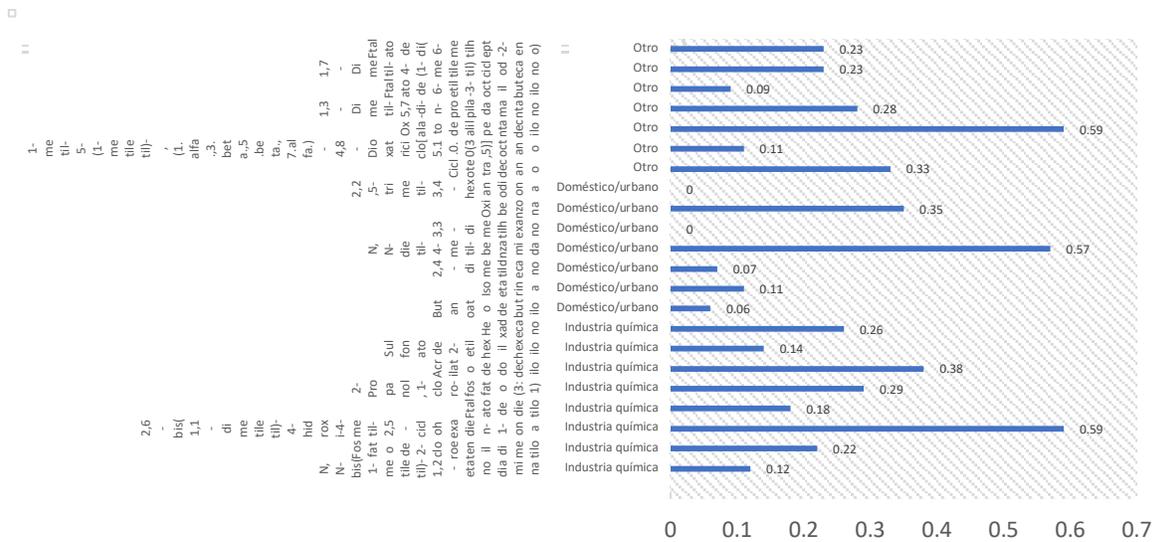


FIGURA 20. GRÁFICA DE BARRAS DE CONCENTRACIÓN DE CONTAMINANTES ($\mu\text{g L}^{-1}$) IDENTIFICADOS EN TLIAC AGRUPADOS DE ACUERDO CON SU CLASIFICACIÓN.

Se observa en la figura 20 las concentraciones de los contaminantes identificados. En Tlilac se observa que las concentraciones de los diferentes compuestos en cada grupo son varían entre si, asimismo los compuestos de mayor concentración son los pertenecientes al grupo de uso industrial y doméstico/urbano. La mayoría de los contaminantes del grupo “otros” se observan en concentraciones similares, exceptuando el oxalato de alil pentadecilo, cuya concentración es de las más elevadas en la muestra. El grupo de compuestos “otros” es el de mayor composición en la muestra, seguido de los compuestos de uso industrial y los compuestos de uso doméstico/urbano. Esto se debe a la cercanía con sitios de producción agrícola en donde se lleva a cabo la degradación de la materia vegetal. Asimismo, la presencia de los compuestos de uso industrial se debe, no solo a la cercanía a la zona urbana y sitios de descarga, sino también al uso de sustancias para el recubrimiento de superficies, plastificantes presentes en envases u otros polímeros y deposición atmosférica.

Los seis contaminantes que presentan los mayores porcentajes de área poseen valores de UT muy bajos y todos menores a uno, que de acuerdo con la escala de toxicidad utilizada (Bulich, 1982) al ser menores a uno, son considerados de nula o baja toxicidad. Sin embargo, la suma total UT que corresponde a la mezcla es 0.92, que, aunque es considerada de baja o nula toxicidad está muy cercano al valor de uno, por lo que la toxicidad de la mezcla es muy cercana a considerarse como tóxica (Ver Anexo I).

Potrero

En Potrero se identificaron 40 sustancias orgánicas presentes en el agua. Además, se puede observar que el aporte mayoritario corresponde al tipo doméstico/urbano con un 32.5 %. El segundo aporte corresponde a sustancias de uso industrial con un 27.5 %, el tercer aporte corresponde al grupo definido como “otros”, representa un 25 % y está asociado a compuestos de uso desconocido y metabolitos de origen vegetal. Los productos de degradación abarcan un 15 % (figura 21).

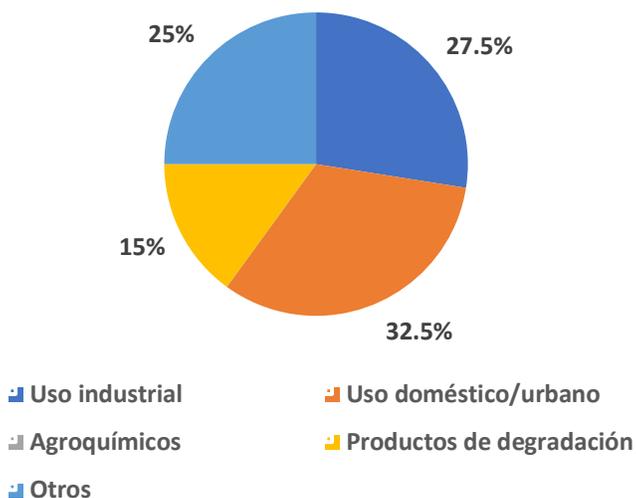


FIGURA 21. PROPORCIÓN DE CONTAMINANTES ORGÁNICOS DE UN SITIO CON IMPACTO AGRÍCOLA (POTRERO).

En el sitio conocido como Potrero, como se observa en la Figura 22, cuatro de los contaminantes encontrados poseen un porcentaje de área mayor a 5 %. Estos compuestos son: el 2,6-bis(1,1-dimetiletil)-4-hydroxi-4-metil 2,5-ciclohexadien-1-ona ($1.33 \mu\text{gL}^{-1}$), el 1,2-bencendicarboxilato de bis(2-metilpropilo) ($7.56 \mu\text{gL}^{-1}$), el ftalato de butilo ($2.75 \mu\text{gL}^{-1}$) y el 3,6,9,12-Tetraoxahexadecan-1-ol ($2.95 \mu\text{gL}^{-1}$).

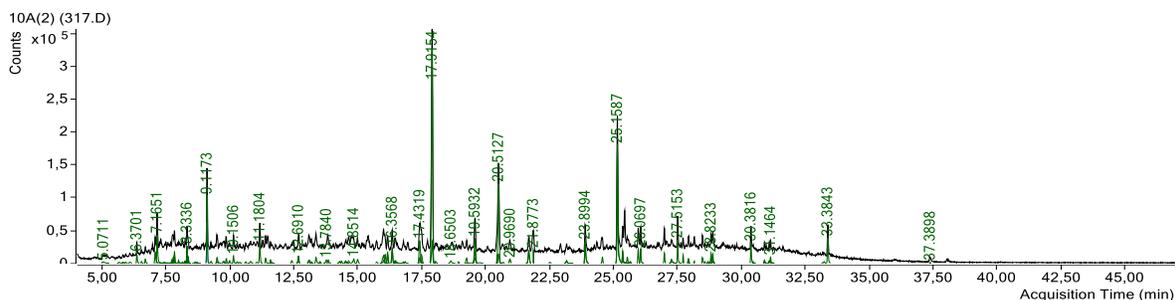


FIGURA 22. CROMATOGRAMA EN MODO SCAN DE UNA MUESTRA PROVENIENTE DEL SITIO DE POTRERO.

La presencia del 1,2-bencendicarboxilato de bis(2-metilpropilo) o DiBP y del ftalato de dibutilo, permiten hacer la comparación realizada para el sitio Tecaltitla y lo reportado por Wang (2003) para los valores de concentración de BiDP, ya que se observa que el valor de concentración estimado para este compuesto en el sitio Potrero ($7.56 \mu\text{gL}^{-1}$) se encuentra comprendido dentro del intervalo de concentraciones reportado para las muestras de agua provenientes del lago Taihu. Asimismo, la concentración estimada del dibutil ftalato (DBP) en el sitio de Potrero ($2.75 \mu\text{gL}^{-1}$) se encuentra dentro del intervalo de concentraciones determinado para el embalse de Mopanshan (Liu, 2013) y que varía desde 52.5 a 4498.2 ngL^{-1} . También se observa que la concentración de DBP encontrada en este sitio de estudio cae dentro del intervalo de concentraciones reportado por Yuan (2002) para muestras de agua del río Tanshui, en Taiwan en cual se encuentra comprendido entre 1 a $13.5 \mu\text{gL}^{-1}$ (Ver Anexo I).

Se observa en la figura 23 las concentraciones de los contaminantes. En el sitio de Potrero se aprecia que los grupos clasificados como: doméstico/urbano, de degradación y “otros” presentan los valores de concentración más bajos a pesar de que los compuestos de uso doméstico/urbano son el grupo más grande en este sitio. Seguido del grupo de “otros”, mientras que los compuestos de uso industrial, el cual representa el segundo grupo más grande solamente superado por el grupo de compuestos de uso doméstico/urbano, presentan los valores de concentración más elevados en la muestra. Por la cercanía a los sitios de descarga, así como también de la mancha urbana es que es mayor la proporción de compuestos de uso industrial y doméstico/urbano en este sitio.

La Espejera

En el sitio de La Espejera fueron identificados 36 compuestos, de los cuales el 44.4 % corresponden a compuestos de uso desconocido y compuestos identificados como metabolitos vegetales. Los compuestos de uso industrial representan el 27.7 %, mientras que los compuestos de uso doméstico/urbano representan un 19.4 %, finalmente el grupo de productos de degradación representan el 8.3 % (figura 24).

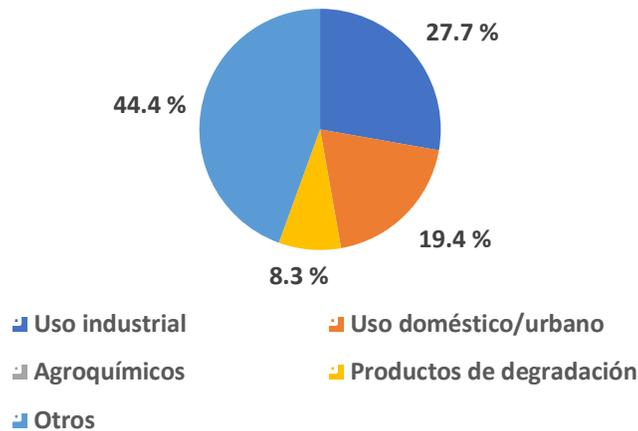


FIGURA 24. PROPORCIÓN DE CONTAMINANTES ORGÁNICOS DE UN SITIO CON IMPACTO AGRÍCOLA (LA ESPEJERA), XOCHIMILCO.

Como se observa en la Figura 25, seis de los contaminantes encontrados poseen un porcentaje de área mayor a 5 %. Los compuestos de mayor proporción identificados en Potrero son: el 2-oxabicyclo [2.2.2] octan-6-ol, 1,3,3-trimetil-, acetato ($0.77 \mu\text{gL}^{-1}$), la 2,6-bis(1,1-dimetiletil)-4-hidroxi-4-metil-2,5-ciclohexadien-1-ona ($1.04 \mu\text{gL}^{-1}$), la dietil toluamida ($0.52 \mu\text{gL}^{-1}$), el ftalato de dietilo ($0.48 \mu\text{gL}^{-1}$) y el (E,E,E)-3,7,11,15-tetrametilhexadeca-1,3,6,10,14-penteno, sin embargo este último compuesto no pudo ser semicuantificado.

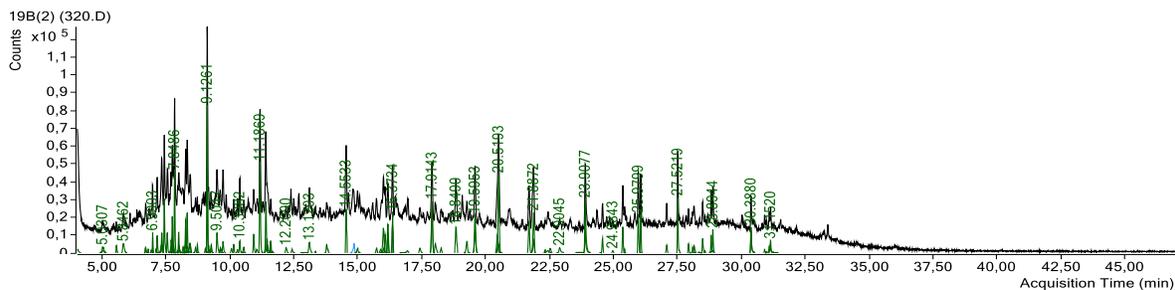


FIGURA 25. CROMATOGRAMA EN MODO SCAN DE UNA MUESTRA PROVENIENTE DEL SITIO DE LA ESPEJERA.

De acuerdo con la literatura consultada, la presencia de dietil toluamida en efluentes de las plantas de tratamiento en Tokio se reporta en un intervalo de concentración bastante amplio, el cual va desde 12 ngL⁻¹ hasta 1000 ngL⁻¹ (Nakada, 2006). Por lo que la concentración estimada de dietil toluamida (0.52 µgL⁻¹) en el sitio de La Espejera es comparable al intervalo reportado por Nakada. Con respecto a la concentración de ftalato de dietilo encontrada en este sitio de trabajo, el valor determinado (0.48 µgL⁻¹) es prácticamente igual que el valor promedio reportado en el río Tanshui en la ciudad de Taipei, ya que arroja un valor de concentración de 0.5 µgL⁻¹ (Ver Anexo I).

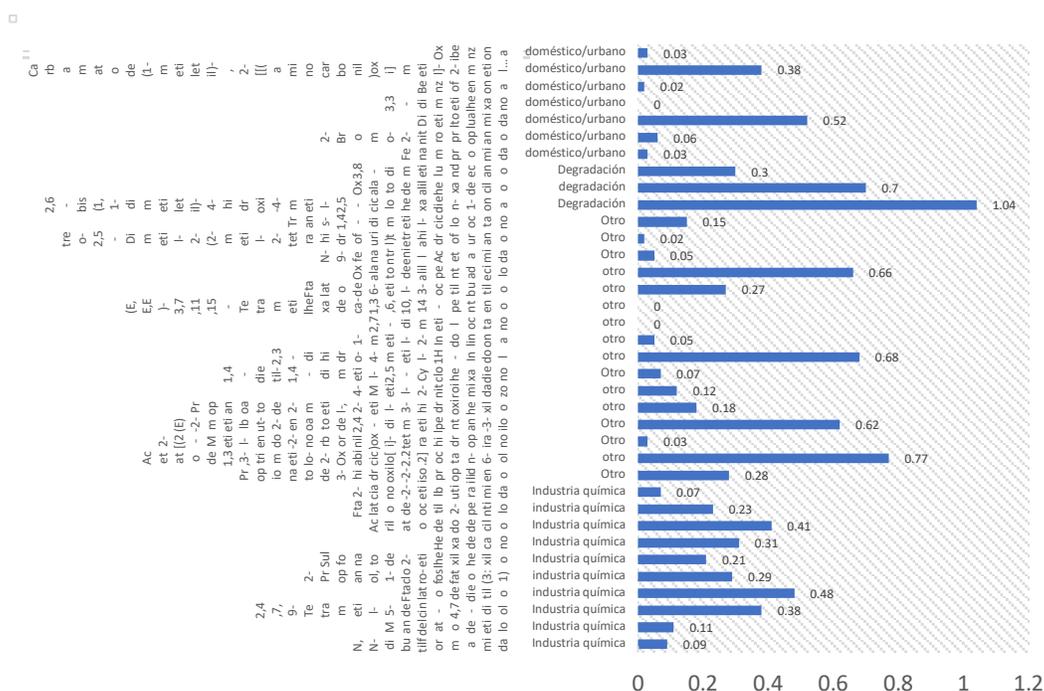


FIGURA 26. GRÁFICA DE BARRAS DE CONCENTRACIÓN DE CONTAMINANTES IDENTIFICADOS EN LA ESPEJERA AGRUPADOS DE ACUERDO CON SU CLASIFICACIÓN.

En el sitio de La Espejera se observa que el grupo clasificado como “otros” es el más abundante, asimismo, los valores de concentración de los contaminantes que constituyen a este grupo son heterogéneos y no se observa tanta similitud entre ellos; de igual manera el grupo de “degradación” y uso doméstico/urbano, son grupos en los cuales los valores de concentración son igualmente variables. Por otra parte, en el grupo de compuestos de uso industrial se observan valores de concentración similares (figura 26).

Al igual que en los sitios de impacto agrícola como en Potrero, Tlilac y Tecaltitla, La Espejera muestra que el grupo clasificado como “otros” es el más abundante debido a la presencia de materia orgánica y vegetal, producto de la actividad agrícola; seguido del grupo de

compuestos de uso industrial, sin embargo, en comparación con la presencia de este grupo con respecto a los demás sitios de impacto agrícola, es menor la presencia de estas sustancias en La Espejera debido a la lejanía con respecto a los demás sitios de impacto agrícola a la mancha urbana y a las zonas de descarga (figura 26).

Por otra parte, los valores de UT de los compuestos de mayor proporción se encuentran muy por debajo de 1 y en órdenes de magnitud de 10^{-4} (Ver Anexo I) y no son representativas en la toxicidad total de la mezcla, la cual posee un valor de 0.70, por lo que puede considerarse de nula o baja toxicidad (Bulich, 1982).

El Bordo

En el sitio El Bordo ubicado en la zona ejidal abandonada fueron identificados 41 compuestos de los cuales el 43.9 % corresponden a compuestos de uso doméstico/ urbano, 29.2 % corresponde al grupo de “otros”, los compuestos de uso industrial representan el 22 %, mientras que los grupos de productos de degradación representan el 4.8 % (Figura 27).

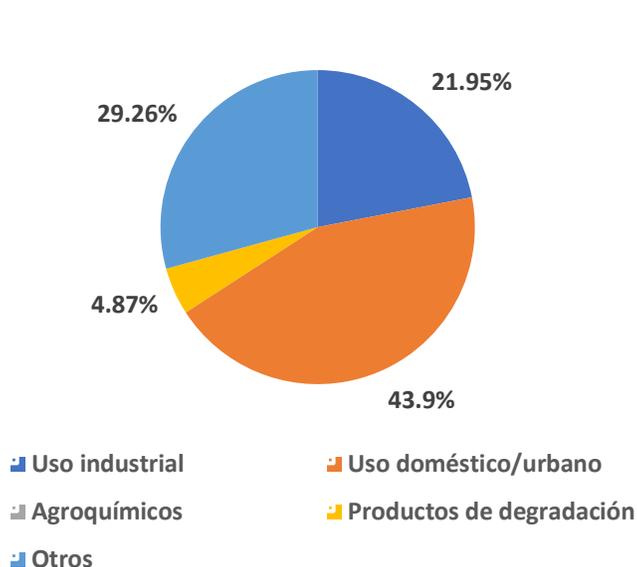


FIGURA 27. PROPORCIÓN DE CONTAMINANTES ORGÁNICOS DE UN SITIO DE LA ZONA EJIDAL DISTANCIADA DE LA ZONA URBANA (EL BORDO)

Los compuestos con mayor proporción identificados en El Bordo son: el triciclo[5.2.1.0(2,6)]dec-3-en-10-ol ($0.48 \mu\text{gL}^{-1}$), la 2-(1,1-dimetiletil) ciclobutanona (que no pudo ser semicuantificado), el ftalato de dietilo ($1.01 \mu\text{gL}^{-1}$), la cafeína ($1.59 \mu\text{gL}^{-1}$) y el ftalato de dibutilo ($2.18 \mu\text{gL}^{-1}$) (Figura 28).

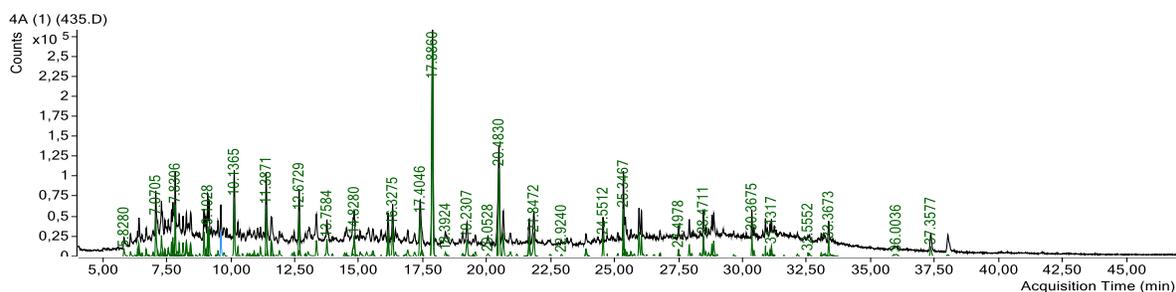


FIGURA 28. CROMATOGRAMA EN MODO SCAN DE UNA MUESTRA PROVENIENTE DEL SITIO DE EL BORDO, XOCHIMILCO.

La presencia del ftalato de dietilo en el sitio de El Bordo a una concentración aproximada de $1.01 \mu\text{gL}^{-1}$ es comparable con lo encontrado por Yuan (2002) en las muestras de agua provenientes del río Tanshui en la ciudad de Taipei, en donde se reportó un valor concentración promedio de $0.5 \mu\text{gL}^{-1}$ y un intervalo de concentraciones comprendido entre $0.1\text{-}2.5 \mu\text{gL}^{-1}$. Por otra parte, la concentración estimada del dibutil ftalato (DBP) en el sitio El Bordo ($2.18 \mu\text{gL}^{-1}$) se encuentra dentro del intervalo de concentraciones reportado en el embalse de Mopanshan (Liu, 2013) y que varía desde 52.5 a 4498.2 ngL^{-1} , así como, dentro del intervalo reportado por Yuan (2002) para las muestras de agua del río Tanshui, Taiwan, el cual se encuentra comprendido entre 1 y $13.5 \mu\text{gL}^{-1}$ (Ver Anexo I).

La presencia de cafeína en aguas residuales es muy común al punto de ser considerada como un marcador químico para indicar la contaminación de un cuerpo de agua con aguas residuales con alta influencia urbana y doméstica. En el sitio de El Bordo la concentración estimada aproximada es $1.59 \mu\text{gL}^{-1}$. Algunos estudios previos, indican la presencia de cafeína en aguas residuales en intervalos de concentración muy variables entre sí. Sin embargo, la concentración estimada en el presente trabajo de investigación es comparable con la reportada en estudios previos que fueron realizados en aguas residuales provenientes de la ciudad de Kyoto, y los cuales arrojaron que la presencia de cafeína variaba entre $0.106 \mu\text{gL}^{-1}$ y $5.45 \mu\text{gL}^{-1}$ (He, 2018).

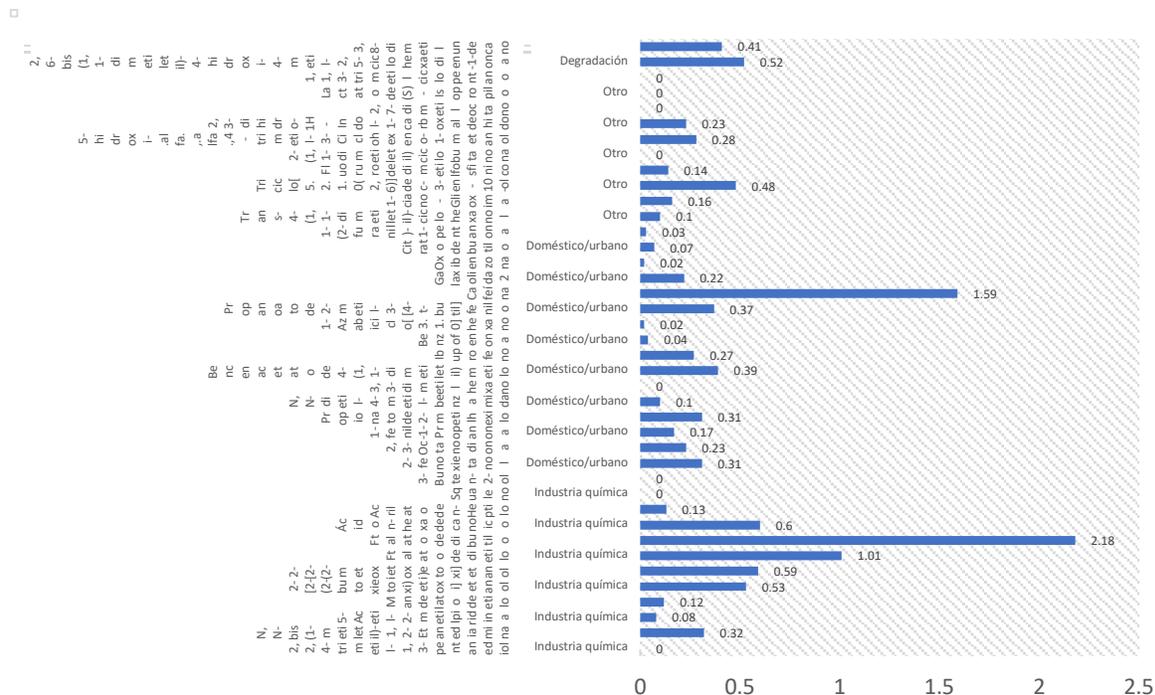


FIGURA 29. GRÁFICA DE BARRAS DE CONCENTRACIÓN DE CONTAMINANTES (µg L⁻¹) IDENTIFICADOS EN EL BORDO AGRUPADOS DE ACUERDO CON SU CLASIFICACIÓN.

En la figura 29 se observa que los grupos más abundantes y de mayores concentraciones son los grupos de uso Industrial y de uso doméstico/urbano; sin embargo, los valores de concentración son menores con respecto a los valores de concentración para los sitios con impacto agrícola. El grupo de “otros” y “de degradación” son los grupos con menor número de contaminantes y con los valores de concentración más bajos.

Por otra parte, los valores calculados de UT para estos compuestos se encuentran muy por debajo de uno, por lo que la toxicidad de los compuestos más abundantes es prácticamente nula. De la misma manera, el valor total UT de la mezcla, es bastante bajo (0.06) por lo que el sitio de El Bordo es el que presenta uno de los valores de toxicidad más bajo (Ver Anexo I).

San Sebastián

En el sitio de San Sebastián ubicado en la zona ejidal alejada de la zona urbana, fueron identificados 22 compuestos de los cuales el grupo definido como “otros”, contribuye con más de la mitad (57 %), el grupo de compuestos de uso industrial le corresponde el 28.6 %, seguido de un 9.5 % correspondiente al grupo de productos de degradación y finalmente el grupo de agroquímicos le corresponde el 4.8 % (figura 30).

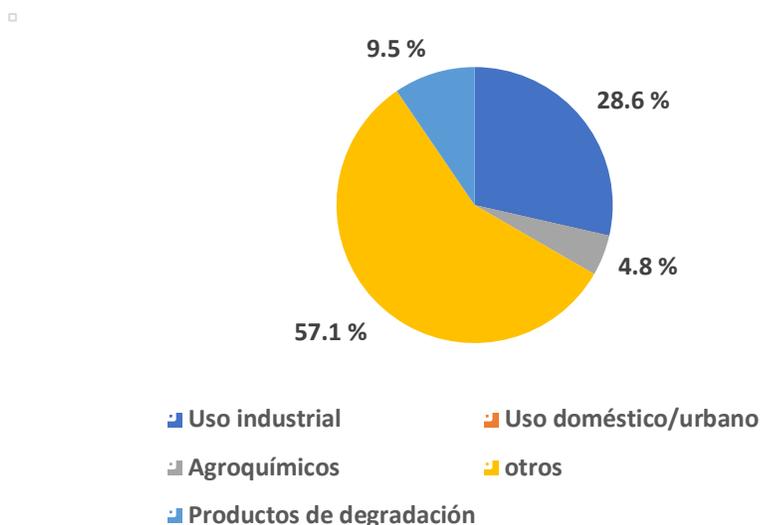


FIGURA 30. PROPORCIÓN DE CONTAMINANTES ORGÁNICOS DE UN SITIO DE LA ZONA EJIDAL DISTANCIADA DE LA ZONA URBANA (SAN SEBASTIÁN).

Los compuestos con un mayor porcentaje de proporción de área identificados en el sitio de San Sebastián son: 2,6-bis(1,1-dimetiletil)-4-hidroxi-4-metil 2,5-ciclohexadien-1-ona ($1.91 \mu\text{gL}^{-1}$), 1,2-bencendicarboxilato de bis(2-metilpropilo) ($8.15 \mu\text{gL}^{-1}$), ftalato de dibutilo ($3.16 \mu\text{gL}^{-1}$) y azufre cíclico octaatómico (Figura 31).

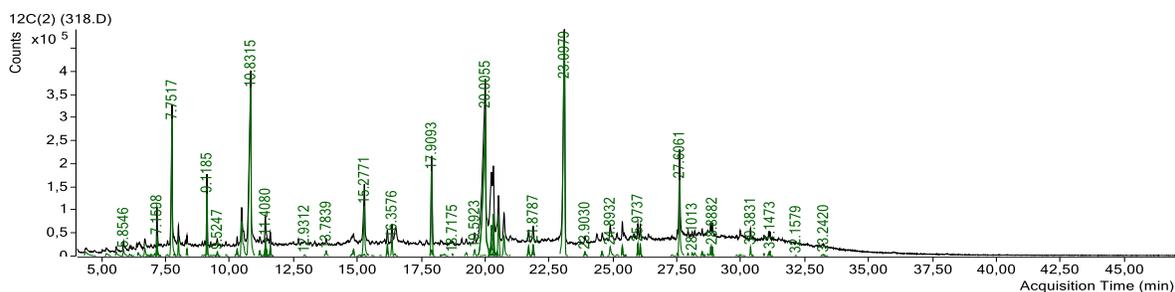


FIGURA 31. CROMATOGRAMA EN MODO SCAN DE UNA MUESTRA PROVENIENTE DEL SITIO DE SAN SEBASTIÁN, XOCHIMILCO.

La presencia de 1,2-bencendicarboxilato de bis(2-metilpropilo) o DiBP, permite realizar su comparación con los valores de concentración de BiDP reportados en la literatura (Wang,

2003) y se observa nuevamente que el valor de concentración estimado en San Sebastián ($8.15 \mu\text{gL}^{-1}$) se encuentra dentro del intervalo de concentraciones mostradas por las muestras de agua provenientes del lago Taihu. Por otra parte, la concentración estimada del dibutil ftalato (DBP), para este sitio de estudio ($3.16 \mu\text{gL}^{-1}$) se encuentra dentro del intervalo de concentraciones reportado para el embalse de Mopanshan (Liu, 2013) y que varía desde 52.5 a 4498.2 ngL^{-1} , así como, del intervalo encontrado para las muestras de agua del río Tanshui, Taiwan, el cual va desde 1 a $13.5 \mu\text{gL}^{-1}$ (Yuan, 2002).

Finalmente, aunque no es posible semicuantificar la presencia de azufre cíclico octaatómico con los estándares utilizados a lo largo de este proyecto, es importante mencionar que su presencia en el medio se debe a diversos procesos microbianos asociados a un entorno anaerobio (Badoil, 2009) (Ver Anexo I).

En la figura 32 se observa que el grupo con mayor número de contaminantes es el clasificado como “otros”, recordando que la composición de este grupo es principalmente metabolitos de origen vegetal y compuestos de uso desconocido.

Seguido del grupo de “otros”, los compuestos de uso industrial representan el 28% de la composición de la muestra seguido de los compuestos “de degradación”.

Se observa que existe una similitud de los valores de concentración entre la mayoría de los contaminantes en la muestra, sin embargo, existen dos contaminantes que sobresalen por sus valores de concentración relativamente elevados con respecto al resto. Dichos contaminantes pertenecen al grupo de uso industrial, ambas sustancias son utilizadas como plastificantes y pertenecen al grupo de los ftalatos; los cuales se sabe que son ampliamente utilizados en recubrimientos de superficie, como aditivos en plásticos, pinturas, cosméticos, etc. Y que además se sabe que, por sus propiedades fisicoquímicas, son capaces de migrar de una matriz ambiental a otra y transportarse vía atmosférica para posteriormente depositarse en agua o suelos (Yuan, 2002) (Ver Anexo I).

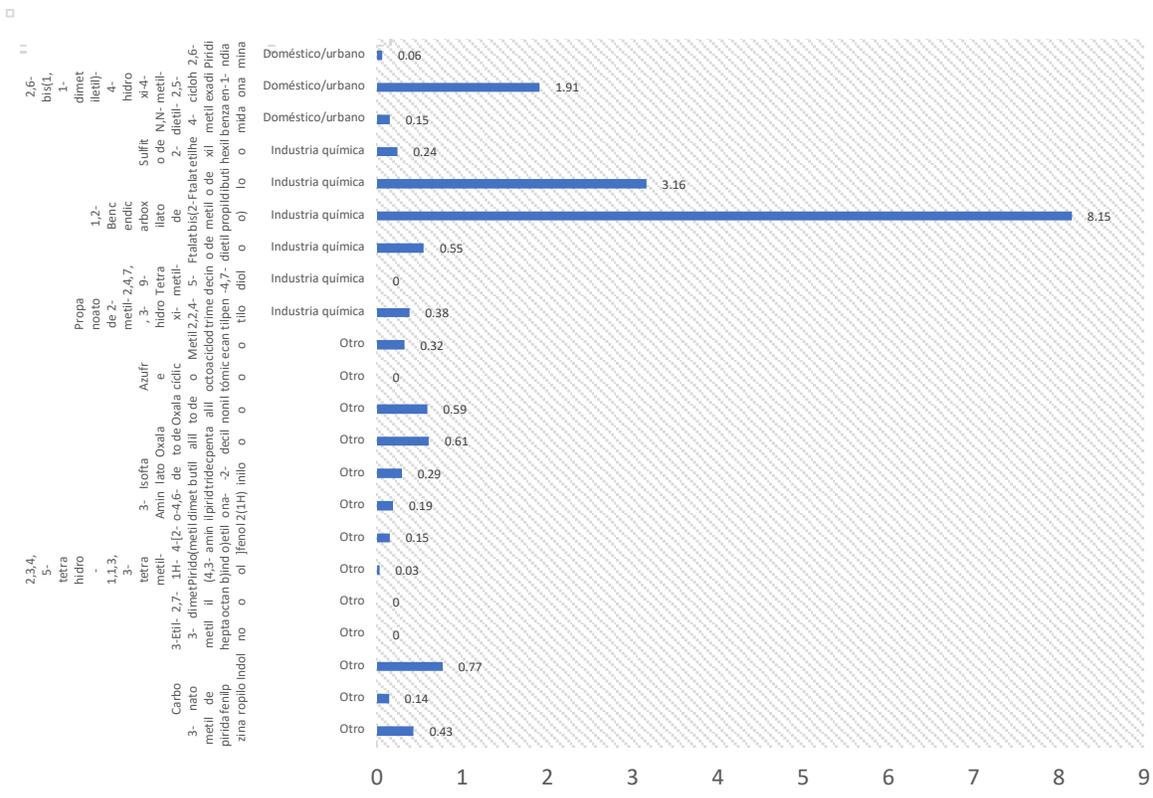


FIGURA 32. GRÁFICA DE BARRAS DE CONCENTRACIÓN DE CONTAMINANTES (µG L⁻¹) IDENTIFICADOS EN SAN SEBASTIÁN AGRUPADOS DE ACUERDO CON SU CLASIFICACIÓN.

Cabe mencionar que los valores calculados de UT para estos compuestos se encuentran muy por debajo de la unidad como se puede observar en la tabla de contaminantes orgánicos identificados en San Sebastián (Ver Anexo I), por lo que la toxicidad de los compuestos más abundantes es prácticamente nula. De la misma manera, el valor total UT de la mezcla, es bastante bajo (0.05) por lo que el sitio de San Sebastián es otro de los sitios que presenta uno de los valores de toxicidad más bajos.

Fábrica

En el sitio de Fábrica fue donde se identificaron la mayor cantidad de compuestos orgánicos (58 substancias), la fracción doméstico/urbana representa el 41.3 %, el grupo definido como “otros” representa un 27.5 %, mientras que las substancias de uso industrial contribuyen con el 19 % y finalmente, el grupo de productos de degradación representan tan solo un 12 % (Figura 33).

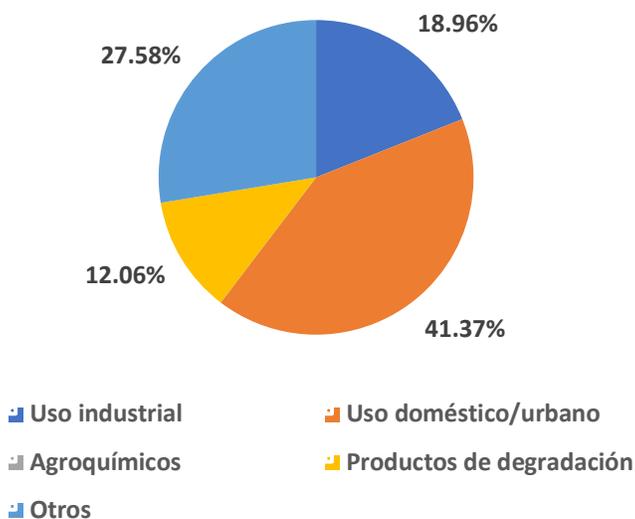


FIGURA 33. PROPORCIÓN DE CONTAMINANTES ORGÁNICOS DE UN SITIO CON IMPACTO URBANO (LA FÁBRICA)

Los compuestos en mayor proporción son: el hexahidro-4,7-metano-1H-indenol, ($1.58 \mu\text{g L}^{-1}$), ciclopentanoacetato de 3-oxo-2-pentil metilo ($3.68 \mu\text{g L}^{-1}$), el ácido n-hexadecanóico ($2.52 \mu\text{g L}^{-1}$), el ácido octanóico, (3.beta.,5.beta.)-colestano-3-ol, ($1.92 \mu\text{g L}^{-1}$) y la 26-nor-5-colesten-3.beta.-ol-25-ona ($1.94 \mu\text{g L}^{-1}$) (Figura 34).

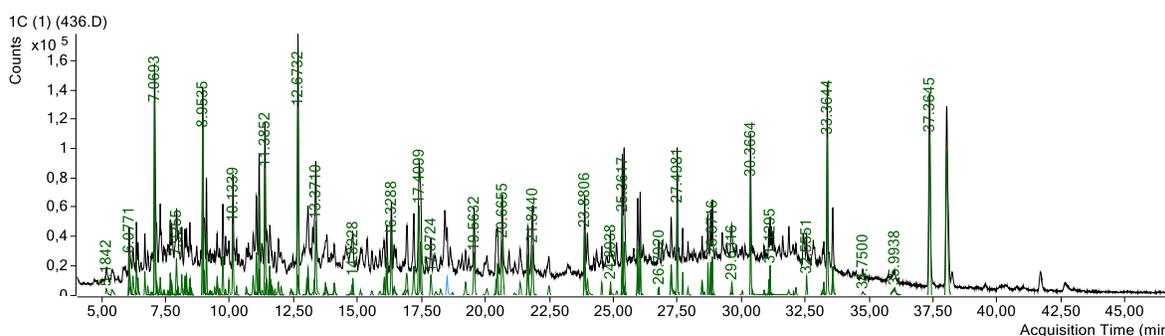


FIGURA 34. CROMATOGRAMA EN MODO SCAN DE UNA MUESTRA PROVENIENTE DEL SITIO DE LA FÁBRICA, XOCHIMILCO.

El compuesto ciclopentanoacetato de 3-oxo-2-pentil metilo (dihidrojasmonato de etilo) es una sustancia ampliamente utilizada en la industria de las fragancias y también como aditivo en alimentos, se reporta la presencia de esta sustancia en aguas residuales en intervalos de concentraciones muy variables, sin embargo, es común encontrarlo en intervalos de concentraciones de $2.86 \mu\text{gL}^{-1}$ - $5.41 \mu\text{gL}^{-1}$ e incluso hasta de $33.28 \mu\text{gL}^{-1}$ (Hijosa, 2010), las cuales corresponden a valores de concentración similares a las encontradas en el sitio de la Fábrica. La presencia de ácido n-hexadecanóico y el ácido octanóico tiene su origen tanto en su uso como componentes en el desarrollo de surfactantes, como en la formación de metabolitos vegetales lipídicos, así como, la degradación de materia orgánica proveniente de la fracción húmica de suelos con una intensa actividad agrícola (Réveillé, 2003). Por otra parte, (3.beta.,5.beta.)-colestano-3-ol o más comúnmente conocido como coprostanol es un indicador de contaminación fecal, en algunos estudios realizados en muestras de aguas residuales indican que la concentración de este compuesto en promedio es de $0.7 \mu\text{gL}^{-1}$ (Kolpin, 2002); que a pesar de ser inferior a la concentración estimada en el sitio de la Fábrica ($1.9 \mu\text{gL}^{-1}$) resulta comparable con la reportada por kolpin (2002), e incluso se encuentra por debajo del límite reportado en el mismo estudio y que fue de $9.8 \mu\text{gL}^{-1}$. La presencia del coprostanol puede deberse no solo a la descarga continua de aguas residuales provenientes de las plantas de tratamiento, sino además un aporte extra de aguas residuales que carecen de una regulación y que tienen su origen en los desagües urbanos de la zona, así como la cercanía del sitio con el entorno urbano (Ver Anexo I).

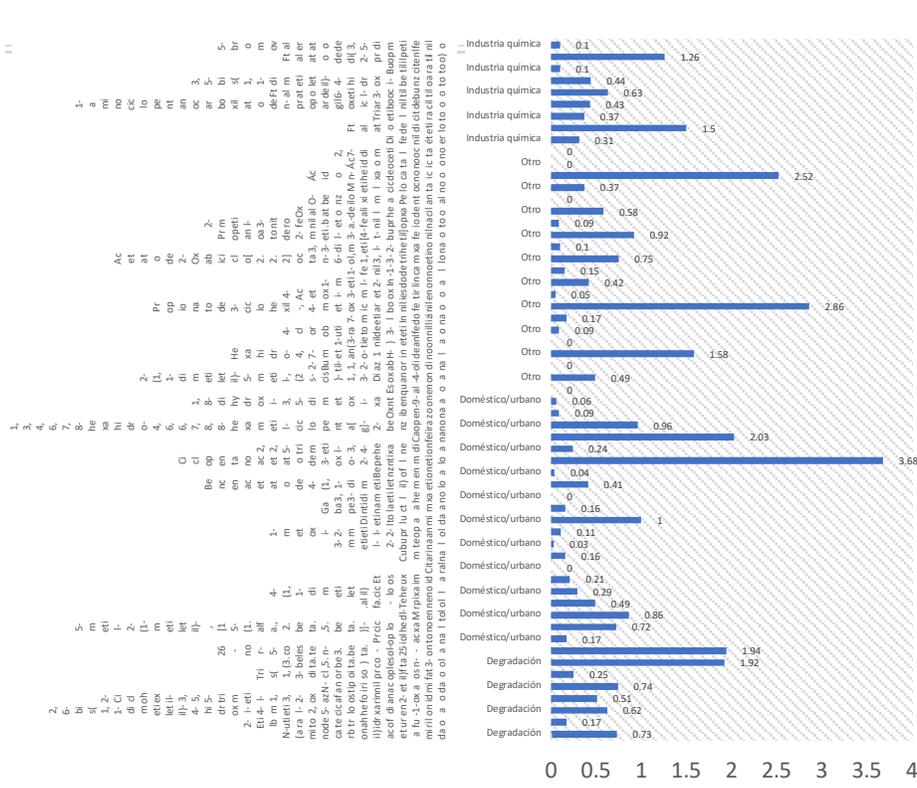


FIGURA 35. GRÁFICA DE BARRAS DE CONCENTRACIÓN DE CONTAMINANTES IDENTIFICADOS EN LA FÁBRICA AGRUPADOS DE ACUERDO CON SU CLASIFICACIÓN.

Se observa en la figura 35 que el grupo de compuestos de uso doméstico/urbano representa la mayor composición en la muestra de la Fábrica debido a la cercanía a la zona urbana. Asimismo, se observa que los valores de concentración en este grupo no son uniformes y varían entre sí. El grupo “otros” es el segundo grupo de mayor composición en la muestra y se observa que los valores de concentración son heterogéneos. Los contaminantes que componen el grupo de uso industrial representan el tercer lugar en la composición de contaminantes en la muestra y finalmente los contaminantes pertenecientes al grupo de productos de degradación. A diferencia de los grupos de compuestos de uso doméstico/urbano y “otros”, los contaminantes pertenecientes a productos de degradación y de compuestos de uso industrial muestran una menor variación en los valores de concentración y además son los grupos de contaminantes que representan la menor composición en la muestra.

Los valores de UT de los compuestos más abundantes son en su mayoría de toxicidad nula ($UT \leq 1$); sin embargo, el valor UT para el coprostanol es de 7.6, que de acuerdo con los criterios de Toxicidad utilizados (Bulich, 1982), se encuentra dentro de la categoría de

compuesto tóxico. El valor UT total de la mezcla es 7.9 siendo casi en su totalidad, el aporte del coprostanol, por lo que la mezcla de los contaminantes detectados en el sitio de Fábrica se considera como tóxica (Ver Anexo I).

Coapatitla

En el sitio de Coapatitla se identificaron 46 sustancias de las cuales el 41.30 % representa a los compuestos de uso doméstico/urbano seguido del grupo llamado “otros” con un 37 %. El grupo de compuestos de uso industrial representan el 13 % mientras que los productos de degradación y agroquímicos representan solamente el 6.5 % y 4.3 % respectivamente (figura 36).

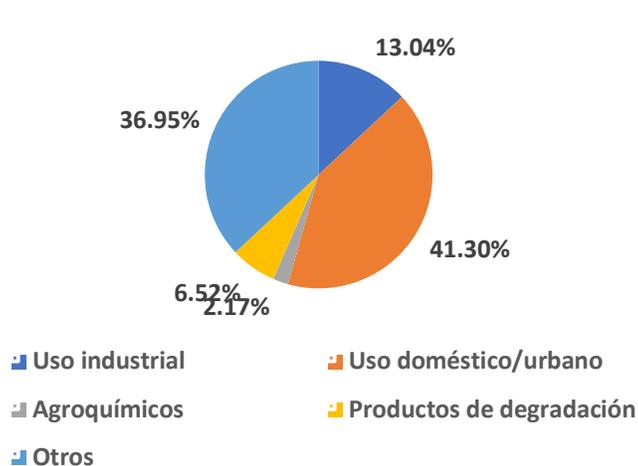


FIGURA 36. PROPORCIÓN DE CONTAMINANTES ORGÁNICOS DE UN SITIO CON IMPACTO URBANO (COAPATITLA).

De acuerdo con el cromatograma de la Figura 37, los compuestos con mayor proporción en el sitio de Coapatitla son: el hexahidro- 4,7-Metano-1H-indenol ($1.48 \mu\text{g L}^{-1}$), el 2,3-dihidro-4-metil-1H-Indol ($4.79 \mu\text{g L}^{-1}$) y la dietiltoluidina ($3.49 \mu\text{g L}^{-1}$) (Ver Anexo I).

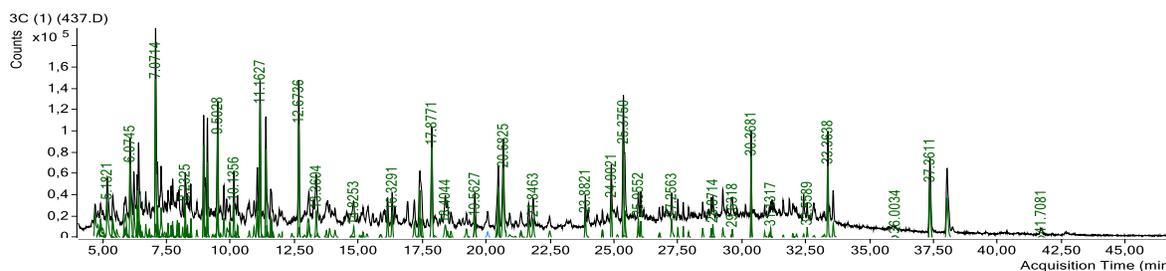


FIGURA 37. CROMATOGRAMA EN MODO SCAN DE UNA MUESTRA PROVENIENTE DEL SITIO DE COAPATITLA, XOCHIMILCO.

Al comparar la presencia de la dietil toluamida con estudios recientes en efluentes de las plantas de tratamiento en Tokio (Nakada, 2006), el cual la reporta en un intervalo de concentraciones que va desde 12 ngL⁻¹ hasta 1000 ngL⁻¹, se observa que la concentración estimada en el sitio de Coapatitla es aproximadamente 3 veces mayor que la concentración máxima reportada en dicho estudio, la cual podría relacionarse por la cercanía del sitio con la zona urbana y por consiguiente, con las aguas domiciliarias no reguladas, así como a la aplicación reciente o constante en el lugar como medida de mitigación por parte de la población, ya que debido a las condiciones de éste, se favorece el crecimiento y proliferación de diversas especies pertenecientes al grupo de Neuston.

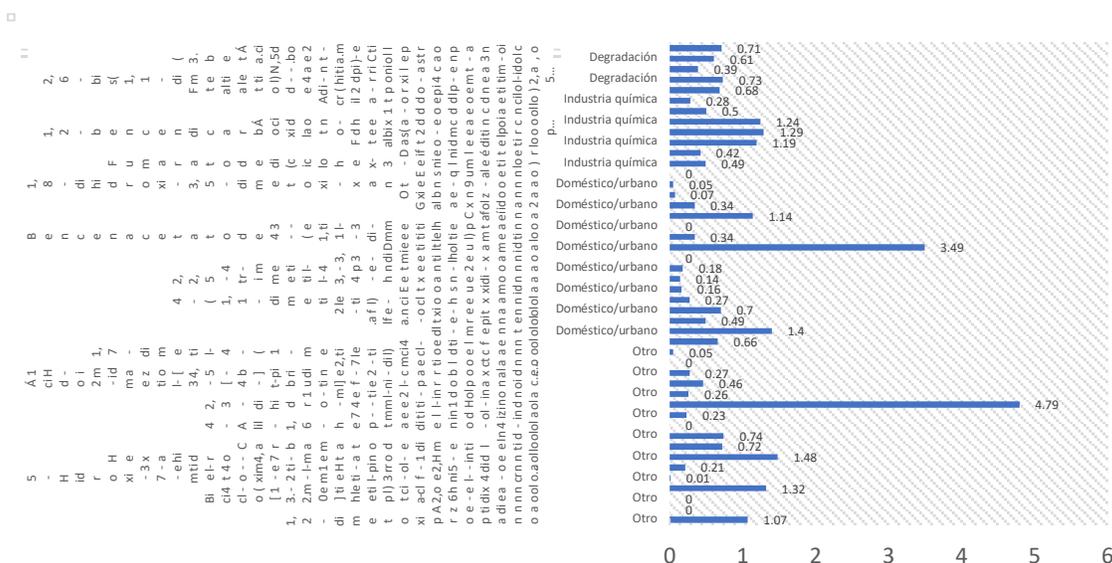


FIGURA 38. GRÁFICA DE BARRAS DE CONCENTRACIÓN DE CONTAMINANTES (µg L⁻¹) IDENTIFICADOS EN COAPATITLA AGRUPADOS DE ACUERDO CON SU CLASIFICACIÓN.

Se observa en la figura 38 que el grupo de compuestos de uso doméstico/urbano es el de mayor composición en la muestra de Coapatitla, asimismo se observa que los valores de concentración son relativamente uniformes con excepción de la dimetiltoluamida; la cual posee una concentración más elevada con respecto a los demás contaminantes en el grupo. El grupo de “otros” representa el segundo lugar en la composición de los contaminantes en la muestra. De la misma manera se observa una similitud en los valores de concentración de los contaminantes en comparación con los del grupo doméstico/urbano. Finalmente, los grupos de contaminantes de uso industrial y de productos de degradación son los que poseen valores en la composición porcentual de la muestra más bajos, asimismo, se observa una mayor similitud en los valores de concentración entre ambos grupos.

Por otra parte, se observa que los valores individuales de UT de los compuestos de mayor proporción están muy por debajo del valor mínimo para considerarse tóxicos, sin embargo, a pesar de tener una proporción menor al 5 %, el (3.beta.,5.beta.)-colestano-3-ol (coprostanol) al igual que en el sitio de la Fábrica, es el contaminante que contribuye mayormente en la toxicidad de la mezcla de contaminantes del sitio (2.60) por lo que la mezcla del sitio se considera tóxica (Ver Anexo I).

Puente de Urrutia

En el sitio de Puente de Urrutia se identificaron 30 compuestos orgánicos de los cuales el 33.3 % corresponden a sustancias de uso industrial. Los compuestos de uso doméstico/urbano representan un 33.3 %, mientras que el grupo llamado “otros” compone en un 16.7 % a la muestra y los productos de degradación aportan un 13.3 %. La contribución más baja corresponde al grupo de compuestos agroquímicos, que representan un 3.3 % (figura 39).

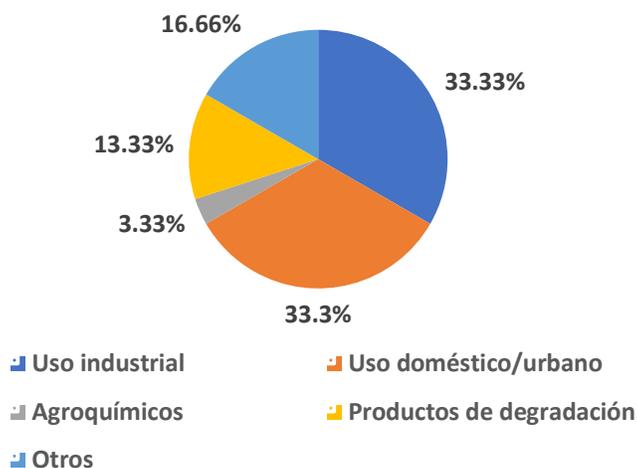


FIGURA 39. PROPORCIÓN DE CONTAMINANTES ORGÁNICOS DE UNA ZONA DE DESCARGA DE AGUAS TRATADAS (PUENTE DE URRUTIA), XOCHIMILCO.

En el Puente de Urrutia se identificaron 9 contaminantes que son los que se encuentran en mayor proporción en el sitio: el 1-(2-metoxi-1-metiletoxi)-2-propanol, ($0.87 \mu\text{gL}^{-1}$), el 2-fenoxi-etanol, ($0.84 \mu\text{gL}^{-1}$), el 2,4,7,9-tetrametil-5-decin-4,7-diol ($0.96 \mu\text{gL}^{-1}$), la 2,6-bis(1,1-dimetiletil)-4-hdroxi-4-metil-2,5-ciclohexadien-1-ona ($0.85 \mu\text{gL}^{-1}$), el fenol, 2,6-bis(1,1-dimetiletil)-4-metil-, metilcarbamato ($1.64 \mu\text{gL}^{-1}$), el 1,2-bencendicarboxilato de bis(2-

metilpropilo) ($0.90 \mu\text{gL}^{-1}$), ácido n-hexadecanóico ($1.12 \mu\text{gL}^{-1}$), el oxalato de alil octadecilo ($1.15 \mu\text{gL}^{-1}$) y el hexadecano ($0.94 \mu\text{gL}^{-1}$) (Ver Anexo I) (Figura 40).

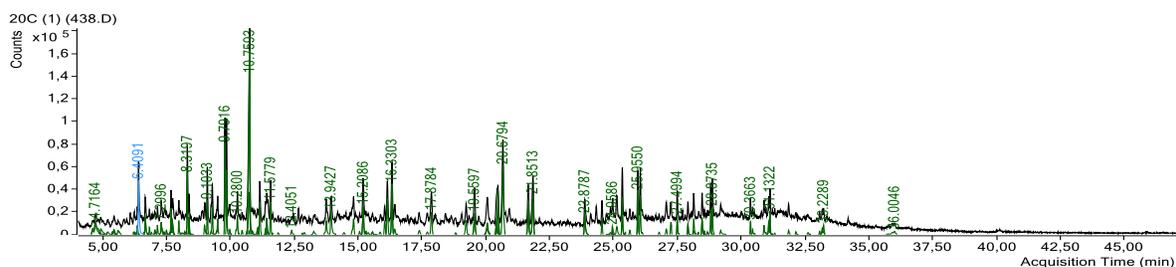


FIGURA 40. CROMATOGRAMA EN MODO SCAN DE UNA MUESTRA PROVENIENTE DEL SITIO DE PUENTE DE URRUTIA.

El 1-(2-metoxi-1-metiletoxi)-2-propanol es ampliamente utilizado en la industria química para la manufactura de plásticos a base de poliéster, además de que es comercializado en mezcla con más de 8 isómeros (Carter, 2018). Algunos estudios reportados en la literatura, indican la presencia de esta sustancia en efluentes de aguas residuales en concentraciones máximas de $20.2 \mu\text{gL}^{-1}$ (Carter, 2018), mientras que la concentración aproximada en el Puente de Urrutia es de $0.87 \mu\text{gL}^{-1}$, 20 veces menor a la reportada; por lo que es importante tener presente que los estándares utilizados para semi cuantificar a los contaminantes no siempre presentan una similitud estructural evidente, ya que las propiedades fisicoquímicas cambian y por consiguiente, su factor de respuesta, el cual es primordial al hacer la comparación cuantitativa entre el área del analito y el estándar (Ver Anexo I).

Otro contaminante detectado y estimado en el sitio del Puente de Urrutia fue el 2-fenoxi-etanol, comúnmente conocido como cellosolve y que es muy utilizado en la industria de cosméticos como aditivo, así como en fragancias, plastificantes, fármacos etc. (Fiege, 2003). En el presente trabajo de investigación la concentración aproximada de este compuesto fue de $0.84 \mu\text{gL}^{-1}$, al comparar este valor con el reportado por algunos estudios realizados en muestras de agua residual, como el descrito por Benfenati (2003), quien indica que, la concentración promedio de cellosolve es $2.97 \mu\text{gL}^{-1}$, es posible decir que la concentración estimada en el Puente de Urrutia a pesar de ser menor, se encuentra muy aproximada a la reportada (Ver Anexo I).

Asimismo, se estimó la concentración del 2,4,7,9-tetrametil-5-decin-4,7-diol (TMDD) la cual resultó ser de $0.96 \mu\text{gL}^{-1}$ y de acuerdo con algunos estudios realizados como el de Grigoridaou (2004), al norte de Grecia, que indica que la presencia de TMDD se encuentra

en un intervalo de 120 ngL^{-1} a 460 ngL^{-1} , la concentración encontrada de este contaminante en el sitio de Puente de Urrutia la excede por un poco más del doble. La presencia de TMDD en agua es principalmente por su aplicación en la industria de adhesivos, agente antiderrapante, surfactante, aditivo en productos de cuidado personal etc. Asimismo, posee un potencial bajo de bioacumulación y su tasa de degradación es demasiado lenta (900 h en agua) por lo que se considera como contaminante persistente (Vincze, 2014).

Por otra parte, se identificó un contaminante que es relevante en comparación a otros de los contaminantes identificados en este trabajo: el fenol, 2,6-bis(1,1-dimetiletil)-4-metil-, metilcarbamato ($1.64 \text{ } \mu\text{gL}^{-1}$) y que comúnmente se conoce como terbutol. Este compuesto es ampliamente utilizado como plaguicida, perteneciente a la familia de los carbamatos. La presencia del terbutol en aguas residuales ha sido reportada por Suzuki (1998) en concentraciones máximas de $10 \text{ } \mu\text{gL}^{-1}$, por lo que es comparable la concentración en aguas residuales con uso de riego y que se encuentra reportada en la literatura con la estimada en este trabajo (Ver Anexo I).

La concentración estimada del plastificante 1,2-bencendicarboxilato de bis(2-metilpropilo) o DiBP es $0.90 \text{ } \mu\text{gL}^{-1}$ y que, como anteriormente se ha hecho, nos permite hacer la misma comparación con los valores de concentración de BiDP reportados en la literatura (Wang, 2003) y se observa nuevamente que el valor de concentración estimado en Puente de Urrutia ($0.90 \text{ } \mu\text{g L}^{-1}$) se encuentra dentro del intervalo de concentración en las muestras de agua provenientes del lago Taihu ($0.598 \text{ } \mu\text{gL}^{-1}$ a $7.85 \text{ } \mu\text{gL}^{-1}$) (Wang H. W., 2003). Por último, la presencia del hexadecano, así como del ácido n-hexadecanóico y del ácido octadecanóico tiene su origen tanto en su uso como componentes en el desarrollo de surfactantes, como en la formación de metabolitos vegetales lipídicos, así como la degradación de materia orgánica, proveniente de la fracción húmica de suelos con una intensa actividad agrícola; sin embargo, deriva también su presencia por la quema de hidrocarburos combustibles, y que por procesos de lavado del suelo urbano y la deposición tanto en vía seca como húmeda en el cuerpo de agua puede introducirse en la matriz acuática (Réveillé, 2003).

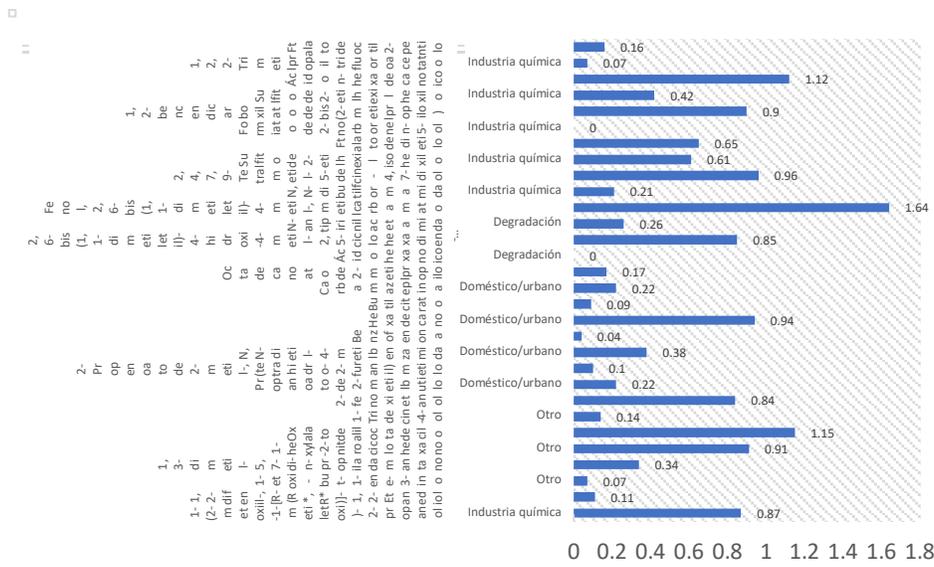


FIGURA 41. GRÁFICA DE BARRAS DE CONCENTRACIÓN DE CONTAMINANTES (µg L⁻¹) IDENTIFICADOS EN PUENTE DE URRUTIA AGRUPADOS DE ACUERDO CON SU CLASIFICACIÓN.

En la figura 41 se observa que dos grupos (uso doméstico/urbano e industrial) representan la mayor composición porcentual en la muestra proveniente de Puente de Urrutia con un valor de 33.3% ambos. Asimismo, se observa que, a pesar de poseer el mismo número de contaminantes, el grupo de contaminantes de industria química poseen valores de concentración más elevados con respecto a los de uso doméstico/urbano. En segundo lugar, los contaminantes agrupados como otros arrojan valores de concentración similares al grupo de productos de degradación, los cuales representan el tercer lugar en la composición porcentual de contaminantes en la muestra.

Los datos de UT de cada contaminante indican que 7 de los 9 compuestos de mayor proporción son de baja toxicidad, sin embargo la presencia principalmente del terbutol (UT = 51.31) y en menor medida el hexadecano (UT = 1.86), hacen que el valor total UT de la mezcla del sitio sea elevado y de acuerdo con el criterio de toxicidad utilizado (Bulich, 1982) es considerada como “muy tóxica” (UT 11-100), por lo que es muy importante realizar un estudio más detallado y dirigido principalmente a la presencia del terbutol y derivados carbámicos en el agua (Ver Anexo I).

Toxicidad de los sitios

Una vez determinada la toxicidad de cada sitio e identificados los contaminantes más relevantes en función de su proporción en el cromatograma como por su valor UT individual, es importante establecer cuál de los nueve sitios es o son los que presentan un ambiente más tóxico (Bulich, 1982).

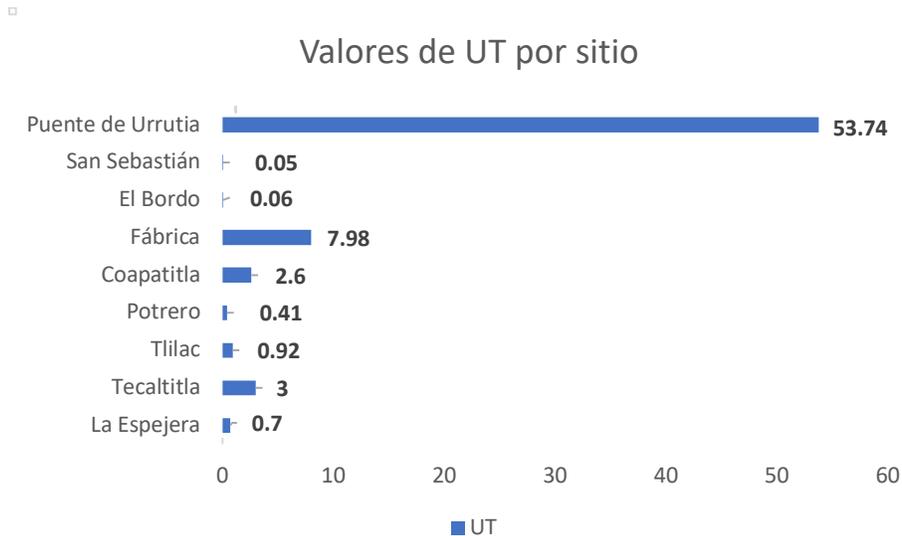


FIGURA 42. VALORES UT TOTAL POR SITIO DE MUESTREO EN SAN GREGORIO ATLAPULCO, XOCHIMILCO.

Como se observa en la figura 42, cinco de los nueve sitios (Tlilac, Potrero, La Espejera, San Sebastián y El Bordo) presentan una toxicidad baja o nula.

Los sitios de El Bordo y San Sebastián, ubicados en dirección al norte de la zona lacustre, pertenecen a la zona ejidal distanciada de la zona urbana. De acuerdo con los datos de UT (Bulich, 1982), de los nueve sitios muestreados, son los sitios con más baja toxicidad, esto gracias a su lejanía a la zona urbana. A pesar de que se pueda pensar lo contrario, el flujo de agua de los canales en Xochimilco es lento casi como un sistema léntico (Ponce de Leon-Hill, 2017); por lo que la entrada de contaminantes provenientes principalmente tanto de los efluentes de las plantas de tratamiento, como de las descargas irregulares de aguas negras y así como de las actividades provenientes de la zona chinampera agrícola, y es debido al movimiento del agua a causa del flujo que se generan gradientes de concentración tanto de manera horizontal, es decir, en dirección al flujo, como a lo largo de la columna de agua. Esta movilidad de los contaminantes a lo largo de la red de canales, también se ve influenciada por la subsidencia del terreno. La cual se debe a la sobreexplotación de los mantos acuíferos lo que ocasiona un hundimiento diferencial de terreno (Ponce de Leon-

Hill, 2017). Sin embargo, al comparar la composición de los grupos de contaminantes observados en la figura 13 entre ambos sitios se observa que, en El Bordo, el grupo predominante son las sustancias de uso doméstico/urbano en un 41 %. En la figura 4 se aprecia que existe una mayor cercanía desde este sitio a la mancha urbana y que además el flujo de agua de los canales corre hacia esa dirección que a diferencia de San Sebastián en el cual, el grupo predominante corresponde al grupo de “otros” en un 57 % el cual se compone de sustancias que son de origen vegetal como metabolitos provenientes de la degradación de la materia vegetal o de la materia orgánica (Réveillé, 2003) que se encuentra suspendida en la columna de agua, así como, de sustancias de uso desconocido.

Los sitios Tecaltitla, Tlilac, Potrero y La Espejera son los que presentan impacto agrícola y a pesar de que sus valores UT se consideran de baja toxicidad, son más altos que los sitios pertenecientes a la zona ejidal distanciada de la zona urbana y que además se encuentran en el límite para ser considerados como tóxicos. Este comportamiento diferencial del aumento gradual de la toxicidad en los sitios muestreados se va acentuando conforme hay una mayor proximidad a la zona urbana o zonas de descarga, así mismo, se observa que en la composición de los grupos de contaminantes en los cuatro sitios predominan los grupos de compuestos de uso industrial y el grupo de “otros”. Los sitios de Tecaltitla y La Espejera son los sitios que se encuentran más alejados al área urbana, ubicados hacia el norte y más próximos a la zona ejidal de El Bordo. En ambos sitios la contribución de sustancias de uso doméstico/urbano es relativamente baja, de un 12.5 % y 19.4 % respectivamente, por otra parte, en los sitios de Tlilac y Potrero la contribución de estos contaminantes es de 22.7 % y 30 %. La presencia de este tipo de sustancias se debe a la recarga continua de los canales con la descarga puntual de aguas tratadas, sumado también a la lejanía con el área urbana. Sin embargo, en ambos sitios la presencia de compuestos de uso industrial representa el 37.5% y 27.7%, respectivamente, lo que es una contribución mayor a la de sustancias de uso doméstico/urbano, por lo que el ingreso de este tipo de sustancias al medio receptor se debe también, además de las fuentes puntuales como la descarga de aguas tratadas y negras, a las fuentes difusas como la deposición atmosférica vía húmeda y/o seca, que contribuyen de igual manera a la presencia de estas sustancias en el agua tanto al ser emitidas como dispersadas en la atmósfera son posteriormente depositadas en el agua o en el suelo de las chinampas para después, por acción del viento o lavados de los suelos con la lluvia, ser introducidas a un tercer receptor como el agua (Antúnez, 2014) (Ponce de Leon-Hill, 2017). El grupo de

“otros” varía en los cuatro sitios de un 25 % a un 44 %, siendo los sitios de Tlilac, La Espejera y Tecaltitla los que tienen los valores más altos (36 %, 44 % y 40 % respectivamente). La mayoría de los compuestos identificados en estos grupos corresponde a sustancias provenientes de la materia vegetal, así como de materia orgánica que se integran al medio receptor mediante deposición húmeda y/o seca, escorrentía por lavado de los suelos chinamperos y/o urbanos, así como el ingreso de partículas sólidas provenientes de la erosión del suelo.

Se observa que en los sitios de mayor impacto urbano (Coapatitla y Fábrica) los valores de UT total se consideran como tóxicos sobre todo por la presencia de diversas sustancias, principalmente de uso industrial y doméstico/urbano que son grupos predominantes y que constituyen a las muestras de estos sitios. El porcentaje de estas fracciones varían de 30-39.6 %, la presencia de los contaminantes identificados en este grupo ingresa por fuentes puntuales y son descargas reglamentadas y fijas, que provienen de las plantas de tratamiento, así como de fuentes clandestinas de aguas negras sin tratar que abastecen y recargan al sistema de canales. De la misma manera, otra entrada de este tipo de compuestos es mediante fuentes difusas como escorrentía superficial y que se incorporan al sistema el agua de lavado de suelos urbanos debido a su cercanía a estos puntos, así como el suelo chinampero, el cual incorpora al sistema, materia orgánica, agroquímicos, grasas y polvo (Ponce de Leon-Hill, 2017). El grupo de sustancias de uso industrial también representa una contribución importante en los sitios de Coapatitla y Fábrica (13 % y 19 % respectivamente). El aumento en la toxicidad en estos sitios se debe a la cercanía e influencia de la zona urbana y debido a que el flujo de agua, a pesar de ser constante, es muy bajo, lo que ocasiona una lenta disolución de los contaminantes que ingresan al sistema por lo que tienden a acumularse en las zonas cercanas a las fuentes.

Finalmente, el sitio Puente de Urrutia es el que presenta la mayor toxicidad (UT = 53.7) y que de acuerdo con el criterio de toxicidad usado (Bulich, 1982), el sitio se cataloga como un ambiente “muy tóxico”, por la presencia de un solo un contaminante, el terbutol, que es un plaguicida perteneciente a la familia de los carbamatos (Suzuki, 1998) y el cual fue identificado solamente en este sitio lo que podría significar que fue de reciente aplicación en el área circundante. Sin embargo, es importante reconocer su potencial tóxico y, por lo tanto, es necesario su monitoreo para poder determinar si su presencia es constante, así como su concentración. Por otra parte, la composición de la mezcla de contaminantes en este sitio es mayormente de sustancias de uso industrial en donde la contribución de este

grupo es del 33.3 %, seguido de las sustancias de uso doméstico/urbano y que se debe principalmente a la descarga de aguas residuales que provienen de las plantas de tratamiento que recargan al sistema. Sin embargo, no se deben descartar los otros mecanismos de transferencia involucrados como fuentes difusas (escorrentía, deposición atmosférica, erosión de material particulado, etc.) (Ponce de Leon-Hill, 2017).

Es importante remarcar, que al comparar la composición de grupos de contaminantes en los sitios con impacto urbano como Coapatitla y Fábrica, con Puente de Urrutia, el cual es predominantemente un sitio de descarga, se observa que existe una mayor proporción de contaminantes de uso doméstico/urbano en los sitios de Coapatitla y Fábrica que en Puente de Urrutia, y esto se debe, principalmente a la contribución de las fuentes puntuales de aguas domiciliarias y negras que no se encuentran reguladas.

Asimismo, es importante mencionar que debido a que algunos segmentos de la red canalera han ido desapareciendo y se han entrecortado, es necesario, para abastecer estos canales, bombear agua desde zonas de descarga o de canales aledaños (González-Pozo, 2016). Por otra parte, la presencia de asentamientos irregulares en la zona, principalmente viviendas que carecen de una red de drenaje, se ven obligados en su mayoría a verter sus aguas residuales hacia los cauces, contribuyendo así a la introducción de contaminantes de uso doméstico/urbano (González-Pozo, 2016).

Análisis de frecuencias

Un total de 189 sustancias fueron identificadas en los nueve sitios distribuidos sobre la red de canales de San Gregorio Atlapulco. Para poder identificar aquellas sustancias que se encuentran con mayor frecuencia, se consideraron solamente aquellas que fueron detectadas en un porcentaje de frecuencia ≥ 30 %. De las 189 sustancias, 36 fueron detectadas por encima del 30 %.

En la Tabla 9, se muestran los compuestos que se encuentran presentes con mayor frecuencia:

TABLA 9. FRECUENCIA DE LOS CONTAMINANTES MÁS COMUNES ENCONTRADOS EN LOS SITIOS DE ESTUDIO.

Nombre	CAS	Sitios de muestreo									uso	% Frecuencia	log Kow
		Fábrica	Tecalitla	Coapatitla	Bordo	Potrero	San Sebastián	Tiliac	La Espera	Puente de Urrutia			
1,2-bencendicarb oxilato de bis(2-metilpropilo)	84-69-5		*	*		*	*			*	Plastificante	55.5	4.46
1,3-Dimetil-5,7-di-n-propiladamanano	1000215-00-5		*			*		*		*	Otro	44.4	7.71
2,3-dihidro-4-metil-1H-indol	62108-16-1			*		*			*		Metabolito vegetal	33.3	2.6
2,4,7,9-Tetrametil-5-decin-4,7-diol	126-86-3		*			*	*		*	*	Industria química	55.5	3.61
2,6-bis(1,1-dimetiletil)-4-hidroxi-4-metil-2,5-ciclohexadien-1-ona	1000401-12-0	*		*	*	*	*	*	*	*	Metabolito de plásticos	88.8	3.6
1-metil-2-Indolinona	61-70-1	*		*					*		Metabolito vegetal	33.3	0.87
2-Propanol, 1-cloro- fosfato (3:1)	13674-84-5		*			*		*	*		Retardante de flama	44.4	2.88
2,2,5-trimetil-3,4-hexanodiona	20633-03-8	*		*				*			Agente en fragancias	33.3	0.93
3-etil-3-metilheptano	17302-01-1		*	*			*				Metabolito vegetal	33.3	5.14
N-antipirininil-acetamida	83-15-8	*	*	*		*				*	Producto de excreción humana	55.5	-0.13
N,N-dietyl-4-metil-benzamida	2728 05 4		*		*	*	*	*		*	Plaguicida	66.6	2.25
Bencenacetato de 4-(1,1-dimetiletil) metilo	3549-23-3	*		*	*	*					Fragancia	33.3	3.99
Benzofenona	119-61-9	*	*		*	*			*	*	Agente en PCPs	66.6	3.14
Butil citrato	77-94-1	*			*					*	Plastificante	33.3	3.28
Cafeina	58-08-2	*		*	*	*					Agente alimenticio	44.4	0.15
Ftalato de dibutilo	84-74-2		*		*	*	*				Plastificante	44.4	4.61
Ftalato de dietilo	84-66-2	*	*	*	*		*	*	*	*	Plastificante	88.8	2.64
Dietiltoluamida	134-62-3	*		*					*		Insecticida	33.3	2.25
Acrilato de dodecilo	2156-97-0		*	*		*		*	*		Industria química	55.5	6.12
2-fenoxi-etanol	122-99-6			*	*					*	PCP	33.3	1.1
Etosuximida	77-67-8	*		*		*					Fármaco	33.3	0.51
Mandelato de etilo	774-40-3				*	*			*		Industria química	33.3	1.03
N,N-dibutil-formamida	761-65-9		*						*	*	Industria química	33.3	2.01
Galaxolida 2	1000285-26-7			*	*	*					Fragancia	33.3	6.26
Hexadecano	544-76-3		*					*	*	*	Surfactante	44.4	8.19
3,3-dimetil-hexano	563-16-6	*	*	*	*	*	*	*	*		Metabolito	77.7	4.15
Indol	120-72-9			*		*	*				Metabolito	33.3	2.05

Nombre	CAS	Sitios de muestreo									uso	% Frecuencia	log Kow
		Fábrica	Tecalitla	Coapatitla	Bordo	Potrero	San Sebastián	Tlilac	La Esperanza	Puente de Urrutia			
Ácido n-hexadecanoico	57-10-3	*		*	*					*	Surfactante	44.4	6.96
2,7-dimetil octano	1072-16-8	*		*	*	*	*		*		Metabolito	66.6	5.1
Oxalato de alil pentadecilo	1000309-24-3					*	*	*	*		Metabolito vegetal	44.4	7.14
Oxibenzona	131-57-7	*		*	*			*	*		PCP	55.5	3.52
Ftalato de 6-etil-3-octil butilo	1000315-17-4	*						*	*		Plastificante	33.3	7.4
Ácido, 2-metil-3-[4-t-butil]fenil-propanoico	1000131-87-0	*		*	*						Otro	33.3	4.61
Esqualeno	111-02-4	*		*	*						Agente cosmético	33.3	14.12
Sulfito de 2-etilhexil hexilo	1000309-20-2						*	*	*	*	Industria química	44.4	5.83
3,8-dimetil-undecano	17301-30-3		*		*				*		Metabolito humano	33.3	6.57

En la tabla 9, se observa que la frecuencia de los plastificantes en los sitios muestreados varía desde 33.3 % al 88.8 %. Cuatro de los cinco plastificantes pertenecen a la familia de los ftalatos, y se encuentran mayormente en los sitios de Fábrica y de Puente de Urrutia; es decir, en sitios donde la influencia urbana es mayor, así como la zona de descarga de Puente de Urrutia. El ftalato de dietilo, presentó una frecuencia del 88.8 %, por lo que es el principal plastificante detectado. Debido al amplio uso en diversos productos como la industria de polímeros, recubrimientos, aditivos en pinturas, antiderrapantes, fijadores, etc., es que es tan común detectar su presencia en aguas residuales. Además, con base en sus valores de log K_{ow} , los ftalatos tienden a bioacumularse en los organismos por su afinidad a los tejidos grasos. Por ello son contaminantes candidatos que monitorear mediante un análisis más fino y dirigido.

Del resto de los compuestos de uso industrial, se observa que el 2,4,7,9-tetrametil-5-decino-4,7-diol o TMDD se encuentra presente en el 55.5 % de los sitios, principalmente en sitios con impacto agrícola y en la zona de descarga de Puente de Urrutia. De la misma manera que con los ftalatos, el TMDD es ampliamente utilizado en la industria de adhesivos, agente antiderrapante, surfactante, aditivo en productos de cuidado personal etc. Debido a su amplio uso, así como estar presente en más del 50 % de los sitios analizados, además de poseer un log K_{ow} que se considera de afinidad media a tejidos grasos animales y su baja tasa de degradación (37.5 días en agua) que lo cataloga como contaminante persistente,

es que lo vuelve un candidato, junto a los ftalatos, para realizar un análisis dirigido y su constante monitoreo.

La presencia de 2-propanol, 1-cloro-, fosfato (3:1), el cual es un aditivo en recubrimientos que funciona como retardante de flama, así como en diversos materiales plásticos con la misma finalidad, fue detectado en el 44.4 % de los sitios analizados, y todos corresponden a aquellos con impacto agrícola (Tecalitla, Tlilac, La Espejera y Potrero), por lo que la fuente de este contaminante en el agua deriva de las actividades que se llevan a cabo en sitios que presenten este tipo de impacto. A pesar de que, con base en su $\log K_{ow}$ se deduzca su capacidad media para asociarse con el tejido graso animal, su valor de LC_{50} es elevado, en comparación con el de los otros contaminantes. Por lo que se requerirían muy altas concentraciones en agua para que pudiera generar un efecto adverso a la salud acuática.

El dodecil acrilato es otro contaminante que fue encontrado en el 55.5 % de los sitios analizados, a pesar de no haber mucha información acerca de su presencia en aguas residuales, es un compuesto muy utilizado sobre todo en la industria para la producción de plásticos como envases, recipientes de uso cotidiano e incluso como aditivo en recubrimientos de superficies. Se encuentra presente en todos los sitios de impacto agrícola y en un sitio de impacto urbano (Coapatitla) por lo que, su uso pudiera estar relacionado con las actividades agrícolas de la zona. Aunque este compuesto presenta una alta afinidad a bioacumularse en tejidos grasos debido a su elevado valor de $\log K_{ow}$, presenta un valor de LC_{50} relativamente bajo, por lo que se requerirían concentraciones más elevadas del mismo para generar un efecto adverso. Sin embargo es un candidato potencial para realizar posteriores análisis con la finalidad de conocer su comportamiento en matrices ambientales.

Compuestos como el ácido n-hexadecanóico, el hexano, el 3,3-dimetil-hexadecano, el 3-etil-3-metilheptano y el 2,7-dimetil-octano, se encuentran presentes entre el 44 % y el 77 % de los sitios analizados, algunos de estos derivados de hidrocarburos lineales pueden ser comúnmente utilizadas en la industria química como disolventes y/o presentes en combustibles fósiles (hexano, el 3-etil-3-metilheptano y el 2,7-dimetil-octano) y algunos también se generan a partir de la degradación natural de la materia vegetal y/o de la materia orgánica (n-hexadecanóico, el 3-etil-3-metilheptano y el 2,7-dimetil-octano). Estas sustancias se encuentran distribuidos tanto en los sitios de impacto urbano y agrícola como en los sitios de la zona ejidal distanciada de la zona urbana.

Por otro lado, las sustancias de uso doméstico/urbano se encuentran mayormente presentes en sitios de impacto urbano, principalmente en Coapatitla, aunque también se encuentran en el sitio de la zona de descarga. Los productos de cuidado personal (PCP) como la oxibenzona, el 2-fenoxi-etanol y la benzofenona se encuentran presentes entre el 33 % y 66 % de los sitios muestreados. Siendo la benzofenona quien posee una frecuencia del 66 %. Sin embargo, de estos 3 contaminantes, el que posee el valor de LC_{50} más bajo es la oxibenzona. Sin embargo, se requerirían concentraciones del orden de magnitud de ppm para poder generar un efecto negativo en la salud del medio ambiente.

Los compuestos de galaxolida 2 y 2,2,5-trimetil-3,4-hexanodiona son sustancias utilizadas como fragancias. Ambas se encuentran presentes en el 33.3 % de los sitios, en sitios de impacto urbano como Coapatitla e incluso en sitios de impacto agrícola como Tlilac. La 2,2,5-trimetil-3,4-hexanodiona posee un valor de LC_{50} bastante elevado, además de una baja afinidad a bioacumularse en tejidos grasos por ser hidrosoluble, por lo que no representa realmente un riesgo para la salud acuática. Por otro lado, la galaxolida 2, por su carácter lipofílico, y su valor de $\log K_{ow}$ grande, posee una gran capacidad para bioacumularse en tejidos grasos y a diferencia de la 2,2,5-trimetil-3,4-hexanodiona, la galaxolida tiene un valor de LC_{50} bastante más bajo, sin embargo, se requieren concentraciones 200 veces más elevada que la estimada en el presente estudio para que puedan generar un efecto adverso (Santiago, 2012).

Es importante considerar el efecto de movilidad de los contaminantes por el uso del agua de los canales para actividades de riego. Actualmente no hay estudios que aporten información respecto a la presencia de contaminantes orgánicos en los suelos agrícolas chinamperos por acción del riego; sin embargo, es posible que los contaminantes al cambiar de matriz, pueda verse modificada su movilidad hacia la matriz atmosférica por evaporación y/o volatilidad de los contaminantes y así favorecerse su dispersión en el medio ambiente.

También es importante considerar que a pesar de que los canales del Área Natural Protegida actúan como sumideros de carbono y de contaminantes, sin embargo es posible que una fracción de contaminantes también migren hacia las aguas subterráneas por acción de recarga de los mantos acuíferos mientras que otra quede retenida en la fracción de los sedimentos y de los limos y arcillas. A pesar de estas características es posible la filtración de algunos de estos contaminantes a las aguas subterráneas lo cual puede representar en algún momento un riesgo a la salud humana debido al consumo.

Por último, es importante mencionar que para tener un análisis más profundo es importante integrar en un análisis la frecuencia, la concentración y toxicidad de los contaminantes identificados, esto con la intención de poder definir a los contaminantes o la categoría de contaminantes (uso doméstico, uso industrial, “otros”, productos de degradación y agroquímicos) de mayor preocupación en el sistema. Por cuestiones de tiempo no fue posible realizar este análisis e integrarlo en este trabajo; a pesar de ello, es un análisis que se realizará en un futuro próximo durante la continuación de este trabajo.

6. CONCLUSIONES

Se desarrolló una metodología para el análisis cualitativo o *Screening* de contaminantes orgánicos en muestras de agua en las cuales se identificaron 189 contaminantes en el sistema de canales de San Gregorio Atlapulco lográndose semicuantificar un total de 171 contaminantes.

Además, con base en los datos de concentración y de toxicidad aguda, que fueron recabados mediante el uso del software ECOSAR, se determinó la unidad tóxica UT de cada contaminante, así como del valor total de UT por mezcla de contaminantes en cada sitio

La toxicidad calculada de la mezcla de contaminantes por sitio presenta el siguiente orden decreciente: Puente de Urrutia > Fábrica > Tecaltitla > Coapatitla > Tlilac > La Espejera > Potrero > El Bordo > San Sebastián. Por lo que la toxicidad de los sitios presenta una tendencia descendente en función de la lejanía a la zona urbana y la movilidad de los contaminantes en el agua por los flujos de agua.

Asimismo, se identificaron los contaminantes más tóxicos tanto en función de los parámetros ecotoxicológicos como de su concentración y su frecuencia. Los cuales fueron: TMDD, dodecil acrilato, ftalatos (DiBP, dibutil ftalato, dietil ftalato, entre otros) y Terbutol, a pesar de que este último fue identificado solamente en un sitio, sin embargo, debido a su alto potencial tóxico, su presencia en el medio amerita el dirigir esfuerzos hacia su estudio.

Por el uso del agua de los canales en actividades agrícolas como el riego, existe la posibilidad de dispersión de los contaminantes a diferentes matrices ambientales e incluso vegetales (como algunas plantas o incluso productos de hortaliza) o favorecer su movilidad

y que por sus propiedades fisicoquímicas de muchos de ellos volatilizarse o absorberse y/o acumularse en medios de carácter lipofílico.

Por ultimo, es importante reflexionar acerca de que es gracias también a los canales que se capta agua permitiendo la recarga de los mantos acuíferos, sin embargo, a pesar de las características de retención de sustancias en la materia orgánica o incluso sobre las fracciones minerales, es posible que debido a la constante descarga de estas sustancias al medio acuático y saturación de las fracciones mencionadas, puedan empezar a filtrarse y migrar hacia las aguas subterráneas. Por lo que es importante dirigir la mirada al estudio de estas sustancias en aguas de pozo debido a que en algún punto podría representar en algún momento un riesgo a la salud humana debido al consumo.

7. APORTES:

Este es el primer inventario de contaminantes orgánicos -no objetivo- en agua provenientes de la zona lacustre de San Gregorio Atlapulco, Xochimilco mediante una metodología de análisis cualitativo, que permite de forma exploratoria, generar un diagnóstico rápido ya con la metodología montada (aproximadamente dos semanas, desde el muestreo hasta el análisis cromatográfico) acerca de la identidad de los contaminantes presentes en un cuerpo de agua.

Se obtuvo información acerca de la concentración aproximada de los contaminantes mediante el uso de estándares internos o compuestos modelo mediante la comparación estructural de dichas sustancias con los contaminantes identificados.

Mediante la implementación del software ECOSAR y la recopilación de la información ecotoxicológica de datos como el LC_{50} y el $\log K_{ow}$, se generó un indicador de la toxicidad (UT) para cada sitio sin la necesidad de realizar ensayos experimentales de ecotoxicidad.

8. LIMITACIONES:

Debido a que el análisis químico fue realizado mediante el uso de la cromatografía de gases acoplado a espectrometría de masas, la identificación de los contaminantes presentes se limitó a compuestos con ciertas características que les permiten ser detectados como: bajo peso molecular, lipofílicos, no polares y relativamente volátiles. Por lo que contaminantes

solubles en agua, iónicos y de alto peso molecular, no fueron determinados mediante el uso de esta técnica de análisis.

El estudio realizado es transversal por lo que para establecer una lista de contaminantes principales que sean sometidos a monitoreo constante, por lo que el estudio debe de contemplar la realización de muestreos tanto en temporada de estiaje y temporada de lluvias.

Debido a la gran variabilidad estructural presente en los contaminantes, es necesario proponer más estándares o compuestos modelo, que permitan establecer una mejor relación estructural y/o fisicoquímica para obtener un mejor factor de respuesta y una semicuantificación más precisa.

Debido al tiempo, no fue posible llevar a cabo la validación del método, por lo que, a futuro, se espera poder hacer los correspondientes análisis que permitan validar los parámetros analíticos necesarios.

Debido al número de sitios de muestreo ($n = 9$) y también al hecho de que los resultados generados en este proyecto corresponden a un muestreo realizado solamente en la época de estiaje; no es posible hablar de una representatividad del sitio de estudio ni hacer inferencias, por lo que es necesario realizar más muestreos con una mayor cantidad de sitios de muestreo para abarcar una mejor área del sitio.

Por último, el estudio solo contempla parámetros de toxicidad aguda, por lo que, para realizar un estudio más completo, es necesario integrar información de toxicidad crónica, ya que existen muchos contaminantes que pueden generar efectos adversos de manera no inmediata, los cuales pueden repercutir en la dinámica de las poblaciones acuáticas, comprometiendo en el mediano y largo plazo la salud del sistema.

BIBLIOGRAFÍA

- Cleuvers, M. (2005). Initial risk assessment for three beta-blockers found in aquatic environment. *Chemosphere*, 59, 199-205.
- Lacey, R. F. (1986). Deconvolution of overlapping chromatographic peaks. *Anal Chem.*, 58(7), 1404-1410.
- Carter, D. (2018). Waste water Characterization for the ISS Water Processor. *SAE TECHNICAL PAPER SERIES*, 107(1), 473-480.
- Cash, G. N. (2001). ECOWIN v0.99g -ECOSAR classes for MS Windows.. US EPA, OPPT. *Risk Assessment Division*. Washington, DC.
- Lipnick, R. L. (1986). Charles Ernest Overton: Narcosis studies and a contribution to general pharmacology. *TIPS*, 7, 161-164.
- Lipnick, R. L. (1995). Structure-activity relationships. In G. M. Rand, *Fundamentals of aquatic Toxicology* (2da Ed. ed., pp. 609, 655). Washington DC: Taylor & Francis.
- Chiu, C. W. (2010). Trace organics in Arizona surface and wastewaters. In H. R. U., *Contaminants of Emerging Concern in the Environment: Ecological and Human Health Considerations* (1ra ed., Vol. 1048, pp. 81-117). Arizona, USA: American Chemical Society.
- Liu, Y. C. (2013). Occurrence and removal characteristics of phthalate esters from typical water sources in northeast China. *Journal of Analytical Methods in Chemistry*, 2013(1), 1-8.
- Communities, C. o. (2016). *Community Strategy for Endocrine Disruptors -A range of substances suspected of interfering with the hormone systems of humans and wildlife*. Retrieved Noviembre 27, 2018, from European Commission: http://ec.europa.eu/environment/chemicals/endocrine/documents/index_en.htm
- Coronado, M. e. (2008). Estrogenic activity and reproductive effects of the UV-filter oxybenzone (2-hydroxy-4-methoxyphenyl-methanone) in fish. *Aquat Toxicol.*, 90(3), 182-187.
- Abe, T. S. (2001). Embryonic development assay with *Daphnia magna*: application to toxicity of anilines derivates. *Chemosphere*, 45, 487-495.
- Aguilar, I. A. (2010). *Calidad del agua: Un enfoque multidisciplinario* (1ra ed.). Ciudad de México, México: Instituto de Investigaciones Económicas, UNAM.
- Ambiental, C. M. (2006). *El agua en México: lo que todas y todos debemos de saber*. Ciudad de México, México: Fondo de Educación Ambiental.
- Antúnez, X. D. (2014). *Fundamentos de química ambiental Vol. II "Química de la contaminación: Técnicas de remediación y evaluación del riesgo ambiental"* (1ra ed.). Madrid: Síntesis.
- Badoil, L. B. (2009). Characterization of volatile and semivolatile compounds in waste landfill leachates using stir bar sorptive extraction-GC/MS. *Anal Bioanal Chem*, 393(3), 1043-1054.

- Baken, S. e. (2011). Metal complexation properties of freshwater dissolved organic: matter are explained by its aromaticity and by anthropogenic ligands. *Environmental Science and Technology*, 45(7), 2584-2590.
- Benfenati, E. B. (2003). Emerging organic contaminants leachates from industrial waste landfills and industrial effluent. *Trends in analytical Chemistry*, 22(10), 757-765.
- Bradbury, S. e. (2003). Overview of data and conceptual approaches for derivation of Quantitative Structure-Activity Relationships for ecotoxicological effects of organics chemicals. *Environmental Toxicology and Chemistry*, 22(8), 1789-1798.
- Bulich, A. (1982). A practical and reliable method for monitoring the toxicity of aquatic samples. *Process Biochem*, 17(2), 45-47.
- Bu, Q. L. (2015). Screening for over 1000 organic micropollutants in surface water and sediments in the Liaohe River watershed. *Chemosphere*, 138, 519-525.
- Bu, Q. (2013). Review of screening systems for prioritizing chemical substances. *Environ Sci Technol.*, 43(10), 1011-1041.
- Bu, Q. W. (2014). A high throughout semi-quantification method for screening organic contaminants in river sediments. *J Environ Manage*, 143, 135-139.
- Bu, Q. W. (2014). Identification and ranking of the risky organic contaminants in the source water of the Dankiangkou reservoir. *Front. Environ. Sci. Eng.*, 8, 42-53.
- Burger, A. E. (2006). First phase of an endocrine research programme for South African water systems. *Water Pr Technol.*, 1(2), 1-9.
- Dalkmann, P. e. (2012). Accumulation of pharmaceuticals, Enterococcus, and resistance genes in soils irrigated with wastewater from zero to 100 years in Central Mexico. *PLOS ONE*, 7(9), 1-10.
- Dom, N. K. (2010). Aquatic multi-species acute toxicity of (chlorinated) anilines: Experimental versus predicted data. *Chemosphere*, 81, 177-186.
- Dsikowitzky, L. B. (2015). Identification of characteristic organic contaminants in wastewaters from modern paper production sites and subsequent tracing in a river. *Journal of Hazardous Materials*, 300, 254-262.
- Dsikowitzky, L. e. (2016). First comprehensive screening of lipophilic organic contaminants in surface waters of the megacity Jakarta, Indonesia. *Mar Pollut Bull.*, 110(2), 654-664.
- Du, X. Z. (2013). Spectral deconvolution for gas chromatography mass spectrometry based metabolomics: current status and future perspectives. *Computational and Structural Biotechnology Journal*, 4, 1-10.
- Ebele, A. J.-E. (2016). Pharmaceuticals and personal care products (PPCPs) in the freshwater aquatic environment. *Emerg Contam*, 3(1), 907-939.

- EPA. (2018, Septiembre 19). *Summary of the Toxic Substances Control Act*. Retrieved Octubre 21, 2018, from United States Environmental Protection Agency: <https://www.epa.gov/laws-regulations/summary-toxic-substances-control-act>
- Eriksson, E. A. (2003). Household chemicals and personal care products as sources for xenobiotic organic compounds in grey wastewater. *Water SA*, 135-146.
- Eriksson, E. A. (2003). Household chemicals and personal care products as sources for xenobiotic organic compounds in grey wastewater. *Water SA*, 29, 135-146.
- Flint, S. M. (2012). Bisphenol A exposure, effects, and policy: a wildlife perspective. *J Env Manag.*, 104, 19-34.
- FAO. (2018, 18 04). *Organización de las Naciones Unidas para la Alimentación y la Agricultura*. Retrieved 10 15, 2018, from Oficina Regional de la FAO para América Latina y el Caribe: <http://www.fao.org/americas/noticias/ver/es/c/1118852/>
- Fiege, H. W. (2003). Phenol derivates. In *ULLMANN'S Encyclopedia of Industrial Chemistry* (6ta ed., p. 567). Michigan, USA: John Wiley & Sons.
- Geissen, V. M. (2015). Emerging pollutants in the environment: A challenge for water resource management. *International Soil and Water Conservation Research*, 3(1), 57-65.
- González, M. B. (2010). *Contaminación del agua, Colonia Santa Cruz Meyehualco. Delegación Iztapalapa*. Ciudad de México, México: UNAM.
- GPPA. (2012). *Tendencias y propuestas sobre el hundimiento de la zona del ANP "Ejidos de Xochimilco y San Gregorio Atlapulco"*. PAOT, Ciudad de México.
- Grigoridaou, A. G. (2004). Organic pollutants in the industrial area east of Kavala, Northern Greece. *Bulletin of the Geological of Greece*, 36(1), 254-262.
- Gómez, M. J.-R. (2009). A new gas chromatography/mass spectrometry method for the simultaneous analysis of target and non-target organic contaminants in waters. *J Chromatogr A.*, 1216(18), 4071-4082.
- González-Pozo, A. (2016). *Las chinampas: Patrimonio Mundial de la Ciudad de México*. Ciudad de México, México: Universidad Autónoma Metropolitana.
- He, K. E. (2018). Determination of Caffeine and Its Metabolites in Wastewater Treatment Plants Using Solid-Phase Extraction and Liquid Chromatography-Tandem Mass Spectrometry. *Analytical Sciences*, 34(3), 349-354.
- Hespanhol, I. P. (1994). WHO Guidelines and National Standards for Reuse and Water Quality. *Wat. Res.*, 28(1), 119-124.
- Hilton-Taylor, C. (2009). *Wildlife in a changing world*. Retrieved September 19, 2018, from International Union for Conservation of Nature: <http://www.iucn.org/dbtw-wpd/html/RL-2009-001/cover.html>

- Hijosa, M. M. (2010). Assessment of full-scale natural systems for the removal of PPCPs from wastewater in small communities. *Water Research*, 44(5), 1429-1439.
- Houtman, C. e. (2004). Identification of estrogenic compounds in fish bile using bioassay-directed fractionation. *Environ. Sci. Technol.*, 38(23), 6415-6423.
- Huang, Y. D. (2003). Occurrence and effects of endocrine disrupting chemicals in the environment. *Pract. Period. Hazard. Toxic Radioact. Waste Manage*, 7(4), 241-252.
- INEGI. (1997). *Cuaderno Estadístico Delegacional. Xochimilco. Ciudad de México*. Ciudad de México.
- Ioana, F. e. (2016). Spatial and seasonal variation of organic pollutants in surface water using multivariate statistical techniques. *Water Science & Technology*, 74, 1726-1735.
- Jackson, J. S. (2008). Sources of endocrine disrupting chemicals in urban wastewater, Oakland, CA. *Sci Total Env.*, 405(1-3), 153-160.
- Kolpin, D. F. (2002). Pharmaceuticals, Hormones, and Other Organic Wastewater Contaminants in U.S. Streams. *Environ. Sci. Technol.*, 36(6), 1202-1211.
- Krzeminski, P. S. (2017). Occurrence of UV filters, fragrances and organophosphate flame retardants in municipal WWTP effluents and their removal during membrane post-treatment. *J Hazard Mater*, 323, 166-176.
- Maletz, S. F. (2013). In vitro characterization of the effectiveness of enhanced sewage treatment processes to eliminate endocrine activity of hospital effluents. *Water Res.*, 47(4), 1545-1557.
- Nabholz, V. J. (1993). Validation of Structure Activity Relationships used by the USEPA's Office of Pollution Prevention And Toxics for the Environmental Hazard Assessment of Industrial Chemicals. In J. W. Gorsuch, *Environmental Toxicology and Risk Assessment* (Vol. 2, p. 1216). Philadelphia: ASTM STP.
- Nakada, N. T. (2006). Pharmaceutical chemicals and endocrine disrupters in municipal wastewater in Tokyo and their removal during activated sludge treatment. *Water Research*, 40(17), 3297-3303.
- NORMAN. (2016, February). *Emerging Substances*. Retrieved October 11, 2018, from NORMAN, Network of Reference laboratories, research centres and related organisations for monitoring of emerging environmental substances: <https://www.norman-network.net/?q=node/19>
- Pan, S. K. (2014). Target and screening analysis of 940 micro-pollutants in sediments in Tokyo Bay, Japan. *Chemosphere*, 99, 109-116.
- Peck, A. M. (2006). Analytical methods for the determination of persistent ingredients of personal care products in environmental matrices. *Anal Bioanal Chem*, 386(4), 907-939.
- Pérez-Carrera, E. L. (2007). Simultaneous determination of pesticides, polycyclic aromatic hydrocarbons and polychlorinated biphenyls in seawater and interstitial marine water

- samples, using stir bar sorptive extraction thermal desorption-gas chromatography-mass spectrometry. *J. Chromatogr A.*, 1170(1-2), 82-90.
- Ponce de Leon-Hill, C. A.-H. (2017). *Modelos conceptuales para el análisis del impacto ambiental de contaminantes. Un sitio de caso: Xochimilco*. Ciudad de México, México: Facultad de Ciencias, UNAM.
- Reuschenbach, P. S. (2008). ECOSAR model performance with a large test set of industrial chemicals. *Chemosphere*, 71(10), 1986-1995.
- Réveillé, V. M. (2003). Characterisation of sewage sludge-derived organic matter: lipids and humic acids. *Organic Geochemistry*, 34(4), 615-627.
- Rivera-Utrilla, J. S.-P. (2013). Pharmaceuticals as emerging contaminants and their removal from water. A review. *Chemosphere*, 93(7), 1268-1287.
- Sanderson, H. J. (2003). Probabilistic hazard assessment of environmentally occurring pharmaceuticals toxicity to fish, daphnids and algae by ECOSAR screening. *Toxicology Letters*, 144, 383-395.
- Santiago, M. J. (2012). Oxidative and photochemical processes for the removal of galaxolide and tonalide from wastewater. *Water Research*, 46, 4435-4447.
- SEMARNAT. (2015, November 25). *Convenio de Estocolmo sobre Contaminantes Orgánicos Persistentes*. Retrieved September 2018, from Secretaria de Medio Ambiente y Recursos Naturales: <https://www.gob.mx/semarnat/documentos/documento-oficial-del-convenio-de-estocolmo>
- Snyder, S. K. (2007). Occurrence and removal of pharmaceuticals and endocrine disruptors in south Korea surface, drinking and waste waters. *Water Research*, 41(5), 1013-1021.
- Sostenible, A. d. (2016). *Objetivos de Desarrollo Sostenible*. Retrieved September 5, 2018, from Programa de las Naciones Unidas para el Desarrollo: <https://www.undp.org/content/undp/es/home/sustainable-development-goals/resources.html>
- Sousa, J. B. (2018). A review on environmental monitoring of water organic pollutants identified by EU guidelines. *J. Hazard Mater*, 344, 146-162.
- Suzuki, T. K. (1998). Estimation of leachability and persistence of pesticides at golf courses from point-source monitoring and model to predict pesticide leaching to groundwater. *Environ. Sci. Technol.*, 32(7), 920-929.
- Tijani, J. O. (2016). Pharmaceuticals, endocrine disruptors, personal care products, nanomaterials and perfluorinated pollutants: a review. *Environ Chem Lett.*, 14(1), 27-49.
- UNICEF. (2008, May 2008). *Water, Sanitation and Hygiene Annual Report*. Retrieved September 2018, from UNICEF: http://www.unicef.org/spanish/wash/files/UNICEF_WASH_2008_Annual_Report_Final_27_05_2009.pdf

- Usma, J. G. (2012). Contaminantes emergentes en aguas, efectos y posibles tratamientos. *Producción + limpia*, 7, 52-73. Retrieved from <http://repository.lasallista.edu.co:8080/ojs/index.php/pl/article/view/265>
- Van Doorslaer, X. D. (2014). Fluoroquinolone antibiotics: An emerging class of environmental micropollutants. *Sci Total Environ*, 500-501, 250-261.
- Vincze, K. G. (2014). (Eco)toxicological effects of 2,4,7,9-tetramethyl-5-decyne-4,7-diol (TMDD) in zebrafish (*Danio rerio*) and permanent fish cell cultures. *Environ Sci Pollut Res*, 21(13), 8233-8241.
- Wang, H. W. (2003). Persistent organic pollutants in water and surface sediments of Taihu Lake, China and risk assessment. *Chemosphere*, 50(4), 557-562.
- Wylie, P. (2006). *Screening for 171 Volatile Organic Air Pollutants Using GC/MS with Deconvolution Reporting Software and a New Indoor Air Toxics Library*. USA: Agilent Technologies, Inc.
- Yuan, Y. L. (2002). Occurrence and microbial degradation of phthalate esters in Taiwan river sediments. *Chemosphere*, 49(10), 1295-1299.
- Zambrano, G. L. (2014). *Análisis del estado de conservación ecológica del sistema lacustre chinampero de la superficie reconocida por la UNESCO como Sitio Patrimonio de la Humanidad en Xochimilco, Tláhuac y Milpa alta*. UNAM, Programa Universitario de Medio Ambiente, Ciudad de México.

ANEXO I

Contaminantes identificados en el sitio de Tecaltitla.

Compuesto	Match	LC50 (mg L ⁻¹) 48 h	log Kow	Uso	% área	Concentración (µg L ⁻¹)	UT
2-Ciclohexen-1-ona	75.0	340	1.1995	Industria química	0.37	0.05±0.01	1.64E-07
N,N-dibutylformamida	83.2	41.7	2.0129	Industria química	1.46	0.15±0.06	3.81E-06
3-Etil-3-metilheptano	91.2	0.134	5.1413	Metabolito vegetal	2.31	/	/
3,3-dimetilhexano	89.7	0.748	4.1591	Agente en fragancias	1.16	/	/
anhídrido 4-clorobutanóico	75.3	130	1.895	Otro	0.38	0.06±5.19E-03	5.04E-07
Metil ciclohexano	73.5	1.97	3.5932	Industria química	2.18	0.36±0.07	1.86E-04
Butanoato de butilo	76.0	12	2.8286	Aditivo en alimentos	0.48	0.12±0.02	1.04E-05
2,4,7,9-Tetrametil-5-decin-4,7-diol	85.8	14.7	3.609	industria química	3.11	/	/
Ciclohexil etanol	73.7	17.6	2.6195	Otro	0.79	0.12±0.05	7.22E-06
3,8-dimetil-undecano	88.6	0.01	6.5787	Metabolito humano	2.60	0.41±0.10	4.18E-02
N,N-dietil-4-metilbenzamida	90.0	31.4	2.2579	Plaguicida	1.46	0.15±0.04	5.06E-06
Ftalato de dietilo	91.1	24.2	2.6456	Plastificante	3.54	0.56±0.05	2.35E-05
1,2-dimetil-3-pentil-4-propil-ciclohexano	87.8	0.0011	7.7926	Otro	3.27	0.52±0.22	4.78E-01
Benzofenona	78.9	8.81	3.1471	Agente en PCPs	0.24	0.02±7.83E-03	2.57E-06
4-metil-bencensulfonamida	70.5	383	0.9176	Agente en la industria cosmética	0.86	0.19±0.11	5.11E-07
N-butyl-bencensulfonamida	76.8	31.7	2.3095	Plastificante	0.31	0.07±0.09	2.25E-06
2-Propanol, 1-cloro- fosfato (3:1)	79.9	25.1	2.8865	Retardante de flama	1.81	0.41±0.18	1.63E-05
1,2-bencendicarboxilato de bis(2-metilpropilo)	97.2	2.17	4.463	Plastificante	31.22	5.01±1.24	2.31E-04
2,3,4,5-tetrahidro-1,1,3,3-tetrametil-1H-pirido(4,3-b) indol	80.6	2.22	2.6119	Metabolito vegetal	0.48	0.04±4.45E-03	2.01E-05
2,9-dimetil decano	85.9	0.025	6.0876	Metabolito vegetal	2.88	0.46±0.19	1.85E-02
1,3-Dimetil-5,7-di-n-propiladamantano	79.2	0.0014	7.7154	Otro	5.48	0.51±0.17	3.64E-01
N,N'-metanotetraylbis-2-propanamina	73.0	0.909	4.1113	Metabolito vegetal	0.40	0.08±0.02	9.74E-05
ftalato de dibutilo	93.4	1.75	4.61	Plastificante	12.85	2.06±0.65	1.18E-03
Oxalato de alil octadecilo	92.2	0.0072	8.6171	Metabolito vegetal	5.09	1.32±3.42E-03	1.83E-01
Hexadecano	90.4	0.00051	8.199	Industria química	6.08	0.97±0.04	1.9177
1,14-Tetradecanodiol	81.1	0.525	4.6936	Industria química	0.91	0.14±0.10	2.78E-04
1-etil-1-metil-Ciclopentano	78.9	0.918	4.0467	Otro	1.13	0.18±0.02	1.98E-04
N-antipirinin acetamida	87.0	6.91	-0.1303	Metabolito humano de fármaco	1.07	0.23±0.09	3.37E-05
Acrilato de dodecilo	90.9	0.719	6.1299	Industria química	2.29	0.36±7.50E-03	5.12E-04
2,3,3-trimetil-Pentano	82.5	0.865	4.0856	Otro	1.32	/	/
Carbamazepina	85.2	14.1	2.2484	Fármaco	1.40	0.13±0.07	9.28E-06
1-[1,2,4]Triazol-1-iletanona	72.7	496	-0.431	Metabolito vegetal	0.91	0.19±0.03	3.97E-07
UT mezcla							3.0098

Contaminantes identificados en Tlilac.

Compuesto	Match	LC50 (mg L⁻¹) 48 h	log Kow	grupo	% área	Concentración (µg L⁻¹)	UT
N,N-bis(1-metiletil)-1,2- etanodiamina	73.3	15.9	0.8761	Industria química	1.99	0.12±8.92E-03	7.97E-06
1-metil-5-(1-metiletil)-, (1.alfa.,3.beta.,5.beta.,7.alfa.)-4,8- Dioxatriciclo[5.1.0.0(3,5)]octano	70.8	10.6	1.9593	Otro	1.83	0.11±0.09	1.04E-05
Butanoato de butilo	73.4	12	2.8286	Aditivo en alimentos	0.66	0.06±0.02	5.41E-06
Isoetarina	70	12.3	1.4185	Fármaco	0.67	0.11±0.10	9.31E-06
Fosfato de 2-cloroetenil dimetilo	77.3	805	0.1106	Industria química	1.84	0.22±0.12	1.95E-07
2,6-bis(1,1-dimetiletil)-4-hidroxi-4- metil-2,5-ciclohexadien-1-ona	80.6	4.75	3.6007	Metabolito de plásticos	10.51	0.59±0.09	1.24E-04
2,4-dimetildecano	72.9	0.025	6.0876	Agente en fragancias	1.24	0.07±0.03	3.01E-03
N,N-dietil-4-metil-benzamida	96.6	31.4	2.2579	Insecticida	14.02	0.57±0.06	1.82E-05
Ftalato de dietilo	86.9	24.2	2.6456	Plastificante	3.11	0.18±0.14	7.77E-06
3,3-dimetilhexano	82.6	0.748	4.1591	Agente en fragancias	2.94	/	/
2-Propanol, 1-cloro-fosfato (3:1)	76.8	25.1	2.8865	Retardante de flama	3.47	0.29±5.53E-03	1.17E-05
Oxalato de alil pentadecilo	90.5	0.054	7.1438	Metabolito vegetal	6.07	0.59±0.01	1.09E-02
1,3-Dimetil-5,7-di-n- propiladamantano	76.2	0.0014	7.7154	Otro	8.19	0.28±0.15	2.04E-01
Ftalato de 6-etil-3-octil butilo	77.5	0.039	7.4096	Metabolito vegetal	1.53	0.09±0.02	2.37E-03
Oxibenzona	88.7	2.4	3.5248	Agente en PCPs	10.27	0.35±9.12E-04	1.49E-04
Ciclotetradecano	91.2	0.0038	7.1044	Metabolito vegetal	9.61	0.33±0.09	8.83E-02
Acrilato de dodecilo	89.1	0.719	6.1299	Industria química	6.39	0.38±0.07	5.37E-04
Sulfonato de 2-etilhexil hexilo	80.6	0.067	5.8301	Industria química	1.72	0.14±0.02	2.18E-03
1,7-Dimetil-4-(1- metiletil)ciclodecano	82.5	0.0028	7.3015	Metabolito vegetal	3.88	0.23±0.01	8.38E-02
Hexadecano	87.6	0.00051	8.199	Industria química	4.30	0.26±0.01	5.09E-01
Ftalato de di(6-metilhept-2-eno)	85.1	0.013	8.2448	Otro	3.87	0.23±4.6E-03	1.79E-02
2,2,5-trimetil-3,4-hexanodiona	78.6	598	0.9345	Agente en fragancias	1.76	/	/
UT_{mezcla}							0.9241

Contaminantes identificados en Potrero.

Compuesto	Match	LC50 (mg L ⁻¹) 48 h	log Kow	Uso	% área	Concentración (µg L ⁻¹)	UT
2-Ciclohexen-1-ona	75.0	340	1.1995	Industria química	0.19	0.04±3.40E-03	1.19E-07
Propanoato de (Z)-3-Hexen-1-ol	81.9	8.73	3.1047	Agente en cosméticos y fragancias	0.24	0.09±7.33E-03	1.04E-05
Etosuximida	78.0	50.1	0.5112	Fármaco	0.44	0.09±6.44E-03	1.87E-06
3,3a,4,6,7,7a-hexahidro-4,7-metano-5H-inden-5-ona	82.5	64.6	2.0346	Otro	1.56	0.33±0.02	5.18E-06
Indol	86.0	7.1	2.0548	Metabolito vegetal y animal	3.29	0.96±0.09	1.36E-04
3-Nonen-5-ona	70.3	18.7	2.7852	Agente en fragancias	0.84	0.66±0.60	1.08E-05
Mandelato de etilo	75.2	204	1.0337	Industria química	0.78	0.94±0.89	1.42E-06
Propanoato de 2-metilhexilo	75.2	3.84	3.7373	Aditivo en alimentos	0.50	0.18±0.09	4.84E-05
2,4,7,9-Tetrametil-5-decin-4,7-diol	83.2	14.7	3.609	Industria química	1.92	/	/
1-fenil-1-decanol	89.0	0.071	5.4219	Agente saborizante	0.51	0.11±2.13E-04	1.66E-03
4-metilbenzamida	82.9	148	1.2854	Metabolito del DEET	0.12	0.02±1.36E-03	1.41E-07
2,6-bis(1,1-dimetil-4-hidroxi-4-metil-2,5-ciclohexadien-1-ona	90.7	4.58	3.7187	Metabolito de plásticos	6.24	1.33±0.09	2.91E-04
2,3-dihidro-4-metil-1H-Indol	72.9	18.8	2.6055	Metabolito vegetal	1.07	0.69±0.15	3.69E-05
2,3-dihidro-1H-Indol-1-carboxaldehido	73.2	130	1.394	Metabolito vegetal	0.47	0.30±0.11	2.34E-06
metilfosfonofluoridato de 2-metil-2-propilo	70.0	690	0.7626	Derivado de plaguicida organofosforado	0.59	0.19±2.69E-03	2.81E-07
3,3-dimetilhexano	80.4	0.748	4.1591	Agente en fragancias	0.32	/	/
Encainida	70.0	0.022	6.2396	Fármaco	0.34	0.05±0.03	2.46E-05
N,N-dietil-4-metilbenzamida	90.7	31.4	2.2579	Insecticida	2.22	0.34±0.03	1.10E-05
Ftalato de 4-bromofeniletilo	77.6	3.64	4.2612	Plastificante	0.61	0.14±3.74E-03	3.87E-05
2,7-dimetiloctano	87.5	0.144	5.1054	Metabolito vegetal e hidrocarburo	0.51	/	/
Benzofenona	73.3	8.81	3.1471	Agente en PCPs	0.33	0.04±7.72E-03	4.99E-06
3-butil-, 1-oxidopiridina	75.0	948	0.6846	Derivado de la nicotina presente en el tabaco	0.20	0.12±6.58E-03	1.37E-07
o-(4-metoxibezoil)-o'-(5-clorovaleril)-1,2-Bencendiol	74.8	0.961	5.2054	Otro	0.51	0.19±6.41E-03	1.98E-04
1H-Pirazolo[3,4-d]pirimidin-4-amina	74.4	7.01	-0.7259	Derivado de fármaco	0.39	0.11±0.03	1.64E-05
Hexestrol	70.8	0.196	5.5962	Estrógeno (fármaco)	0.46	0.06±0.02	3.13E-04
Bromuro de 2-bromo-2-metilpropanoilo	71.6	907	0.832	Industria química	0.15	0.02±6.73E-03	2.89E-08
2-propanol, 1-cloro-fosfato (3:1)	76.4	25.1	2.8865	Retardante de flama	1.21	0.39±0.03	1.56E-05
Oxalato de alil pentadecilo	89.1	0.054	7.1438	Metabolito vegetal	1.59	0.58±0.04	1.09E-02
alfa.-etil-bencenetanol	70.0	27.4	2.4753	Fragancia	0.29	0.06±2.64E-03	2.50E-06
Cafeína	91.5	164	0.1564	Agente en alimentos	4.35	1.34±0.04	8.20E-06
Galaxolida 2	77.9	0.027	6.2604	Agente en fragancias	1.78	0.41±0.01	1.51E-02
1,2-bencendicarboxilato de bis(2-metilpropilo)	98.0	2.17	4.463	Plastificante	32.97	7.56±0.34	3.48E-03
1,3-Dimetil-5,7-di-n-propiladamantano	80.2	0.0014	7.7154	Otro	3.97	0.52±0.10	3.77E-01
Ftalato de dibutilo	93.8	1.75	4.61	Plastificante	12.01	2.75±0.33	1.57E-03

Compuesto	Match	LC50 (mg L ⁻¹) 48 h	log Kow	Uso	% área	Concentración (µg L ⁻¹)	UT
3,6,9,12-Tetraoxahexadecan-1-ol	81.8	1.01E+04	-0.2566	Industria química	12.87	2.95±1.39	2.92E-07
treo-2,5-Dimetil-2-(2-metil-2-tetrahidrofuril)tetrahidrofurano	70.0	21.1	2.7098	Otro	0.19	0.04±0.01	2.12E-06
3,5-dimetil-4-octanona	79.4	9.05	3.0557	Metabolito vegetal	0.22	0.05±7.47E-03	5.95E-06
N-antipirínil acetamida	77.1	6.91	-0.1303	Metabolito humano de fármaco	0.64	0.19±0.08	2.87E-05
Acrilato de dodecilo	89.2	0.719	6.1299	Industria química	2.31	0.53±0.07	7.37E-04
Tris(1,3-dicloroisopropil)fosfato	75.3	10.9	3.6485	Retardante de flama	0.62	0.20±0.01	1.86E-05
UT mezcla							0.4147

Contaminantes identificados en La Espejera.

Compuesto	Match	LC50 (mg L ⁻¹) 48 h	log Kow	Uso	% área	Concentración (µg L ⁻¹)	UT
N,N-dibutilformamida	71.4	41.7	2.0129	Industria química	1.62	0.09±0.02	2.37E-06
Propionato de 3-hidroxi-2-isopropilideno	74.3	213	0.4838	Otro	1.96	0.28±0.12	1.34E-06
Acetato de 1,3,3-trimetilo-2-Oxabiciclo[2.2.2]octan-6-ol	70.5	24.7	2.6003	Metabolito vegetal	5.31	0.77±0.01	3.12E-05
2-[[2-Metil-endo-2-norbornil]oxi]-tetrahidropirano	78.6	3.38	3.7052	Otro	0.43	0.03±7.96E-03	1.16E-05
Mandelato de etilo	72.5	204	1.0337	Industria química	0.79	0.11±0.01	5.65E-07
(E)-2-metilbut-2-enoato de 2,4-dimetilpentan-3-ilo	72.0	1.14	4.4137	Otro	4.28	0.62±1.31E-04	5.46E-04
Propanoato de 2-metil-, 2-etil-3-hidroxihexilo	76.8	12	3.1077	Metabolito vegetal	1.29	0.18±0.12	1.57E-05
4-Metil-2-nitroimidazo	72.3	73.9	0.4236	Metabolito vegetal	1.06	0.12±0.07	1.75E-06
2,4,7,9-Tetrametil-5-decin-4,7-diol	77.1	14.7	3.609	Industria química	4.25	0.38±0.02	2.61E-05
1,4-dietil-1,4-dimetil-2,5-Ciclohexadieno	74.1	0.081	5.47	Otro	0.74	0.07±8.08E-04	8.73E-04
Fenampromida	71.0	1.8	2.8935	Industria farmacéutica	0.52	0.03±0.02	1.79E-05
2,6-bis(1,1-dimetiletil)-4-hidroxi-4-metil-2,5-ciclohexadien-1-ona	88.1	4.75	3.6007	Metabolito de plásticos	12.46	1.04±0.09	2.20E-04
2-Bromo-2-nitropropano	81.3	98.9	1.8824	Agente en PCPs	0.26	0.06±0.01	6.69E-07
2,3-dihidro-4-metil-1H-Indol	85.2	18.8	2.6055	Metabolito vegetal	2.71	0.68±0.01	3.65E-05
1-metil-2-Indolinona	71.7	361	0.8705	Metabolito vegetal	0.61	0.05±6.93E-03	1.43E-07
Dietiltoluamida	90.7	31.4	2.2579	Insecticida	8.64	0.52±0.15	1.68E-05
Ftalato de dietilo	91.1	24.2	2.6456	Plastificante	5.34	0.48±0.03	1.99E-05
3,3-dimetilhexano	88.1	0.748	4.1591	Agente en fragancias	1.00	/	/
Benzofenona	78.7	8.81	3.1471	Agente en PCPs	0.39	0.02±9.51E-03	2.366E-06
2,7-dimetil octano	86.6	0.144	5.1054	Metabolito vegetal e hidrocarburo	1.39	/	/
(E,E)-3,7,11,15-Tetrametilhexadeca-1,3,6,10,14-penteno	71.0	0.000058	9.3918	Metabolito vegetal	5.47	/	/
2-Propanol, 1-cloro-fosfato (3:1)	72.4	25.1	2.8865	Retardante de flama	2.32	0.29±4.94E-04	1.17E-05
Ftalato de 6-etil-3-octil butilo	80.9	0.039	7.4096	Metabolito vegetal	2.99	0.27±0.02	6.93E-03
Carbamato de (1-metiletil)-, 2-[[[aminocarbonil]oxi]metil]-2-metilpentilo	72.0	43.1	2.3572	Fármaco	3.80	0.38±0.07	8.99E-06
Oxalato de alil pentadecilo	89.3	0.054	7.1438	Metabolito vegetal	4.56	0.66±0.07	1.22E-02

Compuesto	Match	LC50 (mg L ⁻¹) 48 h	log Kow	Uso	% área	Concentración (µg L ⁻¹)	UT
Oxibenzona	76.1	2.4	3.5248	Agente en PCPs	0.68	0.03±8.5E-03	1.48E-05
Oxalato de alil hexadecilo	89.8	0.028	7.6349	Producto de degradación	4.83	0.70±6.22E-03	2.50E-02
Sulfonato de 2-etilhexilhexilo	79.5	0.067	5.8301	Industria química	1.67	0.21±7.1E-04	3.17E-03
3,8-dimetilundecano	85.7	0.01	6.5787	Metabolito de origen humano e hidrocarburo	3.40	0.30±0.07	3.06E-02
Hexadecano	88.2	0.00051	8.199	Industria química	3.47	0.31±0.04	6.14E-01
Acrilato de dodecilo	88.5	0.719	6.1299	Industria química	4.56	0.41±0.08	5.72E-04
N-9-fenantrenil Acetamida	70.2	3.78	3.4517	Otro	1.12	0.05±0.01	1.56E-05
treo-2,5-Dimetil-2-(2-metil-2-tetrahydrofural)tetrahydrofurano	74.0	21.1	2.7098	Otro	0.23	0.02±1.17E-03	9.92E-07
Trans-1,4-dimetil-ciclooctano	77.9	0.177	4.993	Otro	1.74	0.15±0.02	8.90E-04
Ftalato de octil 2-pentilo	80.6	0.042	7.3285	Plastificante	2.66	0.23±0.04	5.71E-03
2-ciano-2-etilbutiramida	72.8	299	0.9427	Industria química	1.27	0.07±0.03	2.60E-07
UTmezcla							0.7022

Contaminantes identificados en El Bordo.

Compuesto	Match	LC50 (mg L ⁻¹) 48 h	log Kow	Uso	% área	Concentración final (µg L ⁻¹)	UT
2,2,4-trimetil-1,3-pentanediol	76.7	187	1.4889	Industria química	1.17	/	/
3-Buten-2-ol	75.5	10.5	0.6311	Aditivo en alimentos	0.89	/	/
2-fenoxietanol	83.1	381	1.1002	PCP (repelente)	2.37	0.31±0.04	8.31E-07
Trans-4-(1,1-dimetiletil)-ciclohexanol	80.4	4.43	3.4171	Otro	0.75	0.10±2.11E-03	2.27E-05
1-ciano-Glioxima	80.6	133	-0.8185	Otro	0.93	0.16±0.08	1.26E-06
Triciclo[5.2.1.0(2,6)]dec-3-en-10-ol	91.9	95.8	1.8416	Metabolito vegetal	6.29	0.48±0.12	5.06E-06
N,N-bis(1-metiletil)-1,2-Etanediamina	71.5	15.9	0.8761	Industria química	0.87	0.32±0.02	2.05E-05
5-Acetil-2-metilpiridina	84.6	426	1.0324	Industria química	0.48	0.08±0.03	1.93E-07
Fluoruro de dimetilfosfinico	85.8	5103	-0.5834	Otro	0.75	0.14±0.02	2.78E-08
2,3-Octanodiona	77.4	997	0.628	Aditivo en alimentos	1.09	0.23±0.03	2.35E-07
1-fenil-1-Propanona	74.6	45.2	2.1647	Aditivo alimentario	0.80	0.17±0.01	3.83E-06
2-(1,1-dimetiletil) ciclobutanona	77.0	68.5	1.9235	Otro	6.19	/	/
Propionato de 2-metilhexilo	86.3	3.84	3.7373	Agente saborizante	1.46	0.31±0.18	8.22E-05
5-hidroxi-. alfa.,.alfa.,4-trimetil-3-Ciclohexeno-1-metanol	73.9	7.24	2.1999	Metabolito vegetal	2.13	0.28±0.08	3.92E-05
Mandelato de etilo	75.3	204	1.0337	Industria química	0.58	0.12±0.01	6.13E-07
1-(2-furanil)-1-pentanona	70.7	41.7	2.2689	Agente saborizante	0.29	0.03±0.01	8.91E-07
2,6-bis(1,1-dimetiletil)-4-hidroxi-4-metil-2,5-ciclohexadien-1-ona	79.3	4.75	3.6007	Producto de degradación de plásticos	4.23	0.52±0.02	1.10E-04
2-[2-(2-butoxi)etoxi] etanol	84.8	4830	0.0178	Industria química	4.02	0.53±0.07	1.10E-07
2-[2-(2-metoxi)etoxi] etanol	90.3	70600	-1.4555	industria química	4.44	0.59±0.08	8.37E-09
2,3-dihidro-1H-Indol-1-carboxaldehido	77.4	130	1.3942	Metabolito vegetal	0.62	0.23±0.02	1.81E-06

Compuesto	Match	LC50 (mg L ⁻¹) 48 h	log Kow	Uso	% área	Concentración final (µg L ⁻¹)	UT
2,7-dimetil octano	88.6	0.144	5.1054	Metabolito vegetal e hidrocarburo	1.46	/	/
N,N-dietil-4-metil-benzamida	82.8	31.4	2.2579	Isómero de DEET	1.18	0.10±0.04	3.41E-06
Ftalato de dietilo	92.5	24.2	2.6456	Plastificante	7.60	1.01±0.18	4.18E-05
1,1,3-trimetil ciclopentano	90	1.06	3.9732	Metabolito vegetal	1.10	/	/
3,3-dimetil hexano	88.6	0.748	4.1591	Agente en cosmética	1.43	/	/
Bencenoacetato de 4-(1,1-dimetiletil) metilo	79.6	3.19	3.9904	Fragancia	1.85	0.39±0.13	1.24E-04
Ibuprofeno	72.9	27.8	3.7931	Fármaco	1.28	0.27±7.1E-03	9.91E-06
Benzofenona	73.7	8.81	3.1471	Agente en PCPs	0.55	0.04±0.01	4.85E-06
1-Azabicyclo[3.1.0] hexano	79.2	7.2	0.7225	Metabolito vegetal	0.30	0.02±0.16	3.24E-06
Propanoato de 2-metil-3-[4-t- butil]fenilo	76.6	5.89	4.6128	Agente en cosméticos	3.05	0.37±2.23E-03	6.43E-05
Lactato de (S)-Isopropilo	77.6	477	0.2346	Otro	0.61	/	/
Cafeína	93.3	164	0.1564	Estimulante	8.87	1.59±0.39	9.70E-06
Galaxolida 2	80.1	0.027	6.2604	Fragancia	1.69	0.22±0.01	8.30E-03
3,8-dimetil undecano	85.4	0.01	6.5787	Metabolito humano	3.13	0.41±0.16	4.17E-02
Ftalato de dibutilo	95.1	1.75	4.61	Plastificante	16.39	2.18±0.85	1.24E-03
Ácido n-hexadecanoico	75.8	0.066	6.9622	Surfactante	4.56	0.60±2.95E-03	9.21E-03
Oxibenzona	70.1	2.4	3.5248	Agente en PCPs	0.34	0.02±8.07E-03	1.09E-05
Citrato de butilo	80.4	15.6	3.2805	Agente en fragancias	0.34	0.07±0.02	4.72E-06
Acrilato de n-Heptilo	79.0	1.93	3.6744	Plastificante	0.98	0.13±0.01	6.81E-05
Squaleno	77.8	7.60E-09	14.122	Metabolito e industria química	2.45	/	/
UT_{mezcla}							0.0612

Contaminantes identificados en San Sebastián.

Compuesto	Match	LC50 (mg L ⁻¹) 48 h	log Kow	grupo	% área	Concentración (µg L ⁻¹)	UT
3-metilpiridazina	88.7	871	0.4875	Metabolito	1.17	0.43±0.34	4.97E-07
Carbonato de fenilpropilo	85.9	26.7	2.4325	Otro	0.47	0.14±0.01	5.56E-06
Indol	89.3	7.1	2.0548	Metabolito	2.20	0.77±0.03	1.08E-04
Propanoato de 2-metil-, 3-hidroxi-2,2,4-trimetilpentilo	88.9	14.1	2.9966	Industria química	1.34	0.38±0.04	2.74E-05
2,4,7,9-Tetrametil-5-decin-4,7-diol	80.9	14.7	3.609	Industria química	0.84	/	/
2,6-bis(1,1-dimetiletil)-4-hidroxi-4-metil-2,5-ciclohexadien-1-ona	92.4	4.75	3.6007	Metabolito de plásticos	7.49	1.91±0.07	4.02E-04
2,6-Piridindiamina	70.7	3.17	0.2547	Pigmento en PCPs	0.07	0.06±1.1E-03	1.90E-05
3-Etil-3-metilheptano	70.1	0.134	5.1413	Metabolito vegetal	0.56	/	/
N,N-dietil-4-metilbenzamida	85.5	31.4	2.2579	Isómero del DEET	0.82	0.15±3.59E-03	4.85E-06
Ftalato de dietilo	90.7	24.2	2.6456	Plastificante	2.03	0.55±0.07	2.30E-05
2,7-dimetil octano	87.7	0.144	5.1054	Metabolito vegetal e hidrocarburo	0.30	/	/
1,2-Bencendicarboxilato de bis(2-metilpropilo)	98.0	2.17	4.463	Plastificante	29.76	8.15±0.58	3.75E-03
2,3,4,5-tetrahidro-1,1,3,3-tetrametil-1H-Pirido(4,3-b)indol	83.9	2.22	2.6119	Otro	0.21	0.03±5.95E-03	1.53E-05
4-[2-(metilamino)etil]fenol	77.1	8.91	1.3235	Metabolito	0.19	0.15±0.01	1.68E-05
3-Amino-4,6-dimetilpiridona-2(1H)	72.9	40.6	0.1734	Metabolito vegetal	0.25	0.19±0.02	4.83E-06
Isoftalato de butil tridec-2-inilo	74.3	0.012	8.3145	Otro	1.06	0.29±0.05	2.43E-02
Ftalato de dibutilo	94.9	1.75	4.61	Plastificante	11.54	3.16±0.18	1.80E-03
Oxalato de alil pentadecilo	90.6	0.054	7.1438	Metabolito vegetal	1.40	0.61±0.11	1.14E-02
Oxalato de alil nonilo	91.1	2.93	4.1972	Metabolito vegetal	1.34	0.59±0.22	2.03E-04
Azufre cíclico octoatómico	97.1	/	/	Otro	35.06	/	/
Metil ciclodecano	88.2	0.064	5.5576	Otro	1.17	0.32±0.11	5.02E-03
Sulfito de 2-etilhexil hexilo	82.0	0.067	5.8301	Industria química	0.62	0.24±7.54E-03	3.58E-03
UT mezcla							<u>0.0508</u>

Contaminantes identificados en el sitio de la Fábrica.

Compuesto	Mat ch	LC50 (mg L ⁻¹) 48 h	log Kow	Uso	% área	Concentración (µg L ⁻¹)	UT
N-(aminocarbonil) acetamida	70.0	298	- 1.005 6	Metabolito humano	0.82	0.73±0.64	2.47E-06
Propiolactona	80.1	1160	- 0.797	Desinfectante clínico	0.44	0.17±0.05	1.46E-07
5-metil-2-(1-metiletil)-, [1S-(1.alfa.,2.beta.,5.beta.)]-ciclohexanol	84.3	4.76	3.381 2	Agente saborizante	1.77	0.72±0.26	1.52E-04
dl-Mentol	89.5	4.76	3.381 2	Agente saborizante	2.11	0.86±0.25	1.81E-04
.alfa.-Terpineol	85.6	5.18	3.331 8	Agente cosmético	1.22	0.49±0.25	9.61E-05
2-(1,1-dimetiletil)-5-metil-, (2s-cis)-1,3-Dioxan-4-ona	71.3	60.8	1.834 9	Otro	1.29	0.49±0.01	8.06E-06
4-(1,1-dimetiletil) ciclohexanol	82.2	4.43	3.417 1	Agente en fragancias	0.71	0.29±0.09	6.61E-05
Etosuximida	79.5	50.1	0.511 2	Fármaco	0.56	0.21±0.05	4.27E-06
2-Butil-1,2-azaborolidina	73.5	37.3	2.226 7	Otro	0.30	/	/
Hexahidro-4,7-metano-1H-indenol	94.0	95.8	1.841 6	Metabolito vegetal	6.70	1.58±0.05	1.65E-05
1-(3-tienil) etanona	70.4	39.6	1.493 8	Metabolito vegetal	0.14	/	/
4-clorobutirato de 3-etilfenilo	76.3	4.21	3.864 4	Otro	0.13	0.09±0.01	2.14E-05
2-Etilbutirato de tetrahidrofurfurilo	75.6	17.8	2.785 9	Producto de degradación del tabaco	0.26	0.17±0.03	9.65E-06
Citral	73.2	5.79	3.445 3	Fragancia	0.44	/	/
7-metil Indolizina	93.6	1.8	3.128 2	Metabolito vegetal	0.73	0.17±0.17	9.68E-05
Difenil éter	79.4	1.39	4.049 3	Industria química	0.47	0.31±0.02	2.23E-04
Propionato de 3-ciclohexil-, 4-metoxicarbonilfenilo	70.4	1.96	4.593 4	Otro	4.34	2.86±0.37	1.45E-03
Cumarina	82.9	82.4	1.512 8	Fármaco y fragancia	0.68	0.16±0.06	1.95E-06
2,6-bis(1,1-dimetiletil)-4-hidroxi-4-metil-2,5-ciclohexadien-1-ona	78.1	4.75	3.600 7	Producto de degradación de plásticos	1.64	0.62±0.01	1.31E-04
3-metil-2-butenal	82.1	240	1.148 6	Agente saborizante	0.08	0.03±0.01	1.60E-07
4-Acetoxi-3-metoxiestireno	78.0	23.3	2.572 7	Otro	0.07	0.05±0.01	2.19E-06
1-metoxi-2-metil-2-propanol	86.7	2710	- 0.035 6	Anticongelante	0.29	0.11±0.03	4.42E-08
1-metil-2-Indolinona	79.9	361	0.870 5	Metabolito vegetal	1.13	0.42±0.06	1.19E-06
1-fenil-1-decanol	75.2	0.071	5.421 9	Agente saborizante	0.37	0.15±0.03	2.15E-03
Acetato de 2-Oxabiciclo[2.2.2]octan-6-ol, 1,3,3-trimetilo	70.5	24.7	2.600 3	Otro	1.98	0.75±0.11	3.04E-05
Dietiltoluidina	94.0	31.4	2.257 9	Plaguicida	3.62	1.00±0.25	3.19E-05
2-Ciclohexil-3,5,5-trimetil-1,3,2-oxazafosforinan 2-oxido	71.9	2.17	3.060 8	Producto de degradación de plaguicida organofosforado	0.89	0.51±0.06	2.37E-04
Ftalato de dietilo	94.5	24.2	2.645 6	Plastificante	3.68	1.50±0.01	6.21E-05
Gabapentina lactama	71.2	49.2	1.914 5	Fármaco	0.44	0.16±0.06	3.41E-06
3,3-dimetil hexano	92.2	0.748	4.159 1	Agente en cosméticos	0.58	/	/
Bencenacetato de 4-(1,1-dimetiletil) metilo	80.6	3.19	3.990 4	Fragancia	0.62	0.41±0.13	1.28E-04
3,3-dimetil-2-hexanona	72.3	48.2	2.109 4	Otro	0.28	0.10±0.01	2.25E-06
Benzofenona	73.6	8.81	3.147 1	Agente en PCPs	0.18	0.04±7.43E-03	4.98E-06
Ciclopentanoacetato de 3-oxo-2-pentil metilo	83.6	15.3	2.975	Agente saborizante	5.59	3.68±0.44	2.40E-04
Trietil citrato	72.4	862	0.333 9	Industria química	0.56	0.37±0.03	4.34E-07
1-aminociclopentanocarboxilato de n-propargiloxycarbonil decilo	78.7	0.172	6.367 7	Surfactante	0.65	0.43±0.13	2.52E-03

Compuesto	Mat ch	LC50 (mg L ⁻¹) 48 h	log Kow	Uso	% área	Concentración (µg L ⁻¹)	UT
Propanoato de 2-metil-3-[4-t-butil]fenilo	82.1	5.89	4.6128	Otro	2.44	0.92±0.31	1.57E-04
2,2,5-trimetil-3,4-hexanediona	78.1	598	0.9345	Agente en fragancias	0.36	0.24±0.14	4.02E-07
2-metil-3-nitrofenil.beta.-fenilpropionato	77.7	3.48	4.1537	Metabolito vegetal	0.13	0.09±0.02	2.64E-05
Oxalato de alil hexadecilo	89.9	0.028	7.6349	Metabolito vegetal	0.89	0.58±0.39	2.09E-02
O-benziloxima Pentanal	72.9	/	/	Otro	1.17	/	/
Cafeína	91.3	164	0.1564	Estimulante	3.69	2.03±0.32	1.23E-05
1,3,4,6,7,8-hexahidro-4,6,6,7,8,8-hexametil-ciclopenta[g]-2-benzopirano	80.5	0.027	6.2604	Agente en fragancias	2.36	0.96±0.26	3.57E-02
Ftalato de 6-etil-3-octil butilo	84.1	0.039	7.4096	Plastificante	1.54	0.63±0.43	1.61E-02
3,5-bis(1,1-dimetiletil)-4-hidroxi-benzoato	78.7	10.2	4.3632	Plastificante	0.67	0.44±0.10	4.35E-05
Metil ciclooctano	83.5	0.363	4.5754	Otro	0.92	0.37±0.33	1.03E-03
Ácido n-hexadecanoico	86.4	0.066	6.9622	Surfactante y Metabolito vegetal	6.18	2.52±2.09	3.82E-02
Oxibenzona	80.8	2.4	3.5248	Agente en PCPs	0.40	0.09±4.69E-03	3.99E-05
1,8-dihydroxi-3,5-dimetoxi-xanten-9-ona	74.7	1.22	4.5984	Fármaco	0.14	0.06±4.51E-03	4.97E-05
Ácido octanoico	92.1	0.011	7.9444	Surfactante y Metabolito vegetal	6.33	/	/
Butil citrato	74.7	15.6	3.2805	Plastificante	0.15	0.10±0.01	6.67E-06
N-antipirininil acetamida	89.0	6.91	-0.1303	Metabolito humano	1.35	0.74±0.02	1.07E-04
Tris(1,3-dicloroisopropil)fosfato	75.2	10.9	3.6485	Metabolito de plaguicida organofosforado	0.44	0.25±0.06	2.32E-05
2,7-dimetil octano	80.3	0.144	5.1054	Metabolito vegetal	0.26	/	/
Ftalato de di(2-propilpentilo)	96.1	0.01	8.3918	Plastificante	3.10	1.26±0.14	1.26E-01
5-bromovalerato de 3,5-dimetilfenilo	77.8	2.1	4.5012	Industria química	0.16	0.10±0.09	5.18E-05
Esqualeno	86.5	7.60E-09	14.122	Agente en cosméticos	4.90	/	/
(3.beta.,.5.beta.) colestan-3-ol	87.3	2.50E-04	8.8239	Producto de degradación humano	8.13	1.92±0.13	7.6878
26-nor-5-colesten-3.beta.-ol-25-ona	81.7	0.039	6.2713	Producto de degradación humano	8.25	1.94±0.13	4.99E-02
UTmezcla							7.9853

Contaminantes identificados en Coapatitla

Compuesto	Match	LC50 (mg L ⁻¹) 48 h	log Kow	Uso	% área	Concentración (µg L ⁻¹)	UT
1,2-dimetoxi propano	90.1	1670	0.2102	Otro	3.42	1.07±0.26	6.42E-07
Azetidina	92.2	16	0.2061	Metabolito vegetal	0.72	/	/
Ácido 2-metil propanoico	71.0	2990	0.9955	Fungicida	1.42	0.71±0.02	2.40E-07
Biciclo[3.2.0]hepta-2,6-dieno	78.2	24.1	2.2931	Otro	1.19	/	/
4-(1-metiletil) ciclohexanol	86.9	9.89	2.9636	Otro	4.22	1.32±1.01	1.33E-04
4-etil fenol	88.1	3.86	2.5512	Agente saborizante en cerveza	2.11	0.66±0.70	1.71E-04
dl-mentol	93.5	4.76	3.3812	Agente saborizante	4.47	1.40±0.26	2.94E-04
5-Hidroxi-7-metoxi-2-metil-3-fenil-4-cromenona	77.9	1.06	4.4331	Metabolito vegetal	0.05	0.01±1.81E-03	9.41E-06
.alfa.-terpineol	85.1	5.18	3.3318	Agente cosmético	1.57	0.49±0.32	9.51E-05
2-fenoxi-etanol	89.0	381	1.1002	Agente en PCPs	2.24	0.70±0.20	1.85E-06
4-(1,1-dimetiletil)-ciclohexanol	76.7	4.43	3.4171	Agente en fragancias	0.86	0.27±0.05	6.11E-05
3-etil-4-metil-1H-pirrol-2,5-diona	73.8	15.4	1.4612	Metabolito vegetal	0.74	0.21±0.03	1.41E-05
Etosuximida	72.0	50.1	0.5112	Fármaco	0.57	0.16±0.02	3.33E-06
2,2,5-trimetil-3,4-hexanediona	75.7	598	0.9345	Agente en fragancias	0.49	0.14±0.03	2.43E-07
Hexahidro-4,7-metano-1H-indenol	92.5	95.8	1.8416	Otro	8.16	1.48±0.45	1.54E-05
Carbamato de dimetil etilo	76.1	95.8	0.8564	Otro	2.04	0.72±0.31	7.54E-06
Indol	77.7	7.1	2.0548	Metabolito vegetal	1.87	0.74±0.62	1.05E-04
4-Alil-1,6-heptadieno-4-ol	73.3	5.81	3.2673	Otro	0.59	/	/
4-metil-4-penten-2-ona	77.0	379	1.1581	Agente en fragancias y saborizante	0.62	0.18±0.08	4.80E-07
Fumarato de di(ciclohex-3-enilmetilo)	75.8	0.163	6.3047	Industria química	0.97	0.49±0.06	3.02E-03
7-metil indolizina	89.2	1.8	3.1282	Metabolito vegetal	1.30	0.23±0.12	1.31E-04
Difenil éter	83.6	1.39	4.0493	Industria química	0.84	0.42±4.39E-03	3.07E-04
2,6-bis(1,1-dimetiletil)-4-hidroxi-4-metil-2,5-ciclohexadien-1-ona	82.1	4.75	3.6007	Producto de degradación de plásticos	2.50	0.73±0.34	1.53E-04
2,3-dihidro-4-metil-1H-indol	90.5	18.8	2.6055	Metabolito vegetal y animal	5.44	4.79±1.11	2.54E-04
1-metil-2-indolinona	73.0	361	0.8705	Metabolito vegetal	0.89	0.26±0.06	7.21E-07
3,3-dimetilhexano	80.0	0.748	4.1591	Agente en cosméticos	0.62	/	/
Dietiltoluamida	97.9	31.4	2.2579	Plaguicida	16.48	3.49±2.81	1.11E-04
Ftalato de dietilo	93.2	24.2	2.6456	Plastificante	3.82	1.19±0.35	4.95E-05
Bencenacetato de 4-(1,1-dimetiletil) metilo	77.0	3.19	3.9904	Fragancia	0.68	0.34±0.21	1.08E-04
Ácido 2-metil-3-[4-t-butil]fenil-propanoico	76.3	5.89	4.6128	Otro	1.59	0.46±0.10	7.89E-05
1H-imidazo[4,5-b]piridina-2-carboxaldehido	82.3	97.6	-0.0746	Otro	0.64	0.27±0.07	2.78E-06
3-etil-3-metilheptano	88.7	0.134	5.1413	Fragancia	0.75	/	/
Cafeína	90.9	164	0.1564	Estimulante	2.71	1.14±0.62	6.97E-06
Galaxolida 2	78.0	0.027	6.2604	Agente en fragancias	1.09	0.34±0.30	1.26E-02
1,2-bencendicarboxilato de bis(2-metilpropilo)	95.7	2.17	4.463	Plastificante	4.12	1.29±0.94	5.95E-04

Compuesto	Match	LC50 (mg L ⁻¹) 48 h	log Kow	Uso	% área	Concentración (µg L ⁻¹)	UT
Ácido n-hexadecanoico	82.9	0.066	6.9622	Surfactante	3.95	1.24±0.77	1.87E-02
Oxibenzona	79.0	2.4	3.5248	Agente en PCPs	0.39	0.07±0.02	3.01E-05
1-dodecanol	90.4	0.365	4.7698	Surfactante	1.61	0.50±0.07	1.38E-03
1,8-dihidroxi-3,5-dimetoxi-xanten-9-ona	76.4	1.22	4.5984	Fármaco	0.18	0.05±8.42E-03	4.80E-05
N-antipirininil acetamida	88.3	6.91	-0.1303	Metabolito humano	0.94	0.39±0.22	5.74E-05
Acrilato de dodecilo	86.6	0.719	6.1299	Industria química	0.89	0.28±0.21	3.91E-04
Ftalato de di(2-propilpentilo)	95.2	0.01	8.3918	Plastificante	2.19	0.68±0.52	6.87E-02
2,7-dimetil octano	79.7	0.144	5.1054	Metabolito vegetal e hidrocarburo	0.22	/	/
1,7-dimetil-4-(1-metiletil) ciclodecano	73.6	0.0028	7.3015	Metabolito vegetal	0.33	0.05±0.03	2.14E-02
Esqualeno	81.8	7.60E-09	14.122	Agente cosmético	3.89	/	/
(3.beta.,5.beta.)-Colestan-3-ol,	78.8	2.50E-04	8.8239	Producto de degradación humano	3.41	0.61±0.26	2.4789
UT mezcla							2.6083

Contaminantes identificados en Puente de Urrutia.

Compuesto	Match	LC50 (mg L ⁻¹) 48 h	log Kow	Uso	% area	Concentración final (µg L ⁻¹)	UT
1-(2-metoxi-1-metiletoxi)-2-propanol	88.8	7120	-0.3459	Industria química	6.25	0.87±0.04	1.23E-07
1,2-difenil-, [R-(R*,R*)]-1,2-Etandiol	87.5	45	2.069	Metabolito vegetal	1.47	0.11±0.01	2.65E-06
1-etoxi-but-1-ene-3-ino	75.7	163	1.0448	Otro	0.51	0.07±0.01	4.43E-07
2-fenoxi etanol	93.1	381	1.1002	PCPs	6.00	0.84±0.13	2.20E-06
Ácido hexanoico	70.2	490	2.0512	Producto de degradación	1.62	/	/
N,N-dibutilformamida	87.3	41.7	2.0129	Industria química	2.26	0.21±0.19	5.14E-06
Propanoato de 2-metilbutilo	86.5	13.4	2.7551	Agente aromatizante en alimentos	0.97	0.22±0.10	1.64E-05
2,4,7,9-Tetrametil-5-decin-4,7-diol	89.5	14.7	3.609	Industria química	6.89	0.96±0.20	6.56E-05
2,6-bis(1,1-dimetiletil)-4-hidroxi-4-metil-2,5-ciclohexadien-1-ona	85.8	4.75	3.6007	Producto de degradación de plásticos	6.58	0.85±0.19	1.80E-04
Fenol, 2,6-bis(1,1-dimetiletil)-4-metil-, metilcarbamato	88.7	0.000032	5.2801	Herbicida	10.39	1.64±0.89	51.3165
Sulfito de 2-etilhexil isohexilo	86.7	0.078	5.7566	Industria química	3.12	0.61±0.14	7.91E-03
2-Propanoato de 2-metil-, (tetrahidro-2-furanil)metilo	78.4	64.9	1.797	Agente en PCPs	0.47	0.10±9.85E-03	1.64E-06
N,N-dietil-4-metilbenzamida	90.3	31.4	2.2579	Plaguicida	4.06	0.38±0.04	1.22E-05
Ftalato de dietilo	91.6	24.2	2.6456	Plastificante	4.68	0.65±5.44E-03	2.70E-05
Formiato de 2-norbornen-5-ol	72.8	53.6	1.77	Industria química	0.67	/	/
Benzofenona	80.7	8.81	3.1471	Agente en PCPs	0.57	0.04±4.36E-03	5.28E-06
1,2-bencendicarboxilato de bis(2-metilpropilo)	90.2	2.17	4.463	Plastificante	6.47	0.90±0.10	4.17E-04
Sulfito de 2-etilhexil hexilo	81.6	0.067	5.8301	Industria química	2.13	0.42±0.01	6.28E-03
1,3-dimetil-5,7-di-n-propiladamantano	76.7	0.0014	7.7154	Otro	4.26	0.34±0.08	2.47E-01
1-hexyl-2-nitrociclohexano	83.3	0.215	5.1058	Otro	2.31	0.91±0.12	4.24E-03

Compuesto	Match	LC50 (mg L ⁻¹) 48 h	log Kow	Uso	% area	Concentración final (µg L ⁻¹)	UT
Ácido n-hexadecanoico	85.8	0.066	6.9622	Surfactante	8.02	1.12±0.75	1.70E-02
Oxalato de alil octadecilo	92.2	0.0072	8.6171	Metabolito vegetal	5.10	1.15±6.36E-03	1.59E-01
Hexadecano	89.2	0.00051	8.199	Surfactante	6.78	0.94±0.08	1.8626
Butil citrato	76.7	15.6	3.2805	Agente en fragancias	0.42	0.09±0.02	6.21E-06
N-antipirininil acetamida	94.0	6.91	-0.1303	Producto de degradación de fármaco	1.41	0.26±0.01	3.87E-05
1-Tridecin-4-ol	73.2	1.47	4.4158	Metabolito vegetal	1.01	0.14±0.03	9.67E-05
Carbamazepina	85.9	14.1	2.2484	Fármaco	2.74	0.22±0.02	1.574E-05
1,2,2-Trimetilpropil trifluoroacetato	81.0	11.8	3.0597	Industria química	0.23	0.07±0.04	6.07E-06
Octadecanoato de 2-metilpropilo	75.1	0.0015	9.6305	Agente saborizante	1.26	0.17±0.05	1.18E-01
Ftalato de octil 2-pentilo	84.5	0.042	7.3285	Plastificante	1.21	0.16±0.01	4.04E-03
UT_{mezcla}							53.7447

ANEXO II

Lista de contaminantes orgánicos identificados

nombre	CAS	Fábrica	Tecaltila	Cospatilla	Sitios de muestreo						uso	% Frecuencia
					Bordo	Potrero	San Sebastián	Tilac	La espejera	Puente de Urrutia		
(E,E)-3,7,11,15-Tetrametilhexadeca-1,3,6,10,14-penteno	77898-97-6									*	Metabolito vegetal	11.1
Lactato de (S)-isopropilo	63697-00-7				*						Otro	11.1
alfa-Terpineol	98-55-5	*		*							Agente cosmético	22.2
1,14-Tetradecanodiol	19812-64-7		*								Industria química	11.1
1,2,2-Trimetilpropil trifluoroacetato	116465-21-5									*	Industria química	11.1
1,2-bencendicarboxilato de bis(2-metilpropilo)	84-69-5		*	*		*	*			*	Plastificante	55.5
o-(4-metoxibenzil)-o'-(5-clorovaleril)-1,2-Bencendiol	1000325-98-7					*					Otro	11.1
N,N-bis(1-metiletil)-1,2-Etanediamina	121-05-1				*			*			Industria química	22.2
1,2-difenil-, [R-(R*,R*)]-1,2-Etanediol	52340-78-0									*	Metabolito vegetal	11.1
1,3-dimetil-5,7-di-n-propiladamantano	1000215-00-5		*			*		*		*	Otro	44.4
2-(1,1-dimetiletil)-5-metil-, (2s-cis)-1,3-Dioxan-4-ona	107289-32-7	*									Otro	11.1
2,2,4-trimetil-1,3-pentenediol	144-19-4				*						Industria química	11.1
1,7-Dimetil-4-(1-metiletil)ciclododecano	645-10-3			*				*			Metabolito vegetal	22.2
1-[1,2,4]Triazol-1-iletanona	15625-88-4		*								Metabolito vegetal	11.1
1-Aminociclopentanocarboxilato de n-propargiloxcarbonilidocilo	1000329-00-6	*									Surfactante	11.1
1-Azabicio[3.1.0]hexano	285-76-7				*						Metabolito vegetal	11.1
1-Dodecanol	112-53-8			*							Surfactante	11.1
1-Hexil-2-nitrociclohexano	118252-04-3									*	Otro	11.1
1H-Imidazo[4,5-b]piridin-2-carboxaldehido	56805-24-4			*							Otro	11.1
2,3-dihidro-4-metil-1H-indol	62108-16-1			*		*			*		Metabolito vegetal	33.3
2,3-dihidro-1H-Indol-1-carboxaldehido	2861-59-8				*	*					Metabolito vegetal	22.2
1H-Pirazolo[3,4-d]pirimidin-4-amina	2380-63-4					*					Derivado de fármaco	11.1
2,3,4,5-tetrahidro-1,1,3,3-tetrametil-1H-pirido(4,3-b) indol	4290-21-5		*				*				Otro	22.2
3-etil-4-metil-1H-pirrol-2,5-diona	20189-42-8			*							Metabolito vegetal	11.1
1-(2-furanil)-1-pentanona	3194-17-0				*						Agente saborizante	11.1
1-fenil-1-decanol	21078-95-5	*				*					Agente saborizante	22.2
1-fenil-1-propanona	93-55-0				*						Aditivo alimentario	11.1
1-Tridecin-4-ol	74646-37-0									*	Metabolito vegetal	11.1
2,3-Octanodiona	585-25-1				*						Aditivo alimentario	11.1
2,4,7,9-Tetrametil-5-decin-4,7-diol	126-86-3		*			*	*	*	*	*	Industria química	55.5
(E)-2-metilbut-2-enoato de 2,4-dimetilpentan-3-ilo	1000373-75-5								*		Otro	11.1
2,6-bis(1,1-dimetiletil)-4-hidroxi-4-metil-2,5-ciclohexadien-1-ona	1000401-12-0	*		*	*	*	*	*	*	*	Metabolito de plásticos	88.8

1,4-dietil-1,4-dimetil-2,5-ciclohexadieno	1000150-21-6							*		Otro	11.1
2,6-Piridinediamina	141-86-6						*			Pigmento de PCP	11.1
2-[[2-metil-endo-2-norbornil]oxi]-tetrahidropirano	1000144-72-1							*		Otro	11.1
26-Nor-5-colesten-3.beta.-ol-25-ona	7494-34-0	*								Producto de excreción	11.1
2-bromo-2-nitropropano	5447-97-2							*		PCP	11.1
3-metil-2-butenal	107-86-8	*								Agente saborizante	11.1
2-butil-1,2-azaborolidina	5357-10-8	*								Otro	11.1
2-Ciclohexen-1-ona	930-68-7		*			*				Industria química	22.2
2-Ciclohexil-3,5,5-trimetil-1,3,2-oxazafosforin 2-oxido	85289-29-8	*								Metabolito de degradación de plaguicida organofosforado	11.1
2-Etilbutirato de tetrahydrofurfurilo	1000370-65-1	*								Producto degradado del tabaco	11.1
3,3-dimetil-2-hexanona	26118-38-7	*								Otro	11.1
1-metil-2-indolinona	61-70-1	*		*				*		Metabolito vegetal	33.3
2-Metil-2-propil metilfosfonofluoridato	13273-12-6					*				Derivado de Plaguicida organofosforado	11.1
.beta.-Fenilpropionato de 2-metil-3-nitrofenilo	40300-01-4	*								Metabolito	11.1
Formiato de 2-norbornen-5-ol	1000142-75-9							*		Industria química	11.1
Acetato de 1,3,3-trimetil-2-oxabicyclo[2.2.2]octan-6-ol	57709-95-2	*						*		Metabolito	22.2
N,N'-metanotetraalilbis-2-propanamina	693-13-0		*							Metabolito	11.1
1-(2-metoxi-1-metiletoxi)-2-propanol	20324-32-7								*	Industria química	11.1
2-propanol, 1-clorofosfato (3:1)	13674-84-5		*			*		*		Retardante de flama	44.4
1-metoxi-2-metil-2-propanol	3587-64-2	*								Anticongelante	11.1
2-Propanoato de 2-metil-, (tetrahydro-2-furani)metilo	2455-24-5								*	PCP	11.1
2,2,5-trimetil-3,4-hexanediona	20633-03-8	*		*				*		Agente en fragancias	33.3
3,5-dimetil-4-octanona	7335-17-3					*				Metabolito	11.1
3,6,9,12-tetraoxahexadecan-1-ol	1559-34-8					*				Industria química	11.1
3-amino-4,6-dimetilpiridona-2(1H)	143708-29-6					*				Metabolito	11.1
3-Buten-2-ol	598-32-2				*					Aditivo alimentario	11.1
5-hidroxi-.alfa.,.alfa.,4-trimetil-3-ciclohexeno-1-metanol	498-71-5				*					Metabolito	11.1
3-Etil-3-metilheptano	17302-01-1		*	*		*				Metabolito	33.3
Propanoato de (Z)-3-hexen-1-ol	33467-74-2					*				Agente en Fragancias	11.1
3-Metilpiridazina	1632-76-4					*				Metabolito	11.1
3-Nonen-5-ona	82456-34-6					*				Fragancia	11.1
hexahidro-4,7-metano-1H-indenol	37275-49-3	*		*						Metabolito	22.2
3,3a,4,6,7,7a-hexahidro-4,7-metano-5H-inden-5-ona	14888-58-5					*				Otro	11.1
1-metil-5-(1-metiletil)-, (1.alfa.,3.beta.,5.beta.,7.alfa.)-4,8-dioxatriciclo[5.1.0.0(3,5)]octano	42569-59-5							*		Otro	11.1
4-acetoxi-3-metoxiestireno	46316-15-8	*								Otro	11.1

4-ailil-1,6-heptadieno-4-ol	10202-75-2			*						Otro	11.1
Anhidrido 4-clorobutanoico	1000333-91-1		*							Otro	11.1
4-clorobutirato de 3-etilfenilo	1000360-64-2	*								Otro	11.1
4-metil-2-nitroimidazol	5213-35-4							*		Metabolito	11.1
4-metil-4-penten-2-ona	3744 02 3			*						Agente en fragancias y saborizante	11.1
5-acetil-2-metilpiridina	42972-46-3					*				Industria química	11.1
5-bromovalerato de 3,5-dimetilfenilo	1000307-64-3	*								Industria química	11.1
5-hidroxi-7-metoxi-2-metil-3-fenil-4-cromenona	55927-39-4			*						Metabolito vegetal	11.1
N-(aminocarbonil)-acetamida	591-07-1	*								Producto de excreción humana	11.1
N-9-fenantrenil-acetamida	4235-09-0							*		otro	11.1
N-antipirinil-acetamida	83-15-8	*	*	*		*			*	Producto de excreción humana	55.5
Azetidina	503-29-7			*						Metabolito vegetal	11.1
4-metil-benzamida	619-55-6					*				Metabolito del DEET	11.1
N,N-dietil-4-metil-benzamida	2728 05 4		*		*	*	*	*	*	Plaguicida	66.6
Bencenacetato de 4-(1,1-dimetiletil)-metilo	3549-23-3	*		*	*					Fragancia	33.3
.alfa.-etil-bencenetanol	701-70-2					*				Fragancia	11.1
4-metil-bencensulfonamida	70-55-3		*							Agente en la industria cosmética	11.1
N-butil-bencensulfonamida	3622-84-2		*							Plastificante	11.1
Ácido 3,5-bis(1,1-dimetiletil)-4-hidroxi-benzoico	1421-49-4	*								Plastificante	11.1
Benzofenona	119-61-9	*	*		*	*		*	*	Agente en PCPs	66.6
Biciclo[3.2.0]hepta-2,6-dieno	2422-86-8			*						Otro	11.1
1-etoxi-but-1-eno-3-ino	2806-41-9								*	Otro	11.1
Butanoato de butilo	109-21-7		*					*		Aditivo alimentario	22.2
Butil citrato	77-94-1	*			*				*	Plastificante	33.3
2-ciano-2-etil-butiramida	18705-38-9							*		Industria química	11.1
Cafeina	58-08-2	*		*	*	*				Agente alimenticio	44.4
Carbamazepina	298-46-4		*						*	Fármaco	22.2
Carbamato de (1-metiletil)-2-[[aminocarbonil]oxi]metil]-2-metilpentilo	78-44-4							*		Fármaco	11.1
Carbamato de dimetil etilo	687-48-9			*						Otro	11.1
Carbonato de fenil propilo	13183-16-9						*			Otro	11.1
(3.beta.,5.beta.)-colestano-3-ol	360-68-9	*		*						Producto de degradación humano	22.2
Citral	5392-40-5	*								Fragancia	11.1
Cumarina	91-64-5	*								fragancia	11.1
2-(1,1-dimetiletil)-ciclobutanona	4579-31-1				*					Otro	11.1
Metil ciclodecano	13151-43-4						*			Otro	11.1
1,2-dimetil-3-pentil-4-propil-ciclohexano	62376-17-4		*							Otro	11.1
Metil ciclohexano	108-87-2		*							Industria química	11.1
Ciclohexanoetanol	4442-79-9		*							Otro	11.1

4-(1,1-dimetil-etil)-ciclohexanol	98-52-2	*		*							Agente en fragancias	22.2
Trans-4-(1,1-dimetil-etil)-ciclohexanol	21862-63-5				*						Otro	11.1
4-(1-metil-etil)-ciclohexanol	4621 04 9			*							Otro	11.1
5-metil-2-(1-metil-etil)-[1S-(1.alfa.,2.beta.,5.beta.)]-ciclohexanol	23283-97-8	*									Agente saborizante	11.1
trans-1,4-dimetil-,ciclooctano	13151-98-9							*			Otro	11.1
Metil-ciclooctano	1502-38-1	*									Otro	11.1
1,3,4,6,7,8-hexahidro-4,6,6,7,8,8-hexametil-Ciclopenta[g]-2-benzopirano	1222-05-5	*									Agente en fragancias	11.1
1,1,3-trimetil-Ciclopentano	4516-69-2				*						Metabolito	11.1
1-etil-1-metil-ciclopentano	16747-50-5		*								Otro	11.1
Ciclopentanoacetato de 3-oxo-2-pentil-metilo	24851-98-7	*									Agente saborizante	11.1
Ciclotetradecano	295-17-0							*			Metabolito vegetal	11.1
2,4-dimetil decano	2801-84-5							*			Agente en fragancias	11.1
2,9-dimetildecano	1002-17-1		*								Metabolito vegetal	11.1
ftalato de dibutilo	84-74-2		*		*	*	*				Plastificante	44.4
Ftalato de dietilo	84-66-2	*	*	*	*	*	*	*	*	*	Plastificante	88.8
Dietiltoluamida	134-62-3	*		*					*		Insecticida	33.3
Fluoruro de dimetilfosfico	753-70-8				*						Otro	11.1
Difenil éter	101-84-8	*		*							Industria química	22.2
dl-mentol	89-78-1	*		*							Agente saborizante	22.2
Acrilato de dodecilo	2156-97-0		*	*		*	*	*			Industria química	55.5
Encainida	37612-13-8					*					Fármaco	11.1
2-[2-(2-butoxi-etoxi)-etoxi]-etanol	143-22-6				*						Industria química	11.1
2-[2-(2-metoxi-etoxi)-etoxi]-etanol	112-35-6				*						Industria química	11.1
2-fenoxi-Etanol	122-99-6			*	*				*		PCP	33.3
1-(3-tienil)-etanona	1468-83-3	*									Metabolito	11.1
Etosuximida	77-67-8	*		*		*					Fármaco	33.3
Mandelato de etilo	774-40-3				*	*		*			Industria química	33.3
N,N-dibutil-formamida	761-65-9		*					*	*		Industria química	33.3
Fumarato de di(ciclohex-3-enilmetilo)	1000345-15-3			*							Industria química	11.1
Gabapentina lactama	64744-50-9	*									Fármaco	11.1
Galaxolida 2	1000285-28-7			*	*	*					Fragancia	33.3
1-cano-glioxima	154391-42-1				*						Otro	11.1
Hexadecano	544-76-3		*					*	*	*	Surfactante	44.4
3,3-dimetilhexano	563-16-6	*	*	*	*	*		*	*		Agente en industria cosmética	77.7
Ácido hexanoico	142-62-1								*		Producto de degradacion	11.1
Hexestrol	84-16-2					*					Estrógeno (fármaco)	11.1
Ibuprofeno	15687-27-1				*						Fármaco	11.1
Indol	120-72-9			*	*	*					Metabolito	33.3

7-metil-indolizina	1761-12-2	*		*							Metabolito	22.2
Isoetarina	530-08-5						*				Fármaco	11.1
Isoftalato de butil tridec-2-inilo	1000343-91-5					*					Otro	11.1
Acrylato de n-heptilo	2499-58-3			*							Plastificante	11.1
Ácido n-hexadecanoico	57-10-3	*		*	*					*	Surfactante	44.4
Ácido octadecanoico	57-11-4	*									Surfactante	11.1
Octadecanoato de 2-metilpropilo	646-13-9									*	Agente saborizante	11.1
2,7-dimetil octane	1072-16-8	*		*	*	*	*	*	*	*	Metabolito	66.6
Oxalato de alil hexadecilo	1000309-24-4	*							*		Producto de degradación	22.2
Oxalate de alil nonilo	1000309-23-7					*					Metabolito	11.1
Oxalato de alil octadecilo	1000309-24-5		*							*	Metabolito vegetal	22.2
Oxalato de alil pentadecilo	1000309-24-3				*	*	*	*	*	*	Metabolito vegetal	44.4
Oxibenzona	131-57-7	*		*	*			*	*		PCP	55.5
Pentanal O-bencloxima	72399-21-4	*									Desconocido	11.1
2,3,3-trimetil-pentano	560-21-4		*								Otro	11.1
fenampromida	129-83-9								*		Industria farmacéutica	11.1
fenol, 2,6-bis(1,1-dimetiletil)-4-metil-, metilcarbamato	1918 11 2									*	Herbicida	11.1
4-[2-(metilamino)etil]-fenol	370-98-9					*					Metabolito	11.1
4-etil fenol	123-07-9			*							Agente saborizante en cerveza	11.1
Fosfato de 2-cloroetenil dimetilo	17027-41-7							*			Industria química	11.1
Ftalato de 4-bromofenil etilo	1000309-80-8					*					Plastificante	11.1
Ftalato de 6-etil-3-octil butilo	1000315-17-4	*						*	*		Plastificante	33.3
Ftalato de di(2-propilpentilo)	1000377-93-5	*		*							Plastificante	22.2
Ftalato de di(6-metilhept-2-ilo)	1000377-97-3							*			Plastificante	11.1
Ftalato de octil 2-pentilo	1000315-48-0							*	*		Plastificante	22.2
1,2-dimetoxi-propano	7778-85-0			*							Otro	11.1
Ácido 2-metil-propanoico	79-31-2			*							Fungicida	11.1
Propanoato de 2-metil-, 2-etil-3-hidroxihexilo	74367-31-0							*			Metabolito vegetal	11.1
Propanoato de 2-metil-, 3-hidrox-2,2,4-trimetilpentilo	77-68-9					*					Industria química	11.1
Propanoato de 2-metil butilo	97-87-0									*	Agente aromatizante en alimentos	11.1
Propanoato de 2-metil hexilo	2349 07 7				*	*					Agente saborizante	22.2
Propanoato de 2-metil-3-[4-t-butil]fenilo	1000131-87-0	*		*	*						Otro	33.3
Bromuro de 2-bromo-2-metil-propanoilo	20769-85-1					*					Industria química	11.1
Propiolactona	57-57-8	*									Desinfectante en hospitales	11.1
Propionato de 3-ciclohexil-4-metoxicarbonilfenilo	1000258-44-7	*									Otro	11.1
Propionato de 3-hidroxi-2-isopropilideno	1000153-27-1								*		Otro	11.1
3-butil-1-oxido piridina	31396-33-5					*					Derivado presente en el tabaco	11.1
Esqualeno	111-02-4	*		*	*						Agente cosmético	33.3
Sulfito de 2-etilhexil hexilo	1000309-20-2					*	*	*	*	*	Industria química	44.4

Sulfito de 2-etilhexil isohexilo	1000309-19-0								*	Industria química	11.1
treo-2,5-Dimetil-2-(2-metil-2-tetrahidrofuril)tetrahidrofurano	1000112-56-1					*			*	Otro	22.2
Triciclo[5.2.1.0(2,6)]de c-3-en-10-ol	39852-87-4				*					Metabolito	11.1
Trietil citrato	77-93-0	*								Industria química	11.1
Tris(1,3-dicloroisopropil) fosfato	13674-87-8	*				*				Retardante de flama	22.2
3,8-dimetil-undecano	17301-30-3		*		*				*	Metabolito humano	33.3
1,8-dihidroxi-3,5-dimetoxi-xanten-9-ona	521-65-3	*		*						Fármaco	22.2