



**Benemérita  
Universidad Autónoma de Puebla**

---

---

**FACULTAD DE INGENIERÍA QUÍMICA**

**“Análisis *in silico* del impacto ambiental del  
1 H- benzotriazol en cuerpos de agua”**

**TESIS PROFESIONAL**

**Que para obtener el Título de:**

**Licenciatura en Ingeniería Química**

**Presenta:**

**Jeanette Diaz Alvarado**

**Director de Tesis:**

**M.I. Angel Silveti Loeza**

**Puebla, Pue. 17 de Agosto de 2021**



*A mi mamá:*

*Por su apoyo, dedicación y, sobre todo, por su amor incondicional*

*A mi abuelita:*

*Por ser mi ejemplo de una gran guerrera*

*Y a mí:*

*Por los momentos y decisiones que me permiten crecer cada día*

# AGRADECIMIENTOS

A la Benemérita Universidad Autónoma de Puebla por ser mi segundo hogar, por todos los aprendizajes y las oportunidades que me brindó, y principalmente, por toda la gente que puso en mi camino.

Al M.I. Angel Silveti Loeza por confiar en mí para desarrollar este trabajo de tesis bajo su tutela, por su compromiso como persona y docente, ya que siempre estuvo al pendiente de este proceso, dedicando su tiempo y paciencia, así como compartiendo sus conocimientos, consejos y retroalimentando constantemente este gran proyecto. Agradezco infinitamente su guiamiento y amistad.

A la M.I.A Miriam Vega Hernández por su apoyo, orientación y enseñanzas, así también por el tiempo que dedicó para resolver mis dudas y por cada una de sus recomendaciones.

A la M.I.A Mayté Juárez Meneses por su interés, apoyo, tiempo y por sus recomendaciones, parte fundamental para complementar esta tesis.

A mis padres por ser mi pilar, por siempre acompañarme en cada camino de mi vida, por su tiempo y, sobre todo, por su amor incondicional en estos 25 años; no hay amor más grande como el que ellos nos brindan a mi hermana y a mí, siempre se esmeran y esfuerzan para que nunca nos falte nada. Cada logro y cada éxito va dedicado a mis padres, parte de lo que soy es gracias a ellos, los amo.

A mi abuelita por ser una gran mujer, una gran madre y una guerrera. Agradezco por todo su cariño, por compartir conmigo su sabiduría, por cada historia que relata, por cada abrazo que me regala, por ser de las personas más importantes de mi vida, siempre dejará huella en ella.

A mi hermana por ser mi mejor amiga y confidente, por siempre animarme a hacer cosas, por ser mi compañera de aventuras y de anécdotas, por tenerme mucha paciencia durante este proceso y por acompañarme en mis desvelos.

A Pepe por ser mi serendipia, por ser mi mejor amigo y compañero de aventuras, por todos los momentos que hemos vivido. Agradezco infinitamente por su amor, por su apoyo en todos los ámbitos, por sus consejos y por todo este tiempo de crecimiento individual y compartido, siempre me hace ver más allá. Gracias por ser como una luz, por darme claridad.

A mi familia y a mis amigos que también son parte de ella, por estar en mi vida, por sus consejos, por cada aprendizaje que han compartido conmigo, por acogerme y por siempre recordarme que los momentos buenos, son más y mejores que los malos.

Gracias a Dios por todo lo que tengo en mi vida...

*“Hay bajo el sol un momento para todo, y un tiempo para hacer cada cosa...”*

Eclesiastés 3:1-9

## RESUMEN

Hoy en día existen miles de sustancias químicas de las cuales se desconoce su procedencia y los daños que provocan en la salud y el ambiente. El 1 H – benzotriazol pertenece a esta clase de contaminantes emergentes, su introducción comercial data de los años cincuenta y, por tanto, su emisión y el impacto ambiental a lo largo del tiempo es considerable. Hasta la fecha no hay normas que regulen la producción, uso y disposición de este compuesto orgánico.

El 1 H – benzotriazol ha sido mayormente detectado en cuerpos de agua, para evaluar el riesgo ambiental de este y debido a limitantes como son: la escasa información, el uso de equipos altamente costosos y la inversión de tiempo, los modelos QSAR son una gran alternativa. En esta tesis, la Interfaz de Programas de Estimación, EPI Suite v4.11, fue la herramienta principal para la estimación *in silico* de las propiedades fisicoquímicas y biológicas del 1 H – benzotriazol.

Los resultados obtenidos de las diferentes estimaciones (volatilidad, fugacidad y porcentaje de remoción y biodegradación en una planta de tratamiento biológico) indican que es un elemento poco volátil en agua y que tenderá a permanecer disuelto por largos periodos de tiempo en aguas con poco movimiento; es una sustancia hidrofílica y muy soluble en agua con una baja tendencia a adsorberse en el suelo; y su tasa de remoción total bajo condiciones biológicas es del 75.29 %.

## ABSTRACT

Nowadays, thousands of chemical substances exist that their provenance and potentially hazardous effects on the environment and human health still remain unknown. The 1 H – benzotriazole belongs to this kind of emerging contaminants (EC), it has been recorded to be commercially introduced during the 1950s, thus their emission and environmental impact must be considerable. So far, there are no regulations to production, use and disposal of this organic compound.

1-H benzotriazole has been detected mostly in water bodies, due to the scarce information and the high investment of time and resources to assess the environmental risk, the Quantitative Structure-Activity Relationships (QSAR) models arise as a suitable alternative. In this thesis, the physicochemical and biological characteristics of the 1 H – benzotriazole were estimated in silico with the EPI (Estimation Programs Interface) Suite v4.11.

The results obtained by estimating (volatility, fugacity, removal and biodegradation percentages on a waste-water biological-treatment plant) show that it would tend to remain dissolved in water with low circulation due to low volatilization in water; it is a hydrophilic and hydro soluble substance with a low tendency to adsorb to soil; finally, the removal ratio obtained under biological conditions is calculated to be 75.29%.

# INDICE GENERAL

INTRODUCCIÓN .....	1
PLANTEAMIENTO DEL PROBLEMA .....	3
JUSTIFICACIÓN .....	5
OBJETIVOS .....	7
HIPÓTESIS .....	7
CAPÍTULO I. ANTECEDENTES .....	8
1.1 Contaminantes emergentes .....	8
1.1.2 Situación de los contaminantes emergentes en México .....	10
1.1.3 Destino ambiental y comportamiento de los contaminantes emergentes .....	12
1.1.4 Contaminantes emergentes en el ambiente y la salud .....	17
1.1.5 Tratamiento de contaminantes emergentes .....	18
1.2 Benzotriazoles .....	31
1.2.1 Aplicación de los benzotriazoles .....	32
1.3 1 H - benzotriazol .....	33
1.3.1 Aplicaciones del 1 H - benzotriazol .....	34
1.3.2 Presencia del 1 H - benzotriazol en el ambiente .....	35
1.3.3 Efectos del 1 H – benzotriazol en el ambiente .....	38
1.3.4 Efectos del 1 H – benzotriazol en la salud humana .....	41
1.4 Impacto ambiental del uso de sustancias químicas .....	43
1.5 Marco regulatorio de contaminantes emergentes .....	44
1.5.1 Marco regulatorio internacional .....	44
1.5.2 Marco regulatorio nacional .....	46
1.5.3 Regulación del 1 H – benzotriazol .....	49
1.6 Programas QSAR .....	51
1.7 EPI SUITE .....	52
1.7.1 Fundamentos para el cálculo de la volatilidad en WVOLWIN .....	54
1.7.2 Fundamentos para la determinación del porcentaje de remoción y biodegradación del 1 H - benzotriazol en una planta de tratamiento de agua residual biológica .....	62

1.7.3 Fundamentos para la determinación de la fugacidad .....	67
CAPÍTULO II: METODOLOGÍA.....	80
2.1 Estimación de la volatilidad del 1 H- benzotriazol .....	86
2.1.1 Criterios para la interpretación de resultados de WVOLWIN.....	86
2.1.2 Ejecución del modelo para estimar la volatilidad del 1 H- benzotriazol ..	88
2.2 Cálculo del porcentaje de remoción y biodegradación del 1 H-benzotriazol en una planta de tratamiento de agua residual biológica .....	91
2.2.1 Criterios para la interpretación de resultados de STPWIN .....	91
2.2.2 Modelamiento para estimar el porcentaje de remoción y biodegradación del 1 H-benzotriazol en una planta de tratamiento de agua residual biológica	92
2.3 Estimación de la fugacidad del 1 H- benzotriazol .....	94
2.3.1 Criterios para la interpretación de resultados de LEVIII Epi .....	94
2.3.2 Modelamiento para estimar la fugacidad del 1 H- benzotriazol .....	95
CAPÍTULO III: RESULTADOS Y DISCUSIÓN .....	100
3.1 Estimación de la volatilidad del 1 H- benzotriazol .....	100
3.1.1 Constante de la Ley de Henry.....	100
3.1.2 Volatilidad del 1 H - benzotriazol.....	101
3.1.3 Discusión de resultados .....	102
3.2 Cálculo del porcentaje de remoción y biodegradación del 1 H-benzotriazol en una planta de tratamiento de agua residual biológica .....	106
3.2.1 Biodegradación del 1 H-benzotriazol .....	106
3.2.2 Porcentaje de remoción y biodegradación del 1 H-benzotriazol en una PTAR.....	107
3.2.3 Discusión de resultados .....	109
3.3 Estimación de la fugacidad del 1 H – benzotriazol .....	112
3.3.1 Discusión de resultados .....	114
CONCLUSION .....	117
BIBLIOGRAFÍAS.....	118

## INDICE DE TABLAS

Tabla 1. Listado de contaminantes emergentes propuesto para México .....	11
Tabla 2. Contaminantes emergentes de interés para México según CONAGUA ..	12
Tabla 3. Efectos indeseables de las aguas residuales .....	20
Tabla 4.1. Escalas de clasificación de la calidad del agua con base a la DBO <sub>5</sub> ....	21
Tabla 4.2. Escalas de clasificación de la calidad del agua con base a la DQO .....	21
Tabla 4.3. Escalas de clasificación de la calidad del agua con base a los SST.....	22
Tabla 4.4. Escalas de clasificación de la calidad del agua con base a los CF .....	22
Tabla 5. Resumen por proceso .....	29
Tabla 6. Información y propiedades fisicoquímicas del 1 H- Benzotriazol .....	33
Tabla 7. Concentración del 1 H - benzotriazol en las diferentes matrices ambientales .....	35
Tabla 8. Datos de la toxicidad del 1 H – benzotriazol en organismos acuáticos ....	39
Tabla 9. Normas oficiales mexicanas en materia de descargas de aguas residuales y tratadas, expedidas por la SEMARNAT .....	47
Tabla 10. Propuesta para estándares de calidad aguda y crónica del 1 H - benzotriazol .....	50
Tabla 11. Programas de estimación de EPI Suite utilizados en la evaluación de riesgos de sustancias químicas .....	52
Tabla 12.1. Parámetros de entrada de WVOLWIN.....	55
Tabla 12.2. Valores del río modelo y justificación.....	55
Tabla 12.3. Valores del lago modelo y justificación .....	55
Tabla 13. Propiedades de la PTAR definidas por el programa .....	65
Tabla 14. Guía para seleccionar los tiempos de vida media para Bio A .....	66
Tabla 15. Relaciones de estimación de Biowin 3 .....	69
Tabla 16. Valores de advección definidos en compartimentos ambientales .....	70
Tabla 17. Dimensiones de los compartimentos ambientales para el modelo de fugacidad de nivel III .....	72
Tabla 18. Valores de destino ambiental del modelo de multimedia .....	72
Tabla 19. Definición de las capacidades de fugacidad .....	73
Tabla 20. Valores del MTC para los procesos de transporte intermedia del modelo <sup>1</sup> .....	76

Tabla 21. Constante de Ley de Henry- Volatilidad en varios rangos .....	86
Tabla 22. Rangos de punto de fusión, ebullición y presión de vapor .....	87
Tabla 23. Clasificación de la solubilidad de acuerdo con sus rangos .....	87
Tabla 24. Tiempos de biodegradación .....	91
Tabla 25. Especificaciones de Log kow.....	94
Tabla 26. Adsorción de una sustancia química mediante su log koc.....	95
Tabla 27. Constante de la Ley de Henry a 25 °C mediante diferentes métodos ..	101
Tabla 28. Constante de la Ley de Henry a diferentes temperaturas .....	101
Tabla 29.1. Propiedades fisicoquímicas consideradas para el cálculo de la volatilidad .....	102
Tabla 29.2. Resultados de la volatilidad del 1 H-benzotriazol para un río y lago .	102
Tabla 30. Resultados de BIOWIN para el 1 H- benzotriazol .....	107
Tabla 31. Propiedades fisicoquímicas consideradas para el cálculo de remoción y biodegradación en una PTAR biológica .....	107
Tabla 32.1. Condiciones del sistema de tratamiento: Método predeterminado por EPI Suite .....	108
Tabla 32.2. Balance de masa de la PTAR biológica: Método predeterminado por EPI Suite .....	108
Tabla 33.1. Condiciones del sistema de tratamiento: Método EPA draft-BIOWIN .....	109
Tabla 33.2. Balance de masa de la PTAR biológica: Método EPA draft-BIOWIN	109
Tabla 34. Comparación de los porcentajes reales de remoción en una PTAR biológica vs porcentajes de STPWIN .....	111
Tabla 35. Propiedades fisicoquímicas consideradas para el cálculo de fugacidad .....	112

## INDICE DE FIGURAS

Figura 1. Principales fuentes y rutas de emisión de Contaminantes Emergentes..	13
Figura 2. Vías de recepción de contaminantes emergentes .....	14
Figura 3. Destino ambiental de los CE en el medio acuático .....	15
Figura 4. Principales procesos de migración de los CE al suelo .....	17
Figura 5. Representación de las principales rutas de exposición para los humanos .....	18
Figura 6. Principales fuentes de aguas residuales .....	19
Figura 7.1. Planta de tratamiento de agua residual .....	23
Figura 7.2. Tren de tratamiento de una PTAR.....	23
Figura 8. Tipos de sistemas secundarios de una PTAR .....	25
Figura 9.1. Reactores de biomasa en suspensión.....	25
Figura 9.2. a) Filtros percoladores      b) Discos biológicos rotativos .....	26
Figura 9.3. a) Fosa séptica, b) Tanque Imhoff y c) RAFA.....	26
Figura 9.4. a) Filtros anaerobios b) Reactor tubular de película fija c) Lecho fluidizado d) Lecho expandido.....	27
Figura 10.1. Benzotriazoles de mayor relevancia comercial.....	31
Figura 10.2. Otros benzotriazoles de uso frecuente .....	32
Figura 11. Estructura química del 1 H-benzotriazol.....	33
Figura 12. Fuentes de emisión del 1 H - benzotriazol.....	37
. Fuentes de emisión del 1 H – benzotriazol en el medio acuático .....	37
Figura 13. Pirámide de Kelsen del sistema jurídico mexicano .....	46
Figura 14. Diagrama sobre el cálculo de la constante de la Ley de Henry (HLC) ..	56
Figura 15. Procesos de remoción de la planta de tratamiento biológica de agua residual .....	65
Figura 16. Parámetros de tiempos de vida media definidos por STPWIN .....	66
Figura 17. Factores de conversión de vidas media de Biowin .....	69
Figura 18. Pantalla de inicio de EPI Suite v.4.11 .....	80
Figura 19.2. “Input CAS #” y los demás valores de entrada completos .....	81
Figura 19.1. Introducción del 1 H- benzotriazol mediante Input CAS #.....	81
Figura 20.1. Introducción del 1 H- benzotriazol mediante Input SMILES .....	82
Figura 20.2. Estructura química del 1 H- benzotriazol en DRAW .....	82

Figura 20.3. “Input SMILES” y los demás valores de entrada completos.....	83
Figura 21.1. Introducción del 1 H- benzotriazol mediante Input Chem Name .....	83
Figura 21.2. Lista de sustancias químicas de EPI Suite .....	84
Figura 21.3. “Input Chem Name” y los demás valores de entrada completos.....	84
Figura 22. Trasferencia de datos de propiedades fisicoquímicas del 1 H- benzotriazol .....	85
Figura 23. Parámetros de entrada de WVOLWIN .....	88
Figura 24.1. Elección del programa HENRYWIN .....	89
Figura 24.2. Pantalla de inicio de HENRYWIN .....	89
Figura 24.3. Selección de la constante de la Ley de Henry a diferentes temperaturas .....	90
Figura 25.1. Elección del programa STPWIN.....	92
Figura 25.2. Parámetros de las vidas media de STPWIN.....	93
Figura 26.2. Parámetros de Fugacity .....	96
Figura 26.1. Elección del programa LEVIIIEPI .....	96
Figura 26.2.1. Selección del modelo y valores para los valores de vida media de la fugacidad. ....	97
Figura 26.2.2. Selección del modelo de emisiones .....	98
Figura 26.2.3. Selección de los tiempos de advección .....	98
Figura 26.2.4. Selección del modelo MCI.....	99
Figura 27.1 y 27.2 Opciones para finalizar los cálculos y obtener resultados .....	99
Figura 28. Datos faltantes .....	100
Figura 29. Esquema del transporte y destino en una planta de tratamiento de agua residual de lodos activados .....	106
Figura 30.1. Remoción y biodegradación del 1 H-benzotriazol en una PTAR biológica: Método predeterminado .....	110
Figura 30.2. Remoción y biodegradación del 1 H-benzotriazol en una PTAR biológica: Método EPA-draft-BIOWIN .....	111
Figura 31. Perfil de distribución del 1 H – benzotriazol en los compartimientos ambientales. Escenario de emisión: Agua.....	113
Figura 32. Vidas medias del 1 H – benzotriazol en cada compartimiento ambiental .....	113

Figura 33. Partición del 1 H – benzotriazol en los compartimientos ambientales. Entorno evaluativo: Agua .....	114
Figura 34. Pérdidas del 1 H – benzotriazol por reacción y advección en el agua	114
Figura 35. Intercambio del 1 H – benzotriazol entre compartimientos ambientales y sus procesos de transporte .....	116

# INTRODUCCIÓN

Millones de metros cúbicos de aguas residuales, descargas municipales, industriales y agrícolas son tratadas inadecuadamente o en la mayoría de los casos no reciben tratamiento alguno (Fondo para la Comunicación y la Educación Ambiental, A.C,2020). Diversos estudios han revelado la presencia de compuestos químicos en estos efluentes, cuyas características son la alta persistencia y baja degradación en el ambiente lo que provoca efectos tóxicos agudos y crónicos en el ecosistema, este grupo de compuestos son denominados Contaminantes Emergentes. Muchos de ellos se encuentran contenidos en detergentes, productos farmacéuticos, productos de cuidado personal, hormonas, edulcorantes, pesticidas, drogas ilícitas y sus metabolitos, así como las fragancias, los aditivos de gasolinas y los retardadores de flama.

Actualmente uno de los contaminantes emergentes de mayor interés es el benzotriazol y sus derivados, según Li *et al* (2017) se consideran “productos químicos de alto volumen de producción”. Su aplicación está destinada como agentes inhibidores de la corrosión, estabilizadores de luz ultravioleta en plásticos y antiempañantes (Li *et al.*, 2017). Son solubles en agua, por tanto no se eliminan completamente en las PTAR y resisten a la biodegradación (LU *et al.*, 2018).

Para la detección e identificación de estos compuestos es necesario llevar a cabo pruebas que requieren el uso de equipos altamente sensibles y costosos como la cromatografía de líquidos de alta resolución (HPLC) y cromatografías de gases y líquidos acopladas a masas (GC-MS y LC-MS). Hoy en día en México hay escasa información sobre la presencia de contaminantes emergentes liberados en el agua potable, debido, principalmente a la falta de recursos económicos para el monitoreo y la obtención de tecnologías, a su vez esto dificulta su regulación y el establecimiento de límites máximos permisibles para su control.

No obstante, existen programas informáticos que proporcionan información sobre el destino ambiental en los compartimientos ambientales, Cortés *et al* (2010) indican

que tales modelos incorporan algoritmos para estimar los procesos de transformación fotoquímicos, biológico y químicos; para realizar estas predicciones estos programas se basan en relaciones cuantitativas estructura-actividad (QSAR, por sus siglas en inglés) y estructura-propiedad (QSPR, por sus siglas en inglés), como señala Good *et al* (2019) estos modelos son generados y validados por análisis estadístico a partir de un grupo de moléculas con una actividad biológica o propiedad conocida.

Mediante el uso de la interfáz de programas de estimación, EPI SUITE v.4.11 y subprogramas como VWOLWIN, STPWIN y LEVEL III, se evaluarán propiedades fisicoquímicas, biológicas y ambientales del 1 H - benzotriazol en el entorno natural y la remoción en un tratamiento biológico. Todo ello con la finalidad de ampliar el panorama de estudio de dicho contaminante y aportar información sobre la vida media que posee en ríos y lagos, el porcentaje de eliminación en una planta de tratamiento de agua residual y su partición en los diferentes compartimentos ambientales. Los resultados reflejados permitirán tomar acciones para regular su uso en México.

## PLANTEAMIENTO DEL PROBLEMA

Desde la década de 1980 y hasta la fecha se han llevado a cabo investigaciones científicas en las que se han identificado diversas sustancias de origen sintético o natural conocidas como contaminantes emergentes, y que debido a sus propiedades químicas pueden transportarse fácilmente hacia cualquier compartimiento ambiental provocando efectos adversos como toxicidad crónica, disrupción endocrina y bioacumulación (Water Quality Association, 2014; Luján, 2015).

Los benzotriazoles y sus derivados forman parte de este grupo de contaminantes, Rodríguez (2015) menciona que son altamente peligrosos y que han sido detectados con mayor frecuencia en el medio acuático. A pesar de los daños que causan en el ecosistema y en la salud humana, son productos considerados de alto volumen de producción y según esto, Minella *et al* (2020) indican que anualmente se producen 9000 toneladas en Estados Unidos y una producción mucho mayor en todo el mundo.

Por otra parte, los benzotriazoles junto con otros contaminantes emergentes son vertidos en aguas superficiales, Robledo *et al* (2017) señalan que mundialmente se desechan 300 millones de toneladas de todos estos compuestos al año. Por si fuera poco, en México, sólo el 48.4 % del agua residual generada por las descargas municipales (provenientes de los centros urbanos y rurales) y no municipales (derivadas de las actividades industriales) se procesa en plantas de tratamiento y un poco más de la mitad, que es el 51.6 % termina en mares, ríos, lagos e incluso se destina al riego agrícola (Comisión Nacional del Agua, 2018).

El problema radica en que los contaminantes emergentes son elementos traza, cuyas concentraciones son del orden de ng/l; por tanto, no se eliminan completamente en los sistemas convencionales de las plantas tratamiento en donde se llevan a cabo procesos fisicoquímicos como: coagulación, floculación, sedimentación, filtración, desinfección, filtración por membranas y tratamientos

biológicos. Además de la remoción ineficiente, otras de las desventajas son: el costo de inversión y operación, la remoción del 80 al 90 % de bacterias y 60% de materia orgánica, la generación de subproductos y el poder desinfectante limitado, así como el desperdicio de agua y la descomposición de las membranas (Leal, 2005).

Diversas investigaciones sostienen que la aplicación de tecnologías avanzadas de oxidación pueden ser la clave para la remoción e inactivación total de contaminantes, de hecho Vargas y Palacios (2017) mencionan que “dichas tecnologías son útiles como pretratamiento antes de un tratamiento biológico para contaminantes resistentes a la biodegradación o como proceso de postratamiento para efectuar un pulido de las aguas antes de la descarga a los cuerpos receptores”(p.4), no obstante estos procesos son restrictivos a aguas con bajas concentraciones de contaminantes y de sólidos suspendidos.

Por esta razón es necesario monitorear su presencia mediante métodos analíticos selectivos que implican el uso de equipos altamente sensibles. Una de las técnicas de mayor aplicación en el análisis cualitativo de los contaminantes emergentes es la Espectrometría de masas, sin embargo, Robledo *et al* (2017) mencionan que al efectuarse la fragmentación de los iones hay una elevación del ruido analítico lo que hace que esto sea una gran limitante. Otro de los métodos analíticos comúnmente empleados son la cromatografía líquida de alta resolución y la cromatografía de gases y líquidos acopladas a masas, no obstante, los cromatógrafos y los instrumentos que se ocupan en conjunto son muy costosos.

La escasa información de los contaminantes emergentes en los diferentes compartimientos ambientales debido a la falta de recursos para su monitoreo, aunado a la deficiencia de las plantas de tratamiento para la remoción e inactivación y la carencia de normas que regulen la descarga de éstos, son los grandes retos a los que nos enfrentamos actualmente.

## JUSTIFICACIÓN

Los contaminantes emergentes tienen la capacidad de persistir en el ecosistema debido a algunas propiedades químicas como son: solubilidad, volatilidad, absorción, biodegradación y polaridad (Robledo et al., 2017). El 1 H - benzotriazol y sus derivados cuentan con tal capacidad, por lo que es considerado uno de los contaminantes emergentes de mayor impacto para los organismos acuáticos, microorganismos y plantas; y para la salud humana, ya que es cancerígeno y mutágeno en mamíferos (Rodríguez, 2015).

Profundizar en el estudio, meramente, del 1 H - benzotriazol permite evaluar sus propiedades fisicoquímicas, biológicas y ambientales en el entorno natural y la remoción en un tratamiento biológico de agua.

Para obtener dicha información, una de las alternativas es el uso de programas basados en el modelo QSAR (Quantitative Structure-Activity Relationships, por sus siglas en inglés) ya que, según Lozano & Scior (2012) reúnen un conjunto de técnicas *in silico* conexas al diseño y la visualización espacial de moléculas, cálculo de propiedades fisicoquímicas moleculares, bioinformación y estadística. Además, poseen algunas ventajas como lo son: el bajo costo ya que no se requiere llevar a cabo experimentos que involucran equipos y reactivos, el uso de interfaces que facilitan el manejo y diseño, y la rapidez con la que se efectúan la construcción de las moléculas y el cálculo de descriptores (Lozano & Scior, 2012).

Existen diversos programas informáticos que poseen QSAR, estos son capaces de predecir la persistencia y el transporte de los contaminantes, algunos son: BENNX, Cal Tox, ChemCAN, Chemrange y SCHE, GloboPOP, y entre ellos se encuentra la interfaz de EPI SUITE v.4.11 (Cortés et al., 2010). EPI SUITE v.4.11 cuenta con una gama de programas, que permiten el estudio de las propiedades fisicoquímicas y modelos de destino ambiental.

El presente trabajo se enfoca en estimar algunas propiedades que influyen en el comportamiento y en el destino ambiental del 1 H - benzotriazol para identificar los posibles impactos a la salud y al ambiente. El estudio contempla estimar las vidas medias del 1 H - benzotriazol en un río y lago modelo mediante el programa WVOLVIN; por otra parte, con la aplicación STPWIN, se pretende determinar el porcentaje de remoción en plantas de tratamiento biológico de aguas residuales; mientras que LEVEL III es un modelo de fugacidad que predice la partición de sustancias químicas entre el aire, el suelo, los sedimentos y el agua (Environmental Protection Agency, 2020).

La información generada permitirá establecer un panorama más amplio en el contexto del análisis de riesgo respecto al uso del 1 H - benzotriazol, una sustancia de amplio uso en productos de uso cotidiano, conocer su comportamiento y destino en el ambiente, concientizará e impulsará el desarrollo de un marco legal y normativo para una mejor atención a los impactos que causa. Los aportes que EPI SUITE v.4.11 brinda al usuario son muchos, solo dependerá de lo que específicamente se esté buscando, por tal razón es el programa elegido para los estudios que se realizan en este trabajo.

# OBJETIVOS

## Objetivo general

Analizar *in silico* el comportamiento y destino ambiental del 1H - benzotriazol para conocer el riesgo ambiental provocado por su vertido en cuerpos de agua.

## Objetivos específicos

- Estimar la volatilidad del 1H - benzotriazol en ríos y lagos mediante el programa WVOLWIN™.
- Evaluar la distribución y el comportamiento del benzotriazol en los compartimentos ambientales con el software LEV3EPI™.
- Estimar el porcentaje de remoción y degradación del benzotriazol en una planta de tratamiento biológico por medio del programa STPWIN™.
- Comparar los datos estimados *in silico* respecto a bases de datos de sustancias químicas disponibles.

# HIPÓTESIS

El 1 H - benzotriazol posee características fisicoquímicas y biológicas que implican un impacto ambiental negativo al verterse a cuerpos de agua.

# CAPÍTULO I. ANTECEDENTES

## 1.1 Contaminantes emergentes

Muchos de los productos que ocupamos en el hogar o para el cuidado personal son producidos y consumidos de manera constante e inmoderada; dichos artículos contienen compuestos químicos que hasta la fecha siguen siendo objeto de estudio para la comunidad científica ya que se tiene información insuficiente sobre las repercusiones que estos podrían ocasionar en el ambiente y en la salud humana, además no hay normas que establezcan su regulación. Tales compuestos son de distinto origen y naturaleza química, se denominan “Contaminantes Emergentes” (CE), y la mayoría entran continuamente en el ambiente. La ocurrencia de este grupo de contaminantes en aguas residuales ha sido reportada desde la década de 1980 (Water Quality Association, 2014; Cortés et al., 2010).

Según la Red de laboratorios de referencia, centros de investigación y organizaciones afines para el seguimiento de sustancias ambientales emergentes en Europa (NORMAN) (2021) los contaminantes emergentes se definen como:

Contaminantes que actualmente no están incluidos en los programas de seguimiento de rutina a nivel europeo y que pueden ser candidatos para una futura regulación, dependiendo de la investigación sobre su ecotoxicidad, posibles efectos en la salud y percepción pública y del monitoreo de datos sobre su aparición en los distintos compartimentos medioambientales.

En relación con lo anterior, la Agencia de Protección Ambiental de Estados Unidos (US EPA) realizó una modificación en el término “Contaminantes Emergentes” (PE, por sus siglas en inglés) a “Contaminantes de Preocupación Emergente” (CEC’s, por sus siglas en inglés); el Servicio Geológico de Estados Unidos (US GS) (2021) explica el enfoque de este término, “se denominan colectivamente contaminantes de preocupación emergente y representan un cambio en el pensamiento tradicional,

ya que muchos se producen industrialmente, pero se dispersan en el medio ambiente a partir de usos domésticos”.

Por su parte, Geissen *et al* (2015) clasifica a los contaminantes emergentes en tres rubros: el primero como sustancias orgánicas, las cuales se dividen en sustancias persistentes, bioacumulativas y tóxicas (PBT), y sustancias polares; el segundo como compuestos inorgánicos; y el último rubro como contaminantes particulados.

De acuerdo con Calvo *et al* (2018), mencionan que los contaminantes emergentes son microcontaminantes ya que han sido detectados en concentraciones muy bajas del orden de pg/L a ng/L en las aguas subterráneas y superficiales, por el contrario Cortés *et al* (2010) señalan que en el suelo y los sedimentos llegan a alcanzar concentraciones de hasta g/kg. Algunos de estos contaminantes son liberados en cuerpos de agua, estudios indican que estos se encuentran presentes en efluentes de aguas residuales, plantas de tratamiento de agua residual, aguas superficiales y subterráneas, precipitaciones y en algunos casos en el agua potable a niveles traza (Wilkinson *et al.*, 2017). Estos contaminantes provienen de actividades como lo son: la ganadería, la agricultura y la acuicultura; y de lugares como lo son: las industrias (en especial las farmacéuticas), los hogares, plantas de tratamiento de agua residual y hospitales (Cruz, 2015), así como de los lixiviados de los rellenos sanitarios.

Los CE son elementos que se consideran, según Reinoso *et al* (2017) como:

*persistentes*, ya que resisten a los procesos de degradación; *bioconcentrables*, puesto que sí existe mayor afinidad en los tejidos que con el agua pueden concentrarse en mayor cantidad en estos; *bioacumulables*, debido a que la concentración de las sustancias aumentan con el tiempo; *biomagnificables*, por el aumento de la concentración al avanzar en los eslabones de la cadena trófica; *tóxicos*, dado que perjudican la salud humana, animal y vegetal; y con *movilidad ambiental*, por su capacidad para trasladarse en el medio ambiente y sus transformaciones, lo que ocasiona

que sustancias peligrosas se transformen en otras potencialmente más tóxicas (p.58).

Existen una amplia gama de contaminantes emergentes contenidos en: artículos para el cuidado personal, esteroides y hormonas, fármacos, aditivos industriales, aditivos alimentarios, drogas de abuso, retardantes de flama bromados, surfactantes, cloroalcanos (parafinas cloradas), compuestos perfluorados, plaguicidas y otros agroquímicos, detergentes de tipo alquifenol etoxilado, plastificantes y subproductos de desinfección del agua potable (Gil et al., 2012).

La NORMAN (2021) proporciona un listado de más de 1036 sustancias individuales, las cuales se dividen en 25 clases de acuerdo con la frecuencia de detección en muestras ambientales (Caviedes et al., 2017).

### **1.1.2 Situación de los contaminantes emergentes en México**

México es de los países con mayor atraso en información, a pesar de esta problemática, existe evidencia de la presencia de algunos compuestos orgánicos no regulados, ejemplo de ello son los estudios realizados en aguas residuales urbano industriales de Morelia, Michoacán en las que identificaron por medio de espectrometría de masas ESI-MS-TOF la presencia de contaminantes emergentes como: tetraciclina, cefaclor, cefadroxilo, ampicilina, clonazepam, lormetazepam, secobarbital, maprotilina, levotiroxina, cis-androsterona, paracetamol, lidocaína, bromfeniramina, fexofenadina, amfetamina, morfina, benzoilecgonina, 11-nor- $\Delta^9$ -THC-9-COOH, dimetilamfetamina, fenciclidina, metadona y polietilenglicol (Robledo et al., 2017).

Otra de las aportaciones más relevantes sobre contaminantes emergentes se ve reflejada en los trabajos de Durán *et al* (2014), el primero sobre la movilidad del triclosán, naproxeno y carbamazepina; y el segundo, referido a la fotólisis, biodegradación y transporte de estos compuestos. Ambos estudios tuvieron lugar en el Valle de Tula, Hidalgo (Durán et al., 2015).

Por su parte, el Instituto Mexicano de Tecnología del Agua (IMTA) y la Secretaría de Medio Ambiente y Recursos Naturales (SEMARNAT) (2010) desarrollaron un proyecto en el que listaron e identificaron 50 contaminantes de “importancia potencial alta en México”, los criterios que tomaron para priorizarlos fueron: los volúmenes de uso, la relevancia en la salud pública, el interés por su acción toxicológica y el interés científico por su mecanismo de acción. La Tabla 1 presenta dicho listado:

**Tabla 1.** Listado de contaminantes emergentes propuesto para México

Grupo	Observaciones	Compuestos	
<b>Esteroides y hormonas</b>	Endocrinos.	1 Estradiol	
	Asociados a algunos tipos de cáncer.	2 Testosterona	
	Alta tasa de uso, p. ej., anticonceptivos, terapia de reemplazo hormonal.	3 estrona	
		4 $\alpha$ -etinilestradiol	
		5 $\beta$ -etinilestradiol	
<b>Productos para el cuidado personal</b>	Uso diario y generalizado	6 Galaxolida	
	Ubicuos en el ambiente acuático	7 Tonalida y otros PCP	
	Datos de monitoreo ambiental y en humanos sugieren persistencia y bioacumulación de los almizcles.	8 Triclosán (enjuague bucal)	
		9 Oxibenzona	
		10 DEET (repelente de insectos)	
<b>Industriales</b>	Ubicuos en el ambiente acuático	11 Pentaclorofenol (PCP)	
	Algunos subproductos son más tóxicos en la molécula original.	12 Nonifenoles	
		13 Bisfenol A	
		14 Bis-2-etilhexilftalato	
	Algunos persistentes y bioacumulables.	15 Compuestos organoestánicos	
	Algunos asociados a: disrupción endocrina, cáncer y daño en el sistema nervioso central y otros órganos y sistemas.	16 Butilbencilftalato (BuBeP)	
<b>Fármacos</b>	Mayor consumo en México	17 Atenolol	28 Carbamazepina
	Algunos han sido detectados en aguas residuales y efluentes tratados.	18 Sulfasalazina	29 Salvasartán
		19 Ibuprofeno	30 Metilprednisolona
		20 Diclofenaco	31 Taladafilo
	Liberación constante en el ambiente.	21 Nimesulida	32 Dexametasona
		22 Ketoprofeno	33 Clorfenamina
	Efectos desconocidos a organismos no blanco.	23 Metil de ácido salicílico	34 Astemisol
		24 Ácido mefenámico	35 Amlodipino
		25 Gemfibrozil	36 Diltiazem
			37 Pentoxifilina

		26 Ácido clofibrico y metabolitos	37 Avilamicina
		27 Bezafibrate	39 Metoprolol
<b>Antibióticos</b>	Se ha demostrado selección de cepas resistentes a antibióticos circulando en el ambiente. Uso indiscriminado en México, tanto en medicina humana como en veterinaria.	41 Sulfametoxazol	40 Citrato de sildenafilo
		42 Trimetroprima	47 Cloranfenicol
		43 Ciprofloxacino	48 Conazol
		44 Roxitromicina	49 Imidazoles y triazoles
		45 Norfloxacino	50 Sulfacloropiridazina
		46 Sulfadiazina	

*Nota.* Fuente: Cortés, J. E., Martín, A., Calderón, C. G., & Palacios, L. (2010). Remoción de contaminantes emergentes de importancia ambiental y sanitaria. Segunda etapa. Informe final.

Así mismo la Comisión Nacional del Agua (CONAGUA), brinda el nombre de algunos de los contaminantes emergentes de interés para México, estos se muestran a continuación:

**Tabla 2.** Contaminantes emergentes de interés para México según CONAGUA

Contaminantes emergentes	
1) Atenolol	10) Sulfametoxazol
2) Carbamazepina	11) Tetraciclina
3) Claritromicina	12) Azitromicina
4) Difenhidramina	13) Amoxicilina β-lactámico
5) Metoprolol	14) 17β-Estradiol
6) Trimetroprim	15) Estrona (E1)
7) Oxitetraciclina	16) Glisofato
8) Roxitromicina	17) Plaguicidas
9) Sulfadimetoxina	

*Nota.* Fuente: CONAGUA (2020). Lista de contaminantes emergentes de interés nacional. Solicitud No. 1610100215520

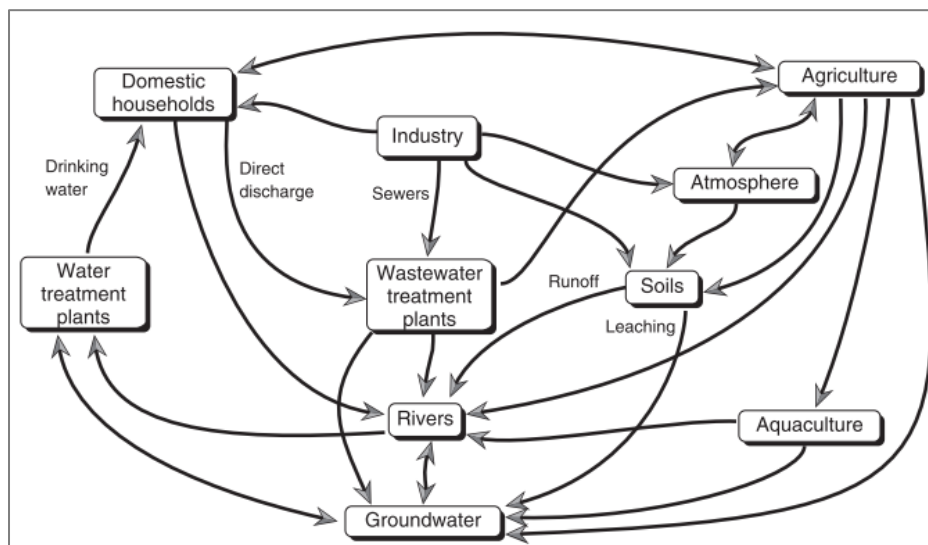
### 1.1.3 Destino ambiental y comportamiento de los contaminantes emergentes

La estructura química de una sustancia, así como las propiedades fisicoquímicas que está presente, por ejemplo: volatilidad, presión de vapor, solubilidad en agua, polaridad, coeficiente de partición octanol-agua, constante de disociación ácida; aunado a las interacciones entre los compartimentos ambientales, son cualidades

intrínsecas que inciden en la estabilidad, transporte, transformación y destino ambiental de la sustancia (Calvo et al., 2018; Geissen et al., 2015).

La propagación de los contaminantes emergentes hacia el agua, aire, suelo, biota y sedimentos es el resultado conjunto de diferentes fuentes y rutas de emisión, las cuales se ilustran en la Figura 1.

**Figura 1.** Principales fuentes y rutas de emisión de Contaminantes Emergentes



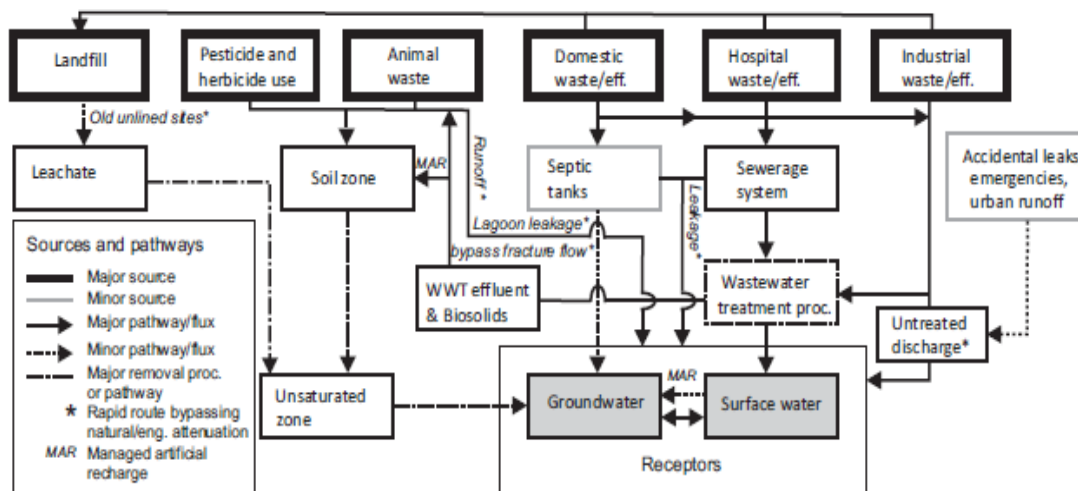
Nota. Fuente: Calvo, F., García, J. I., & Dobado, J. A. (2018). *Emerging Pollutants: Origin, structure, and properties*. In *Handbook of Environmental Analysis* (1era ed.). WILEY-VCH.

### 1.1.3.1 Contaminantes emergentes en el agua

El compartimento ambiental que más se ha visto afectado por la contaminación y la presencia de contaminantes emergentes es el agua. Como se muestra en la Figura 2, las vías de entrada difusas de los contaminantes emergentes son mediante lixiviados de vertederos y actividades económicas como la agricultura (mediante el uso de herbicidas y pesticidas) y la ganadería; mientras que las vías de entrada directas hacia las aguas superficiales y subterráneas provienen de las plantas de tratamiento de agua residual las cuales reciben efluentes domésticos, industriales y de hospitales. No obstante, Wilkinson *et al* (2017) menciona que los procesos que se llevan a cabo en las plantas de tratamiento de agua residual son insuficientes ya

que no se eliminan completamente los contaminantes, de hecho estudios recientes han revelado la aparición de más de 80 compuestos y metabolitos en el medio acuático e incluso en el agua potable; cabe recalcar que no todos los efluentes son tratados por lo que estos son vertidos directamente en los ríos y lagos.

**Figura 2.** Vías de recepción de contaminantes emergentes



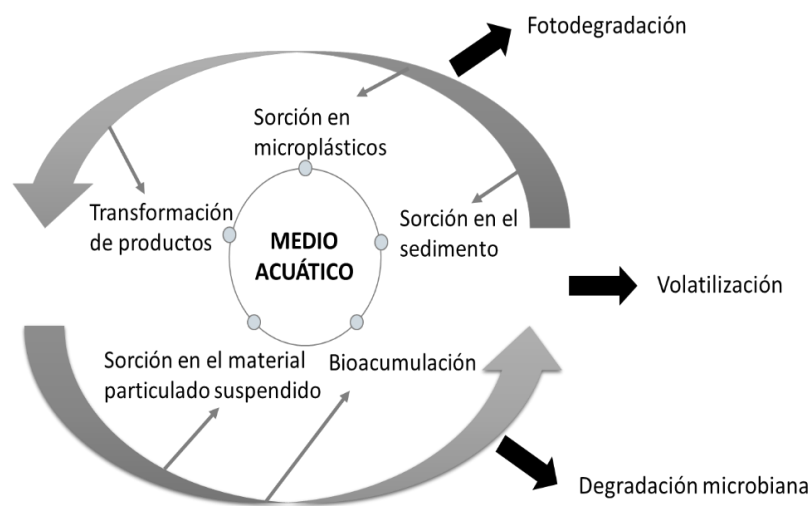
Nota. Fuente: Stuart, M., & Lapworth, D. (2013). *Emerging organic contaminants in groundwater*. ResearchGate.

En adición a lo anterior, Wilkinson *et al* (2017) menciona que las fuentes de agua varían de un lugar a otro y las concentraciones son consistentemente más altas en el agua subterránea, además Stuart & Lapworth (2013) indican que hay una gama más amplia de contaminantes emergentes debido a la entrada directa de fuentes de aguas residuales, tiempos de residencia cortos y la capacidad de dilución limitada en comparación con el agua subterránea.

En lo que atañe al destino ambiental de los contaminantes emergentes en el medio acuático, así como la atenuación de estos es posible que suceda de diferentes formas con base a las propiedades intrínsecas del compuesto y de la naturaleza de los compartimentos que interactúan con el agua. La Figura 3 ilustra los posibles efectos durante el transporte de los contaminantes emergentes, los principales son: la sorción en los sedimentos, la sorción en microplásticos también presentes en el medio, la transformación de los contaminantes en otros subproductos mediante procesos químicos, fotoquímicos, microbiológicos o una combinación de todos

estos; la sorción del material particulado suspendido en las aguas superficiales y la bioacumulación. Lo que respecta a la atenuación, esta dependerá de factores relacionados con la estación, la ubicación, la hidrología, el flujo, la biodegradación (fotodegradación, degradación microbiana, etc.), la asociación con otros compartimentos ambientales como los sedimentos y el material particulado en suspensión, así como la química del sistema acuático y de los contaminantes específicos (Wilkinson et al., 2017).

**Figura 3.** Destino ambiental de los CE en el medio acuático



*Nota.* Fuente: Modificación de: Wilkinson, J., Hooda, P. S., Barker, J., Barton, S., & Swinden, J. (2017). *Occurrence, fate and transformation of emerging contaminants in water: An overarching review of the field.* Environmental Pollution, 231, 954–970

### 1.1.3.2 Contaminantes emergentes en la atmósfera

Los contaminantes emergentes que entran a la atmósfera son elementos particulados, estos se presentan en forma de partículas de polvo, humo y aerosoles. Estos pueden entrar a la atmósfera a partir de dos formas: mediante las emisiones procedentes de las industrias durante la fabricación o incineración de productos o cuando la sustancia química presente en las aguas superficiales o en las plantas de tratamiento de agua residual se volatiliza.

Según Calvo *et al* (2018) el tiempo que las partículas permanecen en la atmósfera, así como su dispersión dependen de su tamaño y densidad, además mencionan

que las partículas gruesas se depositan en horas o días y estas consiguen desplazarse a grandes distancias (km), por su parte, las partículas cuyo diámetro es menor a 1  $\mu\text{m}$  escapan al ser arrastradas por la precipitación causando cortos periodos de residencia (de 10 a 20 días), y finalmente, los polvos y aerosoles estratosféricos alcanzan largos tiempos de residencia (de 1 a 3 años).

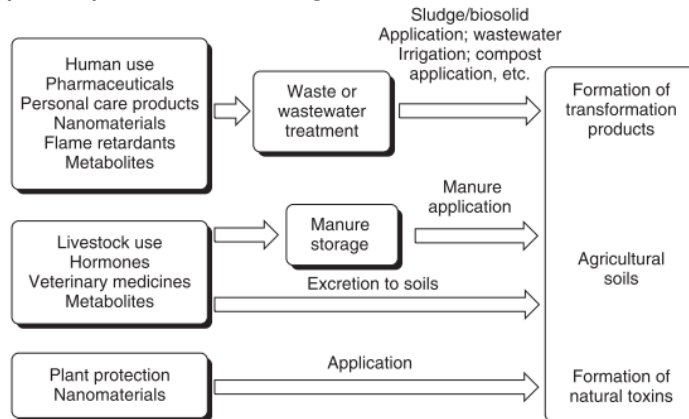
Retomando la Figura 1 los contaminantes emergentes que se encuentran en la atmósfera podrían depositarse al suelo a través de la precipitación o transportarse al medio acuático.

### **1.1.3.3 Contaminantes emergentes en el suelo**

De acuerdo con la Figura 4 los principales procesos de migración de los contaminantes hacia el suelo son los siguientes: el primero engloba los residuos de las plantas de tratamiento de agua residual en donde no se depuran completamente productos de uso personal, fármacos, nanomateriales, retardantes de flama, metabolitos y un sinnúmero de compuestos que se encuentran en muy bajas concentraciones, dichos residuos permanecen en lodos biológicos y en biosólidos, los primeros se pueden depositar naturalmente en el suelo y los segundos, por su alto contenido en nutrientes son aplicados en el campo como fertilizantes, del mismo modo las aguas residuales no tratadas se utilizan para la irrigación; el segundo proceso es a través de los residuos de las heces u orina de animales (contienen hormonas y fármacos) que son ocupados como abono para los suelos agrícolas; y el tercero mediante el uso de agroquímicos (pesticidas y herbicidas) en plantas y cosechas en donde se forman toxinas naturales.

Una vez depositados en el suelo, los contaminantes pueden infiltrarse a las aguas subterráneas. La extensión del transporte se verá influenciada por la persistencia de los contaminantes emergentes y de las interacciones que estos tengan con el suelo y los sedimentos (Calvo et al., 2018).

**Figura 4. Principales procesos de migración de los CE al suelo**



*Nota.* Fuente: Calvo, F., García, J. I., & Dobado, J. A. (2018). *Emerging Pollutants: Origin, structure, and properties.* In *Handbook of Environmental Analysis* (1era ed.). WILEY-VCH.

### 1.1.4 Contaminantes emergentes en el ambiente y la salud

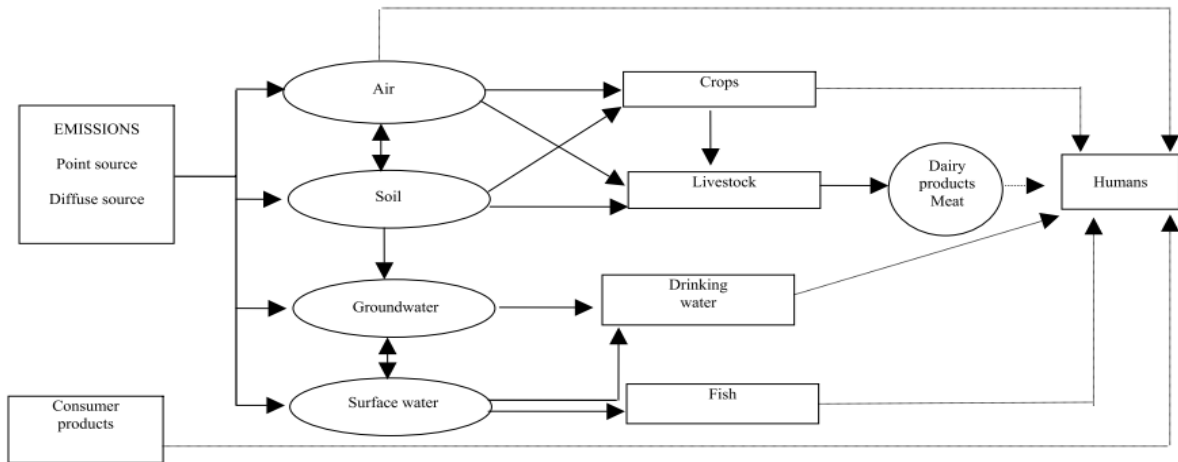
La introducción de los contaminantes emergentes en los diferentes medios (agua, aire, suelo y sedimentos) causa daños ambientales, esto es definido por la Ley Federal de Responsabilidad Ambiental (LFRA, artículo 2o., fracción III) como:

La pérdida, cambio, deterioro, menoscabo, afectación o modificación adversos y medibles del hábitat, de los ecosistemas, de los elementos y recursos naturales, de sus condiciones químicas, físicas o biológicas, de las relaciones de interacción que se dan entre estos, así como de los servicios ambientales que proporcionan (p.2).

Cabe mencionar que algunas sustancias químicas pueden reaccionar con el medio ambiente y transformarse, generando subproductos potencialmente tóxicos para las especies vegetales, animales y para la salud humana. La exposición a una sustancia química, tal como lo define la Agencia de Protección Ambiental (2012) es:

Cuando los contaminantes que entran en contacto con el cuerpo presentan una amenaza potencial para la salud, por inhalación, ingestión o rutas cutáneas. La ruta, la magnitud y la duración de la exposición contribuyen al riesgo final para el organismo (p. A-2).

**Figura 5. Representación de las principales rutas de exposición para los humanos**



*Nota.* Fuente: Intitution for Environmental and Health. (2004). *A screening method for ranking chemicals by their fate and behaviour in the environment and potential toxic effects in humans following non-occupational exposure*

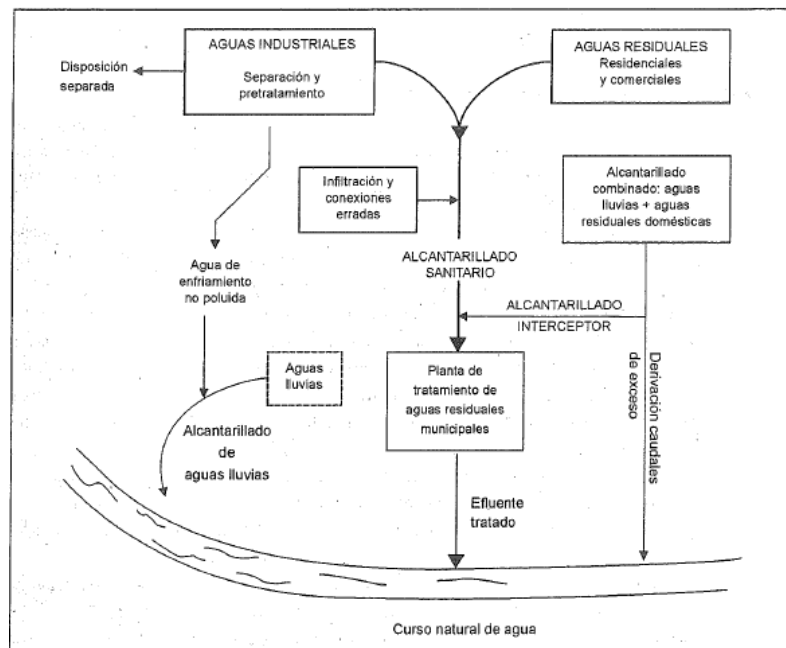
Por otro lado, Cuenca (2019) señala que la exposición prolongada puede causar inmunotoxicidad, definida por Trizio *et al* (1988) como “los efectos adversos de xenobióticos sobre el sistema inmunológico”; neurotoxicidad, el cual es un padecimiento que altera la actividad normal del sistema nervioso central (Instituto Nacional de Trastornos Neurológicos y Accidentes Cerebrovasculares, 2019); carcinogenicidad, para la Agencia de Protección Ambiental (2012) es la “habilidad de una sustancia de causar cáncer”; y, disrupción endocrina, en donde alguna sustancia o mezcla exógena altera la(s) función(es) del sistema endocrino y, en consecuencia, causa efectos adversos para la salud en un organismo intacto, o su progenie o (sub) poblaciones (Comisión Europea, 2020).

### **1.1.5 Tratamiento de contaminantes emergentes**

Las aguas residuales son consideradas por la Comisión Nacional del Agua (2018) como “todas aquellas de composición variada procedentes de las descargas de usos: público urbano, doméstico, industrial, comercial, de servicios, agrícola, pecuario, de las plantas de tratamiento y en general de cualquier otro uso, así como la mezcla de ellas” (p. 293).

En México las aguas residuales se dividen en dos grupos: las aguas residuales municipales, de abastecimiento público urbano y rural, que incluyen en su mayoría aguas negras y grises, y que son colectadas en el alcantarillado hacia plantas de tratamiento de agua residual; y las no municipales, provenientes de industrias de la manufactura, estas son vertidas directamente a cuerpos de agua nacionales sin ser colectadas por sistemas de alcantarillado (Romero, 2008; CONAGUA, 2018). La Figura 6 expone la entrada de las descargas municipales y no municipales en una planta de tratamiento de agua residual (PTAR), así como de las fuentes de escorrentía (lluvia y alcantarillado) hacia el curso de agua natural.

**Figura 6.** Principales fuentes de aguas residuales



Nota. Fuente: Romero, J.A. (2008). *Tratamiento de aguas residuales. Teoría y principios de diseño*. (3era ed.). Escuela Colombiana de Ingeniería.

Las aguas residuales se caracterizan por tener un color y olor desagradables, estas pueden contener: materia orgánica disuelta o particulada, compuestos orgánicos (carbohidratos, pesticidas, fenoles, proteínas, contaminantes emergentes, surfactantes, compuestos orgánicos volátiles, etc), compuestos inorgánicos (metales pesados, carbonatos, bicarbonatos, cloruros o sulfatos en exceso), nutrientes (nitrógeno, fósforo, potasio, etc), así como bacterias, virus y parásitos

(Leal, 2005); la Tabla 3 enlista algunos efectos adversos de estos elementos en el medio ambiente.

**Tabla 3. Efectos indeseables de las aguas residuales**

Contaminante	Efecto
Materia orgánica biodegradable	Desoxigenación del agua, muerte de peces, olores indeseables.
Materia suspendida	Deposición en los lechos de los ríos; si es orgánica se descompone y flota mediante el empuje de los gases; cubre el fondo e interfiere con la reproducción de los peces o trastorna la cadena alimenticia.
Sustancias corrosivas, cianuros, metales pesados, fenoles	Extinción de peces y vida acuática, destrucción de bacterias e interrupción de la auto purificación.
Microorganismos patógenos	Las aguas residuales domésticas pueden transportar patógenos y causar enfermedades.
Sustancias que causan turbiedad, temperatura, color y olor	El incremento de la temperatura afecta a los peces; el color, olor y turbiedad hacen estéticamente inaceptable el agua para uso público
Sustancias o factores que trastornan el equilibrio biológico	Pueden causar crecimiento excesivo de hongos o plantas acuáticas, las cuales alteran el ecosistema acuático, causan olores, etc.
Constituyentes minerales	Aumentan la dureza, limitan los usos industriales sin tratamiento especial, incrementan el contenido de sólidos disueltos a niveles perjudiciales para los peces o la vegetación, contribuyen a la eutrofización del agua.

*Nota.* Fuente: Romero, J.A. (2008). *Tratamiento de aguas residuales. Teoría y principios de diseño.* (3era ed.). Escuela Colombiana de Ingeniería.

En vista de lo anterior, las aguas residuales pueden presentar un sinnúmero de elementos, por lo que ubicar el uso y destino en relación con su calidad permitirá elegir la aplicación de algún tratamiento de remoción para que el efluente tratado pueda devolverse al medio o reutilizarse de manera segura.

La calidad del agua, según CONAGUA (2018) se “determina mediante la caracterización física y química de muestras de agua y su comparación con normas y estándares de calidad” (p.59); existen cuatro indicadores que permiten evaluar

este parámetro, estos son: la Demanda Bioquímica de Oxígeno a cinco días (DBO<sub>5</sub>), la cual determina la cantidad de materia orgánica biodegradable (véase Tabla 4.1); la Demanda Química de Oxígeno (DQO), que mide la cantidad total de materia orgánica (véase Tabla 4.2); los Sólidos Suspendidos Totales (SST), los cuales miden la cantidad de sólidos sedimentables, sólidos y materia orgánica en suspensión y/o coloidal (véase Tabla 4.3); y Coliformes Fecales (CF), que indican mediante su ausencia en el agua la existencia nula de otros organismos patógenos (véase Tabla 4.4) (SEMARNAT,2020; CONAGUA, 2018).

**Tabla 4.1. Escalas de clasificación de la calidad del agua con base a la DBO<sub>5</sub>**

Criterio [mg/l]	Clasificación	Color
DBO <sub>5</sub> ≤ 3	Excelente: No contaminada	Azul
3 < DBO <sub>5</sub> ≤ 6	Buena calidad: Aguas superficiales con bajo contenido de materia orgánica biodegradable	Verde
6 < DBO <sub>5</sub> ≤ 30	Aceptable: Con indicio de contaminación; aguas superficiales con capacidad de autodepuración o con descargas de aguas residuales tratadas biológicamente	Amarillo
30 < DBO <sub>5</sub> ≤ 120	Contaminada: Aguas superficiales con descargas de aguas residuales crudas, principalmente de origen municipal	Naranja
DBO <sub>5</sub> > 120	Fuertemente contaminada: Aguas superficiales con fuerte impacto de descargas de aguas crudas municipales y no municipales	Rojo

*Nota.* Fuente: CONAGUA. (2015). *Monitoreo de calidad del agua. In CONAGUA.* [http://www.conagua.gob.mx/CONAGUA07/Contenido/Documentos/TF\\_CalidadAgua/CalidaddelAgua.pdf](http://www.conagua.gob.mx/CONAGUA07/Contenido/Documentos/TF_CalidadAgua/CalidaddelAgua.pdf)

**Tabla 4.2. Escalas de clasificación de la calidad del agua con base a la DQO**

Criterio [mg/l]	Clasificación	Color
DQO ≤ 10	Excelente: No contaminada	Azul
10 < DQO ≤ 20	Buena calidad: Aguas superficiales con bajo contenido de materia orgánica biodegradable y no biodegradable.	Verde
20 < DQO ≤ 40	Aceptable: Con indicio de contaminación; aguas superficiales con capacidad de autodepuración o con descargas de aguas residuales tratadas biológicamente	Amarillo
40 < DQO ≤ 200	Contaminada: Aguas superficiales con descargas de aguas residuales crudas, principalmente de origen municipal	Naranja
DQO > 200	Fuertemente contaminada: Aguas superficiales con fuerte impacto de descargas de aguas crudas municipales y no municipales	Rojo

Nota. Fuente: CONAGUA. (2015). *Monitoreo de calidad del agua. In CONAGUA.* [http://www.conagua.gob.mx/CONAGUA07/Contenido/Documentos/TF\\_CalidadAgua/CalidaddelAgua.pdf](http://www.conagua.gob.mx/CONAGUA07/Contenido/Documentos/TF_CalidadAgua/CalidaddelAgua.pdf)

**Tabla 4.3. Escalas de clasificación de la calidad del agua con base a los SST**

Criterio [mg/l]	Clasificación	Color
SST ≤ 25	Excelente: Clase de excepción, muy buena calidad	Azul
25 < SST ≤ 75	Buena calidad: Aguas superficiales con bajo contenido de sólidos suspendidos, generalmente condiciones naturales. Favorece la conservación de comunidades acuáticas y el riego agrícola irrestricto.	Verde
75 < SST ≤ 150	Aceptable: Con indicio de contaminación; aguas superficiales con capacidad de autodepuración. Con descargas de aguas residuales tratadas biológicamente. Condición regular para peces. Riego agrícola restringido.	Amarillo
150 < SST ≤ 400	Contaminada: Aguas superficiales de mala calidad con descargas de aguas residuales crudas. Aguas con alto contenido de material suspendido.	Naranja
SST > 400	Fuertemente contaminada: Aguas superficiales con fuerte impacto de descargas de aguas residuales crudas municipales y no municipales con alta carga de contaminantes. Mala condición para peces.	Rojo

Nota. Fuente: CONAGUA. (2015). *Monitoreo de calidad del agua. In CONAGUA.* [http://www.conagua.gob.mx/CONAGUA07/Contenido/Documentos/TF\\_CalidadAgua/CalidaddelAgua.pdf](http://www.conagua.gob.mx/CONAGUA07/Contenido/Documentos/TF_CalidadAgua/CalidaddelAgua.pdf)

**Tabla 4.4. Escalas de clasificación de la calidad del agua con base a los CF**

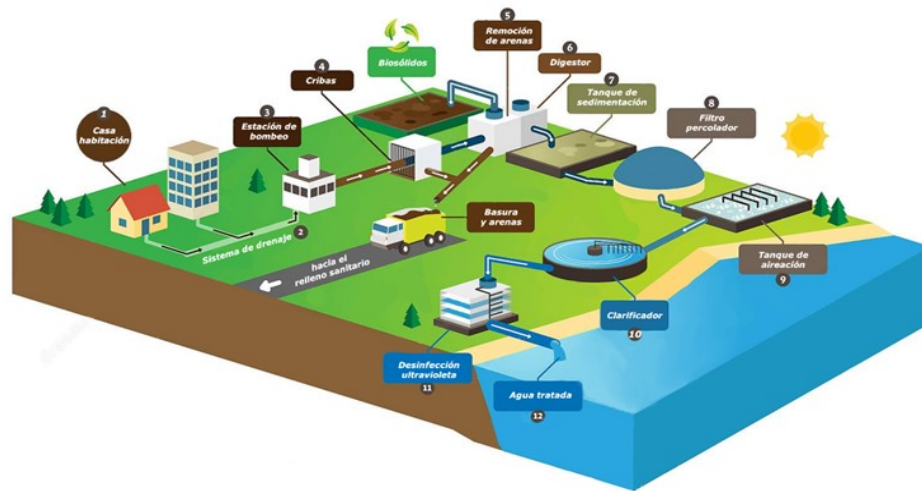
Criterio [NMP/100 ml]	Clasificación	Color
CF ≤ 100	Excelente: No contaminada	Azul
100 < CF ≤ 200	Buena calidad: Aguas superficiales con calidad satisfactoria para la vida acuática y para uso recreativo con contacto primario.	Verde
200 < CF ≤ 1000	Aceptable: Aguas superficiales con calidad satisfactoria como fuente de abastecimiento de agua potable y para riego agrícola.	Amarillo
1000 < CF ≤ 10000	Contaminada: Aguas superficiales con contaminación bacteriológica.	Naranja
CF > 10,000	Fuertemente contaminada: Aguas superficiales con fuerte contaminación bacteriológica.	Rojo

Nota. Fuente: CONAGUA. (2015). *Monitoreo de calidad del agua. In CONAGUA.* [http://www.conagua.gob.mx/CONAGUA07/Contenido/Documentos/TF\\_CalidadAgua/CalidaddelAgua.pdf](http://www.conagua.gob.mx/CONAGUA07/Contenido/Documentos/TF_CalidadAgua/CalidaddelAgua.pdf)

\*NMP: Número más probable

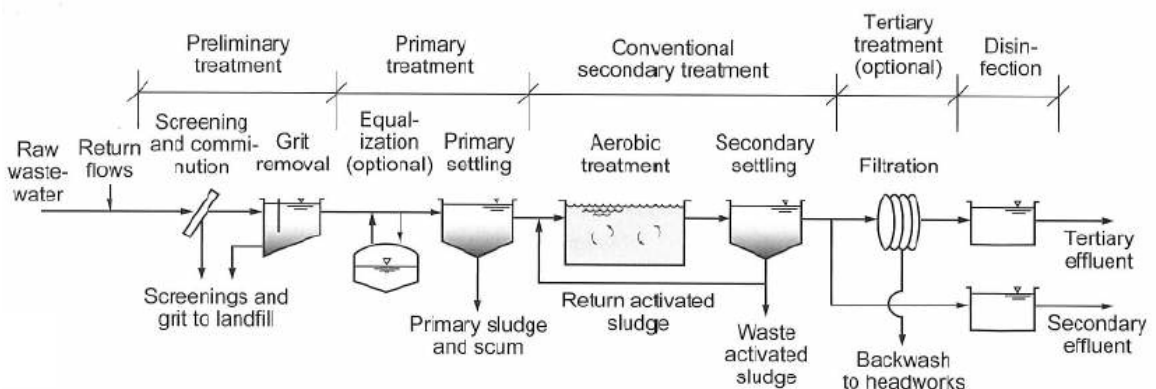
Tomando en cuenta los parámetros mencionados es posible diseñar la planta de tratamiento de agua residual, así como la elección de las operaciones unitarias involucradas en los diferentes procesos: pretratamiento, tratamiento primario, secundario y tratamiento terciario o avanzado (Figura 7.1).

**Figura 7.1.** *Planta de tratamiento de agua residual*



*Nota.* Fuente: Modificado de: <https://www.dreamstime.com/sewage-treatment-plant-infographic-vector-illustration-clean-dirty-water-sewage-treatment-plant-infographic-vector-illustration-image125798042>

**Figura 7.2.** *Tren de tratamiento de una PTAR*



*Nota.* Fuente: Tchobanoglous, G., Stensel, H.D., Burton, F., Abu, M & Bowden, G. (2014). *Wastewater engineering: Treatment and resource recovery* (5ta ed). McGraw Hill-Education

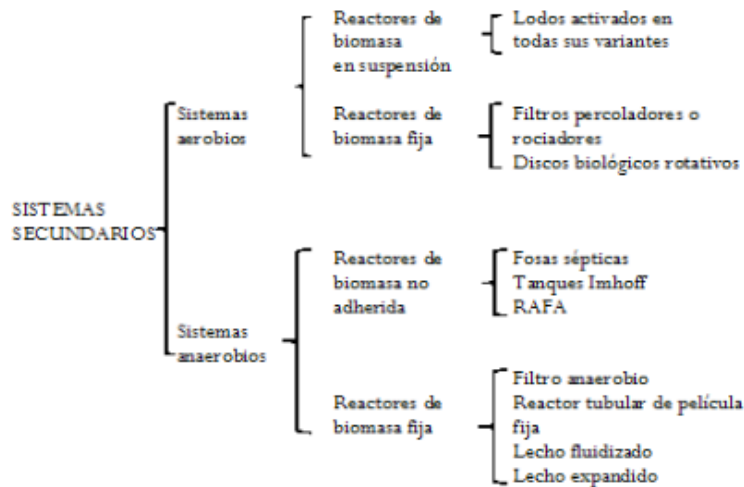
Como lo muestra la Figura 7.2, el primer proceso del tren de tratamiento de agua residual es el pretratamiento, en donde operaciones mecánicas como el cribado y bombeo del fluido entrante, permiten retirar fragmentos grandes que pueden averiar

la instalación de la PTAR, por ejemplo: ramas y trapos, así como arenas y grasas (De la Vega, 2012). El pretratamiento también es empleado en sistemas de depuración, potabilización y desalación (acciona,2020).

Seguidamente se encuentra el tratamiento primario, su función principal es la remoción parcial de sólidos suspendidos, materia orgánica y organismos patógenos mediante procesos químicos y físicos, como son la neutralización y coagulación, y la flotación, sedimentación y filtración, respectivamente; se dice, que la remoción es parcial pues por lo regular solo se remueve aproximadamente el 60 % de los sólidos suspendidos y un 35 a 40 % de la DBO (Romero, 2008). El tratamiento primario es un método preparatorio para el tratamiento secundario.

Por su parte, el tratamiento secundario busca eliminar la materia orgánica biodegradable y los sólidos suspendidos por medio de procesos biológicos, en donde microorganismos degradan la materia orgánica en sustancias más sencillas, tales como: bióxido de carbono ( $\text{CO}_2$ ), metano ( $\text{CH}_4$ ), nitrógeno amoniacal ( $\text{NH}_3$ ), nitratos ( $\text{NO}_3$ ) y agua ( $\text{H}_2\text{O}$ )(De la Vega, 2012). Dichos microorganismos pueden ser o no afines con el oxígeno, es decir, aerobios o anaerobios, en cuyo caso, se distinguen los sistemas secundarios en el diagrama (Figura 8); Calderon (2010) destaca que los microorganismos aerobios transforman cerca del 65% de la materia orgánica en biomasa, mientras que los microorganismos anaerobios producen metano y sólo transforman el 10% de la materia orgánica en biomasa. En otras palabras, Calderon (2010) define el tratamiento biológico o secundario como “una cadena alimenticia integrada por materia orgánica, bacterias, protozoarios y rotíferos” (p.6).

**Figura 8. Tipos de sistemas secundarios de una PTAR**

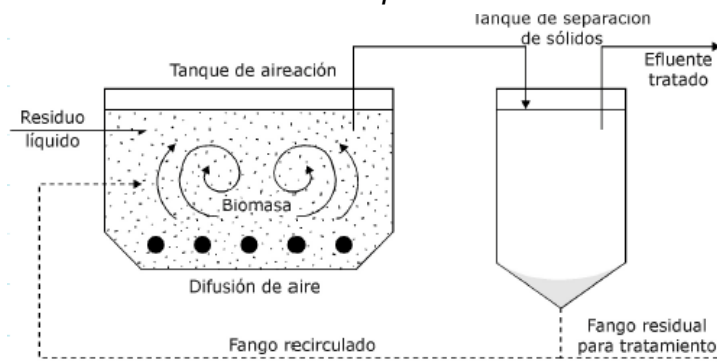


Nota. Fuente: De la Vega, M. (2012). *Eficiencia en plantas de tratamiento de aguas residuales* (1era ed.). Refugia Centro para la conservación de la ecobiodiversidad A.C

En tanto, se les considera *biomasa* a la materia orgánica de las aguas residuales y a la fracción orgánica biodegradable de los residuos sólidos urbanos (Romero, 2010). En función de lo planteado en la Figura 8, se tiene lo siguiente:

a) Reactores de biomasa en suspensión: Tienen lugar en un depósito o tanque de aireación, en este se encuentran presentes microorganismos, materia orgánica y el oxígeno disuelto. Una vez que la mezcla abandona el reactor entra en un sedimentador secundario, en el cual se separa la biomasa del agua; la biomasa o lodo precipita hacia el fondo del sedimentador. Cabe mencionar que estos lodos se regresan al tanque de aeración para mantener una concentración determinada de microorganismos (De la Vega, 2012) (Figura 9.1).

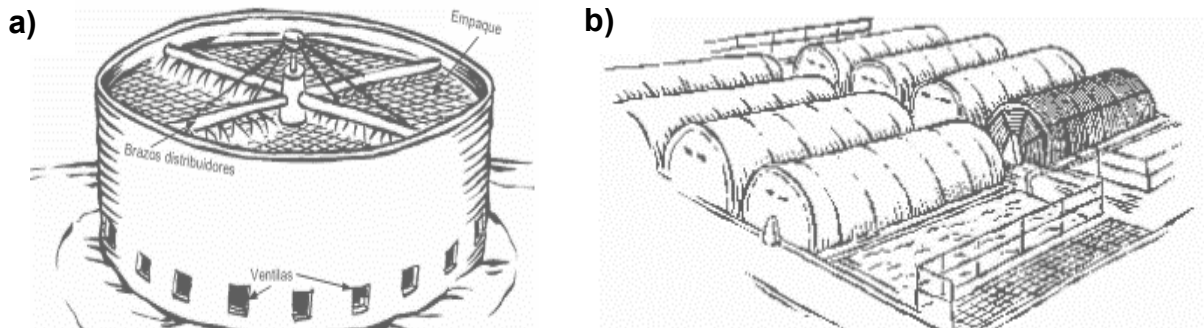
**Figura 9.1. Reactores de biomasa en suspensión**



Nota. Fuente: <http://www4.ujaen.es/~ajmoya/nuevo/docencia/apuntes2/transpa04.pdf>

- b) Reactores de biomasa fija: En estos las bacterias se adhieren a la superficie del material mediante la producción de sustancias poliméricas extracelulares que actúan como pegamento y permiten el crecimiento de la biopelícula (Nava et al., 2014). Los reactores de biomasa fijo más comunes se muestran en la Figura 9.2.

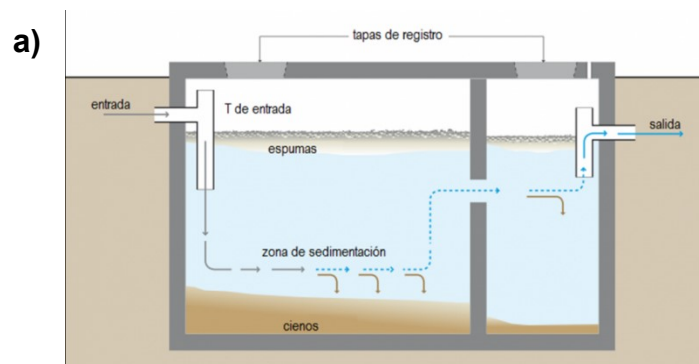
**Figura 9.2.** a) *Filtros percoladores*      b) *Discos biológicos rotativos*

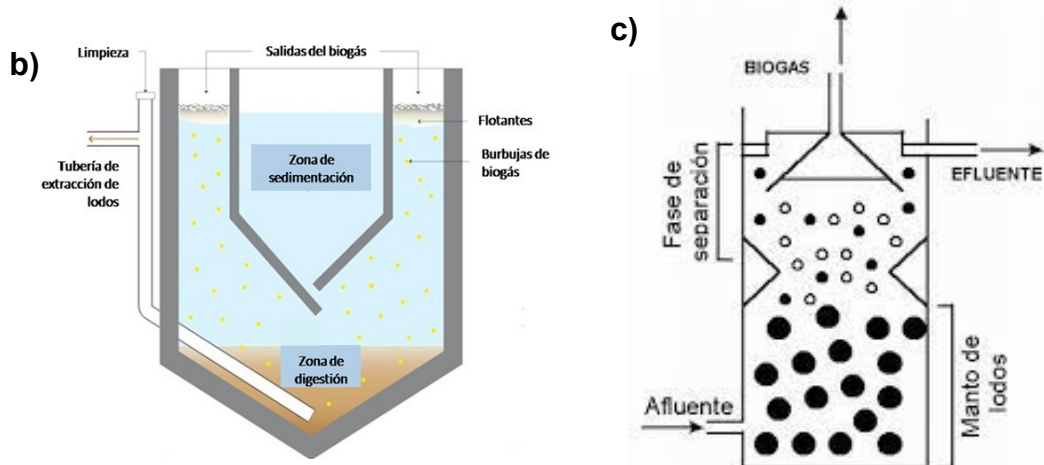


Nota. Fuente: Calderon, C. (2010). *Serie autodidactica de medición de la calidad del agua*. [http://www.conagua.gob.mx/CONAGUA07/Noticias/Sistemas\\_secundarios.pdf](http://www.conagua.gob.mx/CONAGUA07/Noticias/Sistemas_secundarios.pdf)

- c) Reactores de biomasa no adherida: Son separadores de sólidos suspendidos, cuando estos se separan se depositan en el fondo del tanque y ahí son degradados en un ambiente anaerobio (Calderon, 2010). En esta categoría de reactores se encuentran la fosa séptica y el tanque Imhoff (Figura 9.3). En el mismo orden de ideas, el reactor con manto de lodos anaerobios de flujo ascendente (RAFA) (Figura 9.3) representa la transición entre el reactor de biomasa fija y la no adherida, y en comparación con la fosa séptica y el tanque Imhoff, según De la Vega (2012) posee mayor capacidad de remoción de materia disuelta.

**Figura 9.3.** a) *Fosa séptica*, b) *Tanque Imhoff* y c) *RAFA*





Nota. Fuente:

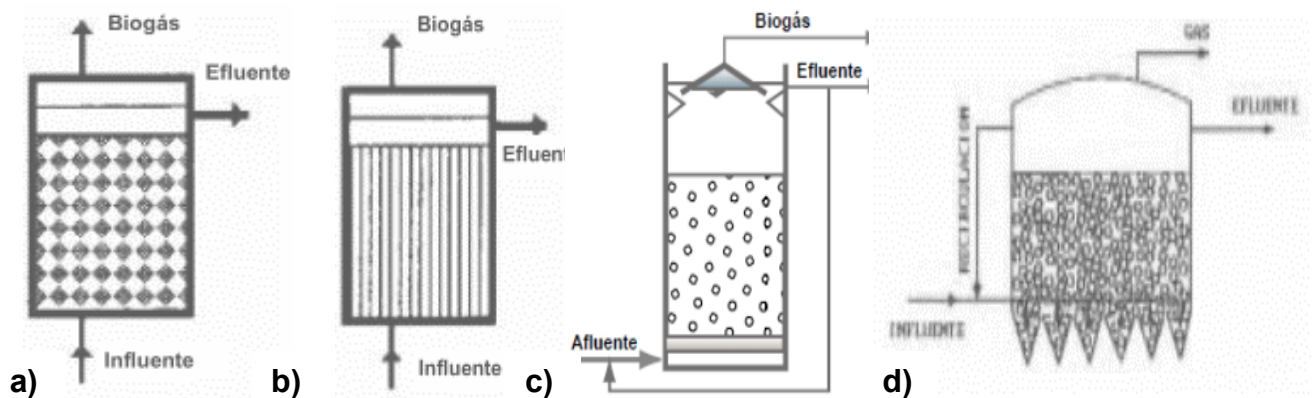
<sup>a</sup> <https://www.iagua.es/blogs/juan-jose-salas/humilde-fosa-septica-fundamentos-tipos-y-diseno>

<sup>b</sup> <https://www.iagua.es/blogs/juan-jose-salas/modesto-tanque-imhoff-fundamentos-y-diseno>

<sup>c</sup> [https://sswm.info/sites/default/files/reference\\_attachments/M%C3%81RQUEZ%20y%20MART%C3%8DNEZ%202011%20Reactores%20Anaerobios.pdf](https://sswm.info/sites/default/files/reference_attachments/M%C3%81RQUEZ%20y%20MART%C3%8DNEZ%202011%20Reactores%20Anaerobios.pdf)

d) Reactor anaerobio de biomasa fija: En este tipo de reactores ocurre una interacción entre la biomasa y el agua, el efluente generado de este reactor es pulido por un proceso aerobio. Entre los reactores anaerobios de biomasa fija destacan: los filtros anaerobios, el reactor tubular de película fija y el lecho fluidizado y expandido (Calderon, 2010) (Figura 9.4).

**Figura 9.4.** a) Filtros anaerobios b) Reactor tubular de película fija c) Lecho fluidizado d) Lecho expandido



Nota. Fuente: Calderon, C. (2010). *Serie autodidáctica de medición de la calidad del agua*. [http://www.conagua.gov.mx/CONAGUA07/Noticias/Sistemas\\_secundarios.pdf](http://www.conagua.gov.mx/CONAGUA07/Noticias/Sistemas_secundarios.pdf)

Finalmente, el tratamiento terciario consiste en la remoción de sólidos suspendidos residuales, comúnmente por medios de filtración granular o micropantallas. La desinfección es también típicamente incluida al igual que la remoción de nutrientes, esto para evitar la eutrofización de las fuentes receptoras (Tchobanoglous et al., 2014; Romero, 2008).

### **1.1.5.1 Tratamiento de aguas residuales en México**

El destino de las aguas residuales municipales y no municipales puede ser muy diverso, la mayoría se descarga en cuerpos de agua (esteros, lagunas, ríos, arroyos, etc.), se usan en el riego de áreas verdes y en zonas agrícolas, y se reúsan en el sector industrial. Por ello, el estado mexicano ha creado un marco jurídico que se encarga de regular las descargas de aguas residuales a los cuerpos receptores a través de las Normas Oficiales Mexicanas (NOM), siendo estas: NOM-001-SEMARNAT-1996, que establece los límites máximos permisibles de contaminantes en las descargas de aguas residuales en aguas y bienes nacionales, con el objeto de proteger su calidad y posibilitar sus usos; NOM-002-SEMARNAT-1996, que establece los límites máximos permisibles de contaminantes en las descargas de aguas residuales a los sistemas de alcantarillado urbano o municipal con el fin de prevenir y controlar la contaminación de las aguas y bienes nacionales, así como proteger la infraestructura de dichos sistemas; y NOM-003-SEMARNAT-1997, establece los límites máximos permisibles de contaminantes para las aguas residuales tratadas que se reúsen en servicios al público, con el objeto de proteger el medio ambiente y la salud de la población.

Por otra parte, cifras oficiales proporcionadas por la Comisión Nacional del Agua (2018), reportadas en el avance del Programa nacional Hídrico 2014-2018, indican que en México el 48.4 % del agua residual es procesada en plantas de tratamiento de agua residual (PTAR), este porcentaje abarca el tratamiento anual del 57.7 % de los 234.9 m<sup>3</sup>/s de las descargas municipales y el 38.37 % de los 218.1 m<sup>3</sup>/s de las descargas no municipales; mientras que el 51.6 %, igualmente producida por los

centros urbanos, rurales e industriales es vertida directamente a los cuerpos acuáticos.

De acuerdo con el Inventario Nacional de Plantas Municipales de Potabilización y de Tratamiento de Aguas Residuales en Operación, 2526 plantas se encuentran en funcionamiento. La Tabla 5 muestra los tipos de procesos que se llevan a cabo en las PTAR en México, cuantas de ellas se han instalado y el caudal tratado por cada tipo de tratamiento; como se observa hay un mayor número de plantas con lagunas de estabilización y de lodos biológicos, así mismo estas junto con la planta de tipo dual reflejan el mayor porcentaje de caudal de agua residual municipal procesada.

**Tabla 5. Resumen por proceso**

Proceso	No. de plantas	Caudal tratado	
		l/s	%
Aerobio	17	1841.3	1.36
Anaerobio	100	658	0.49
Biológico	30	730.3	0.54
Discos biológicos o biodiscos	25	921.8	0.68
Dual	22	23307	17.19
Filtros biológicos o rociadores o percoladores	39	5264.6	3.88
Fosa séptica	100	141.9	0.10
Fosa séptica+ Filtro biológico	39	42.6	0.03
Fosa séptica+Wetland	113	211.1	0.16
Humedales (Wetland)	75	1222.6	0.90
Lagunas aireadas	30	7082.6	5.22
Lagunas de estabilización	766	14099.4	10.40
Lodos activados	745	71720.3	52.90
Primario avanzado	11	4486.1	3.31
Primario o sedimentación	13	34.3	0.03
RAFA+ Filtro biológico	63	577.3	0.43
RAFA o Wasb	136	1204	0.89
RAFA, Wasb+ Humedal	34	351.6	0.26
Reactor enzimático	47	104.2	0.08
Sedimentación+ Wetland	21	39.9	0.03
Tanque Imhoff	47	303.8	0.22
Tanque Imhoff+ Filtro biológico	21	113	0.08

Tanque Imhoff+ Wetland	3	9	0.01
Terciario	3	36.2	0.03
Zanjas de oxidación	13	927.9	0.68
Otros	13	149.6	0.11
<b>Total nacional</b>	<b>2526</b>	<b>135580.4</b>	<b>100.00</b>

*Nota. Fuente: CONAGUA (2017). Inventario Nacional de Plantas Municipales de Potabilización y de Tratamiento de Aguas Residuales en Operación. Diciembre 2017*

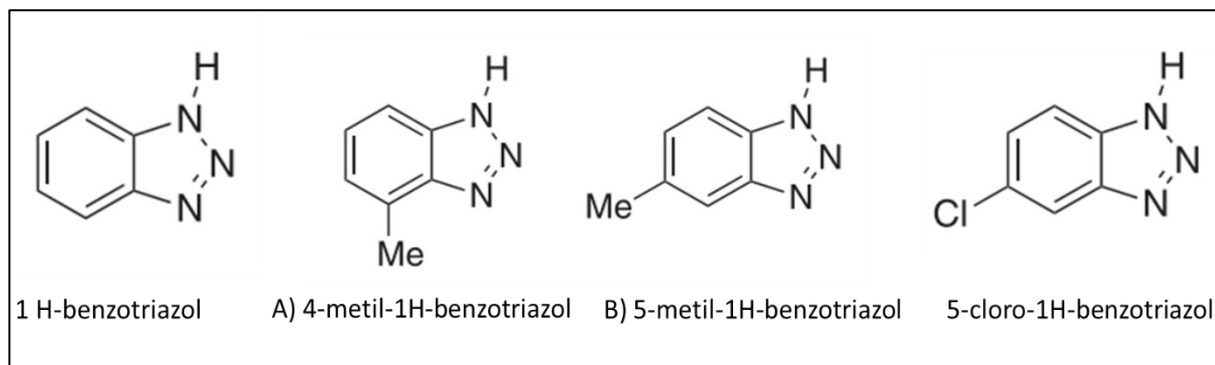
## 1.2 Benzotriazoles

Los benzotriazoles (BTZ) son compuestos orgánicos derivados del 1 H - benzotriazol (Davis et al., 1977; Rodríguez, 2015). Son sustancias químicas de “alto volumen de producción”, Minella *et al* (2020) mencionan que anualmente se producen 9000 toneladas en Estados Unidos y una producción mucho mayor en todo el mundo.

Estos compuestos comenzaron a fabricarse y usarse comercialmente a finales de la década de 1950 en Estados Unidos, además la patente inicial fue desarrollada en la aplicación de los BTZ como agentes inhibidores de la corrosión de metales en fluidos acuosos (a base de glicol) de intercambio de calor. La segunda patente data de la década de 1960 para el uso de los BTZ como aditivos estabilizadores de luz ultravioleta en plásticos y polímeros (Cantwell et al., 2015).

Actualmente existe una amplia variedad de benzotriazoles, sin embargo Davis *et al* (1977) consideran que el 1 H - benzotriazol, metil benzotriazol (mezclas de isómeros 4' y 5' metil) y 5 - cloro - 1 H - benzotriazol son de los más comercializados. La Figura 10.1 representa sus estructuras químicas.

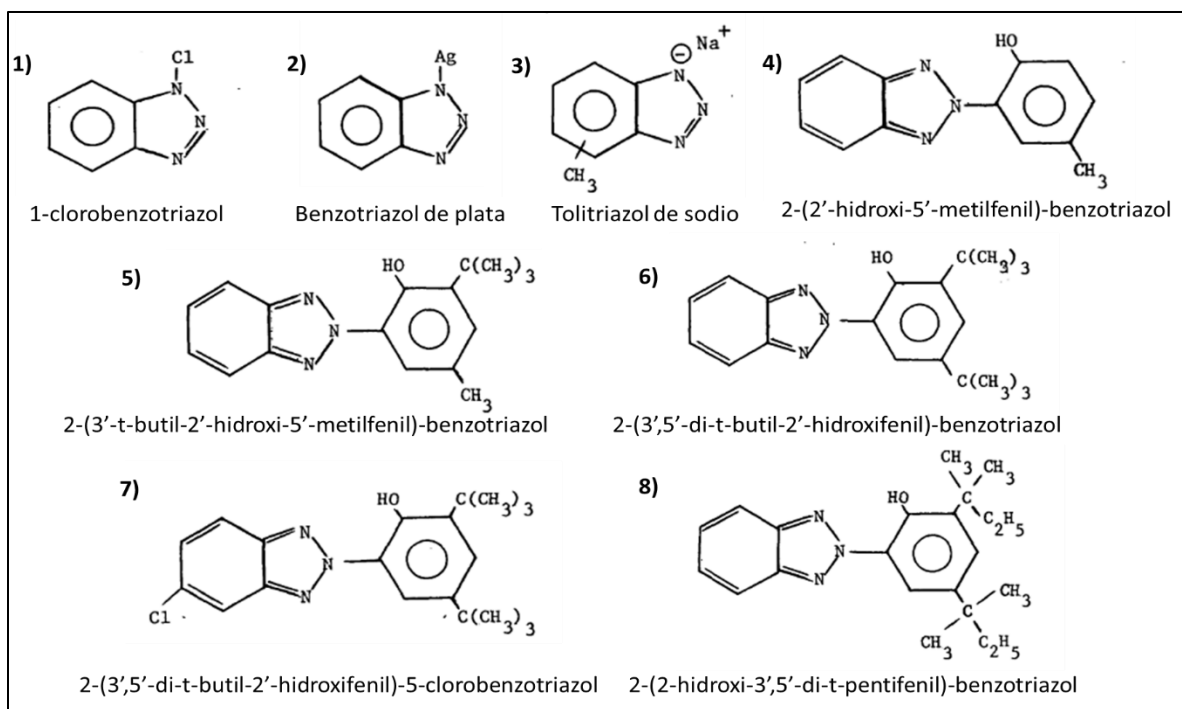
**Figura 10.1.** Benzotriazoles de mayor relevancia comercial



*Nota.* Fuente: Elaboración propia con información de: Calvo, F., García, J. I., & Dobado, J. A. (2018). *Emerging Pollutants: Origin, Structure and properties. In Handbook of Environmental Analysis (1era ed.). WILEY-VCH.* <https://doi.org/10.1201/b10505-26>

Después de esos tres compuestos, hay al menos otros ocho derivados que también son de interés y uso frecuente (Figura 10.2).

**Figura 10.2. Otros benzotriazoles de uso frecuente**



*Nota.* Fuente: Elaboración propia con información de: Davis, L., Santodonato, J., Howard, P., & Sexena, J. (1977). *Investigation of selected potential environmental contaminants: Benzotriazoles.*

### 1.2.1 Aplicación de los benzotriazoles

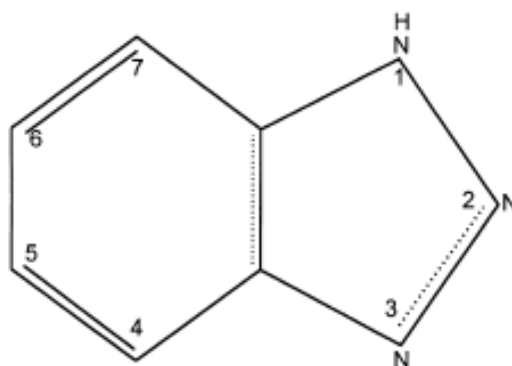
Los benzotriazoles cumplen con tres funciones principales en su aplicación: evitan la corrosión de metales, especialmente del cobre y sus aleaciones; estabilizan plásticos, pinturas, revestimientos y algunos solventes a base de aceite para que estos no sufran descomposición al ser expuestos a rayos del sol, luz fluorescente u otras fuentes de radiación ultravioleta; y fungen como constituyente antiempañante de las películas fotográficas (Davis et al., 1977).

Además de su uso en el sector comercial e industrial, los benzotriazoles también tienen un papel muy importante en la medicina pues, según Bajaj & Sakhuka (2016) en virtud de los tipos de enlaces que estos pueden formar, son capaces de unirse con enzimas y receptores en sistemas biológicos lo que hace que posean un amplio espectro de propiedades biológicas que abarcan: actividad reguladora del crecimiento de las plantas, colerética, antibacteriana, antiprotozoaria y antiviral.

### 1.3 1 H - benzotriazol

El 1 H - benzotriazol nombrado así por la IUPAC, también es conocido como 1,2,3-benzotriazol, Aziminobenceno, Benceno azimida o 1, 2 – Aminozofenileno; es un compuesto heterocíclico y recibe este nombre debido a que su estructura química presenta un anillo, o bien, un benceno fusionado a un heteroátomo (heterociclo) insaturado unido a tres átomos de nitrógeno (Montalvo et al., 2013; Beltoft et al., 2013). El “1 H” es referido a la posición en la que el átomo de hidrógeno ocupa con alguno de los átomos de nitrógeno (Davis *et al.*, 1977). En la Figura 11 se aprecia su estructura química.

Figura 11. Estructura química del 1 H-benzotriazol



Nota. Fuente: Pillard, D. A., Cornell, J. S., DuFresne, D. L., & Hernandez, M. T. (2001). *Toxicity of benzotriazole and benzotriazole derivatives to three aquatic species*. *Water Research*, 35(2), 557–560

Físicamente es un polvo cristalino, inodoro, de color blanco a bronceado claro. De acuerdo con la Tabla 6 presenta las siguientes propiedades fisicoquímicas.

Tabla 6. Información y propiedades fisicoquímicas del 1 H- Benzotriazol

Información adicional	
Nombre:	1 H- Benzotriazol
Número de CAS:	95-14-7
SMILES:	C1=CC2=NNN=C2C=C1
Fórmula molecular:	C <sub>6</sub> H <sub>5</sub> N <sub>3</sub>
Peso molecular:	119.13 g/mol
Propiedades fisicoquímicas	
Punto de ebullición:	350 °C

<b>Punto de fusión:</b>	100 °C
<b>Solubilidad:</b>	19,800 mg/L at 25 °C Soluble en alcohol, benceno, tolueno, cloroformo y N,N-dimetilformamida
<b>Densidad:</b>	1.36 g/cm <sup>3</sup>
<b>Presión de vapor:</b>	2.5X10 <sup>-5</sup> mm Hg a 25 °C
<b>Log kow:</b>	1.44
<b>pKa:</b>	8.37

*Nota.* Fuente: Elaboración propia con información de: National Center for Biotechnology Information (2021): *1 H- Benzotriazole*. PubChem en: <https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/compound/7220>

El 1H - benzotriazol es un ácido orgánico débil soluble y altamente polar, posee una naturaleza hidrofóbica débil por lo que escasamente podría ser absorbido en la materia orgánica, englobando estas características fisicoquímicas, es un compuesto moderadamente móvil en el medio acuático (Careghini et al., 2015; Minella et al., 2020).

### 1.3.1 Aplicaciones del 1 H - benzotriazol

El 1 H - benzotriazol se utiliza particularmente como agente anticorrosivo del cobre y sus aleaciones, tanto en condiciones de inmersión como a temperatura ambiente. Por tanto, es un aditivo clave en: fluidos industriales como aceites hidráulicos, grasas y lubricantes para componentes metálicos de maquinaria; en anticongelantes para los metales que forman parte de los sistemas de refrigeración y para aviones (ADAF's, por sus siglas en inglés); en formulaciones de cera y pulido; y en formulaciones de detergentes para lavavajillas (Cantwell et al., 2015).

El mecanismo anticorrosivo, como lo explican Bajaj & Sakhuka (2016) ocurre a causa de:

la acción quelante y la formación de una barrera de difusión física insoluble en la superficie del metal a través de fuertes interacciones  $\pi$  con la superficie del material, aunado al hecho de que el núcleo del benzotriazol se une a la superficie del cobre a través de sus pares solitarios de nitrógeno (p. 261).

### 1.3.2 Presencia del 1 H - benzotriazol en el ambiente

El 1 H - benzotriazol posee propiedades fisicoquímicas (solubilidad, polaridad, coeficiente de partición octanol-agua, etc.) que lo hacen ser un compuesto estable, persistente y resistente a la oxidación, hidrólisis y biodegradación en condiciones ambientales, aunado al hecho de que es un compuesto no regulado, es considerado en la lista de sustancias emergentes de la NORMAN como un *contaminante emergente* (Durjava et al., 2013; Richarson S, 2021; Network of reference laboratories, research centres and related organizations for monitoring of emerging environmental substances, 2021). Careghini *et al* (2015) enfatizan que, el 1 H - benzotriazol en comparación con los demás benzotriazoles es el más usado y con mayor ocurrencia en los compartimentos ambientales.

La detección del 1 H - benzotriazol se ha llevado a cabo mediante técnicas analíticas como son: la Extracción en Fase Sólida, Cromatografía Líquida de Alta Resolución, y especialmente, Cromatografía Líquida y Gaseosa acoplada a masas (Asimakopoulos et al., 2013; LU et al., 2018). A continuación, la Tabla 7 recopila información de diferentes autores sobre la concentración del 1 H - benzotriazol en el agua, aire, suelo y sedimentos.

**Tabla 7.** Concentración del 1 H - benzotriazol en las diferentes matrices ambientales

Agua			
Agua subterránea			
Localización	Unidad	Valor	Referencia
Aeropuerto de Oslo "Fornebu" en Noruega	mg/m <sup>3</sup>	1.2–1100 (promedio 371)	Breedveld et al. (2002)
Aeropuerto de Oslo "Gardermoen" en Noruega	mg/m <sup>3</sup>	0.11–20 (promedio 4.75)	
Canton de Zúrich, Suiza	mg/m <sup>3</sup>	0.016–0.077 (promedio 0.047)	Kahle et al. (2009)
Europa	mg/m <sup>3</sup>	<0.001–1.032 (promedio 0.024)	Loos et al. (2010)
Al lado de la PTAR Adelaida, Australia	mg/m <sup>3</sup>	0.280±0.018	Liu et al. (2011)
Acuífero "Karstified", Alemania	mg/m <sup>3</sup>	0.0049–3.2418 (promedio 0.0434)	Reh et al. (2013)
Agua superficial			
Lago "Tegel", Berlin, Alemania	mg/m <sup>3</sup>	0.9	Weiss y Reemtsma (2005)

Ríos de Zurich, Suiza	mg/m <sup>3</sup>	0.06–6.3 (promedio 0.94)	Giger et al. (2006)
Lago de Zurich, Suiza	mg/m <sup>3</sup>	0.02–1.2 (promedio 0.55)	
Glatt river, Switzerland	mg/m <sup>3</sup>	0.636–3.69	Vousta et al. (2006)
Lagos en el interior de la región de Suiza	mg/m <sup>3</sup>	0.011–0.917 (promedio 0.211)	Kahle et al. (2009)
Ríos principales “Hengstbach y Hegbach”, Alemania	mg/m <sup>3</sup>	0.038–1.47 (promedio 0.35)	Kiss y Fries (2009)
Río “Leine”, corriente arriba de PTAR, Alemania	mg/m <sup>3</sup>	0.034–0.176 (promedio 0.095)	
Río “Leine”, corriente abajo de PTAR, Alemania	mg/m <sup>3</sup>	0.248–0.845 (promedio 0.510)	Nodler et al. (2011)
Río “Haihe”, China	mg/m <sup>3</sup>	0.5–4.5 (promedio 1.09)	Heeb et al. (2012) Esteban
Ríos “Manzanares y Jarama”, España	mg/m <sup>3</sup>	0.097–1.184	Esteban et al. (2014)

Aire					
Localización			Unidad	Valor	Referencia
Puerto España	Constantí, Cataluña,	España	ng/m <sup>3</sup>	0.60-3.9 (promedio 1.5)	
Puerto España	Tarragona, Cataluña		ng/m <sup>3</sup>	n.d.-0.97 (promedio 0.17)	Maceira et al. (2018)
Albani, Unidos	Nueva York, Estados		ng/m <sup>3</sup>	3.06	Xue et al. (2016)

Suelo					
Localización			Unidad	Valor	Referencia
Aeropuerto de Oslo “Fornebu” en Noruega			µg/kg p.s.	100–1700 (promedio 500)	Breedveld et al. (2002)
Tres aeropuertos de Estados Unidos			µg/kg p.s.	<3.1–4.1	McNeill y Cancilla (2009)

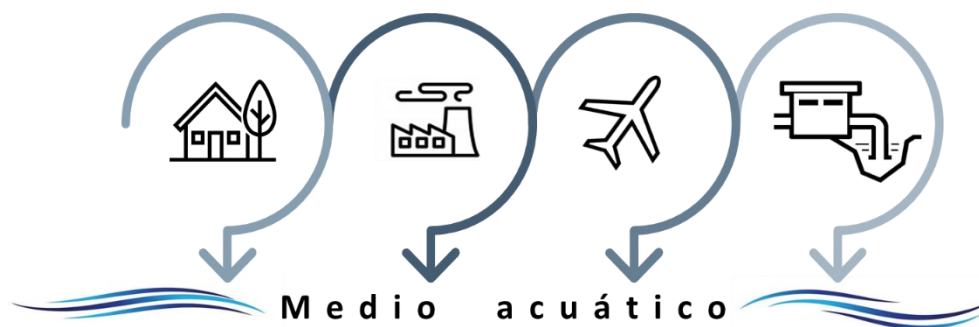
Sedimentos					
Localización			Unidad	Valor	Referencia
Aeropuerto de Oslo “Fornebu” en Noruega			µg/kg p.s.	<100–13,000 (promedio 4500)	Breedveld et al. (2002)
Río “Songhua”, China			µg/kg p.s.	0.385	
Ríos “Saginaw Detroit”, Estados Unidos			µg/kg p.s.	0.424–33.4 (promedio 9.43)	Zhang et al. (2011)

*Nota.* Fuente. Modificado de: Careghini, A., Mastorgio, A. F., Saponaro, S., & Sezenna, E. (2015). *Bisphenol A, nonylphenols, benzophenones, and benzotriazoles in soils, groundwater, surface water, sediments, and food: a review.* Environmental Science and Pollution Research, 22(8), 5711–5741.

\*p.s: Peso seco

La ocurrencia del 1 H – benzotriazol en los distintos compartimientos ambientales es variada, sin embargo, el principal destino ambiental es el medio acuático, en adición, la Figura 12 ilustra las principales fuentes de emisión de dicho contaminante.

**Figura 12. Fuentes de emisión del 1 H - benzotriazol**



*Nota.* Fuente: Elaboración propia

Las industrias son la mayor fuente de emisión, ya que en ellas se llevan a cabo todos los procesos de manufactura del 1 H - benzotriazol, además son el medio de distribución de otros sectores (industrial, doméstico y farmacéutico).

Por otra parte, están los efluentes de los aeropuertos, los cuales son vertidos a las aguas superficiales circundantes. Diversos estudios (ver Tabla 7) han demostrado la presencia de ADAF's (por sus siglas en inglés, aircraft deicing and anti-icing fluids) en tales efluentes, esto debido a que son productos que se emplean para proteger la infraestructura de las aeronaves y aeropuertos, sobre todo en la época invernal. Anualmente, Estados Unidos usa aproximadamente  $9.46 \times 10^7$  L de ADAF's (Cantwell et al., 2015; Seeland et al., 2012).

En cuanto a las plantas de tratamiento de agua residual, estas remueven parcialmente el 1 H - benzotriazol junto con otros compuestos y por ende los cuerpos receptores de agua reciben cargas constantes de estos mismos. En la Tabla 7 hay evidencia sobre la ubicuidad del 1 H - benzotriazol antes y después de una PTAR, es decir, del Río "Leine", en Alemania se tomaron dos muestras: la primera, corriente arriba de una PTAR, en donde las concentraciones obtenidas fueron de 0.34 a 176 ng/l; y la segunda, corriente abajo de la PTAR, en donde las concentraciones oscilaron de 248 a 845 ng/l. Es notable que el 1 H - benzotriazol no se eliminó por completo y que hubo un aumento, por tanto, las PTAR son una fuente de emisión significativa.

### 1.3.3 Efectos del 1 H – benzotriazol en el ambiente

#### 1.3.3.1 Bioacumulación del 1 H – benzotriazol

Se entiende por *bioacumulación* como “el resultado neto de la absorción, transformación y eliminación de una sustancia por un organismo a través de todas las vías de exposición (aire, agua, suelo, sedimentos y alimentación)” (Naciones Unidas, 2007, p.229). El Instituto Nacional de Ecología y Cambio Climático (2007) plantea que la bioacumulación es un gradiente continuo que permite separar por órdenes de magnitud a las sustancias poco acumulables de las altamente acumulables y biomagnificables. Dichas magnitudes de bioacumulación están dadas por el factor de bioconcentración (FBC), el cual es el cociente de la relación entre la concentración de la sustancia orgánica en los tejidos de los organismos ( $C_{iorg}$ ) y su concentración en el medio circundante en estado estacionario ( $C_{imed}$ ) (Ecuación 1) (Chiaia et al., 2013).

$$FBC = \frac{C_{iorg}}{C_{imed}} \quad (1)$$

Hasta la fecha, la información sobre la bioconcentración del 1 H – benzotriazol es muy limitada, sin embargo, en un estudio realizado por Chiaia y colaboradores en el 2013 determinaron que el FBC del 1 H – benzotriazol es igual a 2.9 L/kg en organismos invertebrados, como es el caso de la dafnia “*ephippia daphnia longispina-galeata*”. Dicho factor se considera un indicativo de un nivel bajo de bioconcentración del 1 H - benzotriazol en organismos acuáticos (Naciones Unidas, 2007).

En cuanto a la *biomagnificación*, esta es referida por *Davis et al* (1977) como “la concentración de un compuesto a través del consumo de organismos inferiores por organismos de la cadena alimentaria superior con un aumento neto en la concentración tisular” (p. 101). Para el 1 H – benzotriazol, su biomagnificación puede ser predicha a partir de su solubilidad en el agua; el potencial de biomagnificación

de este compuesto es igual a 4, lo cual quiere decir que no se biomagnificará de manera significativa en los organismos de la cadena alimenticia (Davis et al., 1977).

### 1.3.3.2 Toxicidad del 1 H – benzotriazol en organismos acuáticos

La toxicidad es definida por la EPA US (2021) como “el grado al cual una sustancia o mezcla de sustancias puede hacerle daño a los seres humanos o animales”. Según la NOM-052-SEMARNART- 2005, la toxicidad puede ser aguda, “provocando daños o la muerte de un organismo en un corto periodo de tiempo o en una sola exposición” (p.9); o crónica, “causando efectos dañinos a largo plazo en los organismos, generalmente a partir de exposiciones continuas o repetidas y que son capaces de producir efectos cancerígenos, teratogénicos o mutagénicos” (p.9).

De acuerdo con la hoja de seguridad del 1 H – benzotriazol, este es considerado un elemento potencialmente tóxico para los organismos acuáticos, con efectos nocivos duraderos (crónicos). En lo que respecta a la toxicidad aguda, diversas investigaciones han llevado a cabo pruebas para el 1 H – benzotriazol en especies vegetales, animales y bacterias, en tales pruebas se evalúan los tiempos de duración, los criterios de valoración del ensayo y la concentración letal o efectiva media (CL<sub>50</sub> y CE<sub>50</sub>, respectivamente) (Ver Tabla 8). Para el caso de los criterios de valoración del ensayo, estos corresponden a los efectos que el 1 H – benzotriazol puede causar. Tales efectos, como lo describe Prat (2019) pueden ser letales, es decir, los organismos afectados mueren; y subletales, los organismos no mueren, pero sufren algunas alteraciones en sus funciones vitales, por ejemplo, en la reproducción.

**Tabla 8.** Datos de la toxicidad del 1 H – benzotriazol en organismos acuáticos

Organismo	Duración de la prueba	Condición de la prueba	Criterio de valoración de ensayo	CL <sub>50</sub> [mg/l]	CE <sub>50</sub> [mg/l]	Referencia
<b>Plantas</b>						
Alga verde	72 h	ND	Crecimiento	-----	231	ND

<i>Scenedesmus subspicatus</i>	72 h	ND	Biomasa	-----	102	
<b>Bacterias</b>						
Proteobacteria	5 min	Microtox	Luminiscencia	-----	41.13	Cancilla et al.
<i>Vibrio fischeri</i>	15 min	Microtox	Luminiscencia	-----	41.65	(1997)
<b>Invertebrados</b>						
<i>Dafnia Ceriodaphnia dubia</i>	48 h	Estática	Mortalidad	102	-----	Pillard et al. (2001)
<i>Dafnia magna</i>	48 h	NR	Mortalidad	141.6	-----	ND
	21 días	Renovación estática	Reproducción	-----	25.9-76.9	ND
	48 h	Estática	Inmovilización	-----	91	ND
	48 h	NR	Inmovilización	-----	107	Seeland et al. (2012)
	48 h	NR	Inmovilización	-----	155.4	Durjava et al. (2013)
	21 días	Renovación estática	Inmovilización	-----	76.9	ND
<i>Dafnia Daphnia galeata</i>	48 h	NR	Inmovilización	-----	15.8	Seeland et al. (2012)
Gusano plano	24 h	Estática	Mortalidad	171.1	-----	Li (2013)
<i>Dugesia japonica</i>	48 h	Estática	Mortalidad	145.3	-----	
	72 h	Estática	Mortalidad	143.3	-----	
	96 h	Estática	Mortalidad	142.9	-----	
<b>Peces</b>						
Pez cebra	96 h	Estática	Mortalidad	>100	-----	ND
<i>Brachydanio rerio</i>						
Pez sol	48 h	Estática	Mortalidad	27.5	-----	Davis et al. (1977)
<i>Lepomis macrochirus</i>	48 h	Flujo continuo	Mortalidad	30.2	-----	
	96 h	Estática	Mortalidad	25	-----	
	96 h	Flujo continuo	Mortalidad	28	-----	
Carpita cabeza	48 h	Estática	Mortalidad	27.5	-----	Davis et al. (1977)
<i>Pimephales promelas</i>	48 h	Flujo continuo	Mortalidad	30.2	-----	
	96 h	Estática	Mortalidad	25	-----	

	96 h	Flujo continuo	Mortalidad	28	-----	
	96 h	Renovación estática	Mortalidad	65	-----	Pillard et al. (2001)
Trucha arcoíris <i>Salmo gairdneri</i>	48 h	Flujo continuo	Mortalidad	15	-----	Davis et al. (1977)
	96 h	Flujo continuo	Mortalidad	12	-----	
	96h	NR	Mortalidad	39.4	-----	ND

*Nota.* Fuente: Modificado de: Cantwell, M. G., Sullivan, J. C., & Burgess, R. M. (2015). *Benzotriazoles: History, Environmental Distribution, and Potential Ecological Effects*. In *Comprehensive Analytical Chemistry* (Vol. 67). Elsevier.

\*NR= No reportado; ND= Autor no disponible

Los resultados de la Tabla 8 indican que los peces, en comparación con los demás organismos acuáticos presentan concentraciones letales medias muy bajas que oscilan de los 12 a los 100 mg/l, por tal motivo, son los más expuestos al estar en contacto con el 1 H – benzotriazol. Por su parte, las bacterias *Vibrio fischeri* padecen efectos subletales en la respiración celular, esto se ve reflejado en la disminución de su bioluminiscencia (Solano, 2005). Mientras tanto, invertebrados como: la *Dugesia japónica* y *daphnia magna, galeata* y *dubia*; y especies vegetales como *Scenedesmus subspicatus*, son los organismos menos sensibles a los efectos letales y subletales (inhibición del crecimiento y reproducción) del 1 H – benzotriazol.

### 1.3.4 Efectos del 1 H – benzotriazol en la salud humana

Desde la década de 1950, fecha en la que se originó la primera patente sobre los benzotriazoles y hasta hace algunos años (2018), se han realizado experimentos con biomodelos para probar y evaluar la toxicidad, así como algunos efectos adversos (neurotoxicidad, carcinogenicidad, disrupción endocrina, etc) del 1 H – benzotriazol en la salud humana.

El Instituto Nacional para la Seguridad y Salud Ocupacional (NIOSH, por sus siglas en inglés) (2018), evidencia diversos efectos del 1 H – benzotriazol en mamíferos. De acuerdo con pruebas realizadas en conejos, cobayas, ratas y ratones, los

conejos manifestaron irritación en los ojos, mientras que las cobayas irritación y sensibilización cutánea. En cuanto a las ratas y ratones, ambas especies presentaron efectos tumorigénicos; en las ratas se detectaron tumores cerebrales y en los ratones, tumores en los pulmones, tórax y de modo más severo, carcinoma broncogénico.

En vista de lo anterior, el 1 H – benzotriazol puede representar una amenaza considerable para la salud humana.

## 1.4 Impacto ambiental del uso de sustancias químicas

La Ley General del Equilibrio Ecológico y la Protección al Ambiente (LGEEPA) (2012) define como *impacto ambiental* a “la modificación del ambiente ocasionada por la acción del hombre o de la naturaleza” (p.4). Estos pueden ser clasificados de acuerdo con su origen o por sus atributos, es decir, por el aprovechamiento de los recursos naturales, contaminación u ocupación del territorio y, por ser negativos o positivos, directos o indirectos, acumulativos, sinérgicos, residuales, temporales o permanentes, reversibles o irreversibles y periódicos o continuos, respectivamente (Secretaría de Medio Ambiente y Recursos Naturales, 2018).

Las actividades antropogénicas causan un gran impacto ambiental, sobre todo cuando se trata de la fabricación, uso y eliminación de sustancias químicas, ya que, al ser liberadas en los diferentes compartimientos ambientales afectan considerablemente la salud humana, animal y vegetal, y paulatinamente propician la degradación del ambiente, pérdida de la biodiversidad, los ecosistemas y la alteración de la calidad del agua, aire y el suelo (Mendoza & Ize, 2017). El impacto de una sustancia química se establece en función de la cantidad de emisión, el tipo de sustancia, la concentración y el lugar donde se encuentra (Gobierno de Canadá, 2009). Así mismo, Mendoza & Ize (2017) mencionan que “el riesgo tóxico puede evaluarse dependiendo de su magnitud, frecuencia y duración” (p.3).

Los efectos adversos del uso de las sustancias químicas se deben, principalmente al manejo inadecuado y a la falta de prevención de estas; para mitigar su impacto en el ambiente es necesario implementar un sistema de gestión ambiental en el que se lleven a cabo acciones como: la minimización del uso de sustancias peligrosas, el control de las emisiones generadas al interior de las plantas químicas y la gestión de residuos mediante el tratamiento y una disposición responsable (Instituto de Hidrología, Meteorología y Estudios Ambientales, s.f).

## 1.5 Marco regulatorio de contaminantes emergentes

Los contaminantes emergentes se encuentran dentro de las líneas de investigación prioritarias de organismos internacionales, estos son: la Organización Mundial de la Salud (OMS), la Agencia para la Protección del Medio Ambiente (EPA) y la Comisión Europea (Baz, 2019); su labor principal es la protección de la salud pública y del medio ambiente, mediante la aplicación de estrategias y políticas.

### 1.5.1 Marco regulatorio internacional

La Unión Europea y Estados Unidos cuentan con una amplia variedad de herramientas legislativas en materia de aguas, sin embargo, estas se encuentran dispersas debido a los distintos niveles de competencia, ámbitos de aplicación y aspectos a regular (Barceló & López, s.f.).

La Unión Europea instauró en el año 2000 la *Directiva 2000/60/CE*, también denominada Directiva Marco del Agua (WFD, por sus siglas en inglés), la cual es un hito en la gestión de los recursos hídricos y sus ecosistemas acuáticos (Ministerio para la Transición Ecológica y el Reto Demográfico, 2021). Barceló & López (s.f.) destacan que en ella se especifican las medidas a tomar para conseguir la protección integrada del agua y su calidad química y ecológica; en adición, la directiva estableció los estándares de calidad ambiental de la Unión Europea (Baz, 2019). Para el año 2001, la Directiva Marco del Agua publicó la *Decisión 2455/2001/EC* en la que se estableció la primera lista de 33 sustancias prioritarias, las cuales debían ser monitoreadas a nivel comunitario, algunas de estas sustancias fueron señaladas como sustancias peligrosas de alta prioridad (Baz, 2019).

Años más tarde, la Directiva Marco del Agua es complementada por la *Directiva 2006/118/CE*, relativa a la protección de las aguas subterráneas contra la contaminación y el deterioro (Diario Oficial de la Unión Europea, 2006; Barceló et al., 2008). En esta ampliación, según Barceló et al (2018) se definen “concentraciones máximas admisibles y medias anuales para las sustancias

consideradas como prioritarias y otros contaminantes en aguas superficiales y biota” (p.99). En el 2008, la *Directiva 2008/105/EC*, relativa a las normas de calidad ambiental en el ámbito de la política de aguas modifica la *Directiva 2000/60/CE*. (EUR-Lex, 2021).

En lo que respecta a las sustancias prioritarias en el ámbito de la política del agua, la *Directiva 2013/39/UE* modifica a las directivas anteriores (2000/60/EC y 2008/105/EC) (Diario Oficial de la Unión Europea, 2013). En ella se recomienda el seguimiento de 53 sustancias prioritarias, 49 sustancias orgánicas y 4 metales: cadmio, plomo, mercurio y níquel (Baz, 2019; Caviedes et al., 2017).

El decreto más actual es la *Decisión de ejecución 2018/840*, por la que se establece una lista de vigilancia de 8 contaminantes de preocupación emergente para el seguimiento a escala de la Unión en el ámbito de la política de aguas (Diario Oficial de la Unión Europea, 2018).

Cabe mencionar, que Estados Unidos también ha presentado avances en la normativa dirigida a vigilar el medio ambiente. Caviedes *et al* (2017) expresan que “la EPA tiene autoridad sobre la mayoría de los ámbitos del medio ambiente a través de la Ley de Agua Limpia, Ley de Aire Limpio, Ley de Control de Sustancias Tóxicas y Conservación y Recuperación de Recursos” (p.124).

En 1996 la Ley de Agua Potable Segura (SDWA, por sus siglas en inglés) ordena a la EPA que publique una lista de contaminantes, denominada “Lista de candidatos a contaminantes del agua potable o CCL” para ayudar en los esfuerzos de establecimiento de prioridades; del mismo modo la SDWA exige a la EPA determinar si los contaminantes candidatos son regulables mediante un Reglamento Nacional Primario de Agua Potable (NPDWR, por sus siglas en inglés), el cual consiste en “estándares primarios que protegen la calidad del agua potable mediante la limitación de los niveles de contaminantes específicos que puedan afectar negativamente a la salud pública y que se sabe que existen o puedan existir en el

agua” (p.1) (Environmental Protection Agency, 2016; Environmental Protection Agency, 2000).

En 1998 la EPA anuncia su primera *lista de contaminantes candidatos 1 - CCL 1*, no obstante es modificada en el 2003, en ella seleccionaron 9 contaminantes microbianos y 42 contaminantes químicos (Environmental Protection Agency, 2016; Environmental Protection Agency, 2019); en el 2005 se anuncia la *lista de contaminantes candidatos 2 - CCL 2*, está presenta 9 contaminantes microbianos y 43 contaminantes químicos, sin embargo, en el 2008 se descarta la regulación de 11 de estos últimos (Environmental Protection Agency, 2016; Environmental Protection Agency, 2019); las *listas de contaminantes candidatos 3 - CCL 3 y 4 - CCL 4* actualmente no están sujetas a ninguna reglamentación primaria nacional de agua potable propuesta o promulgada, a pesar de ello, para el caso de la *CCL 3* se consideraron 12 contaminantes microbianos y 104 químicos y para la *CCL 4*, 12 contaminantes microbianos y 97 químicos, debido a que se sabe o se prevé que ocurran en los sistemas públicos de agua (Environmental Protection Agency, 2021). Al presente, la EPA está evaluando otros contaminantes para la próxima lista (*lista de contaminantes candidatos 5 - CCL 5*) (Environmental Protection Agency, 2019).

Por el contrario, países latinoamericanos carecen de controles para la evaluación del riesgo ecológico y a la salud humana que suponen los contaminantes emergentes.

### **1.5.2 Marco regulatorio nacional**

El artículo 133 de la Constitución Política de los Estados Unidos Mexicanos establece el orden jurídico mexicano, en acompañamiento, Helsen introduce una pirámide jerárquica de este mismo (Figura 13).

**Figura 13.** *Pirámide de Kelsen del sistema jurídico*



Nota. Fuente: <https://www.pinterest.com.mx/pin/742742163525840612/1>

Visto desde este orden jurídico, en materia de aguas, México cuenta con la Ley de Aguas Nacionales, relativa al artículo 27 de la Constitución Política de los Estados Unidos Mexicanos. Su objetivo es “regular la explotación, uso o aprovechamiento de dichas aguas, su distribución y control, así como la preservación de su cantidad y calidad para lograr su desarrollo integral sustentable” (Ley de Aguas Nacionales, 2020, p.1). Además cuenta con normatividad vigente en materia de descargas de aguas residuales y tratadas (Tabla 9).

**Tabla 9.** Normas oficiales mexicanas en materia de descargas de aguas residuales y tratadas, expedidas por la SEMARNAT

Norma Oficial Mexicana	Establece	Número de categorías y parámetros	Rango de principales parámetros [mg/L]
<b>NOM-001-SEMARNAT-1996</b>	Límites máximos permisibles de contaminantes en las descargas de aguas residuales en aguas y bienes nacionales	<sup>a</sup> Parámetros 9 Categorías 4	SST =40-200 DBO <sub>5</sub> =15-200 NT =15-60 PT= 5-60 Grasas y aceites= 15-25
<b>NOM-002-SEMARNAT-1996</b>	Límites máximos permisibles de contaminantes en las descargas de aguas residuales a los sistemas de alcantarillado urbano o municipal.	<sup>b</sup> Parámetros 11 Categorías 3	Grasas y aceites= 50-100 Sólidos sedimentables = 5-10 Metales pesados

<b>NOM-003- SEMARNAT- 1997</b>	Límites máximos permisibles de contaminantes para las aguas residuales tratadas que se reúsen en servicios al público.	<sup>c</sup> Parámetros 5 Categorías 2	Coliformes fecales= 240-1000 Grasas y aceites= 15 DBO5= 20-30 SST= 20-30
--	--	---	---

*Nota.* Fuentes: Modificado de: De la Vega, M. (2012). *Eficiencia en plantas de tratamiento de aguas residuales (1era ed.)*. Refugia Centro para la conservación de la ecobiodiversidad A.C.; NOM-001-SEMAARNAT-1996; NOM-002-SEMAARNAT-1996; NOM-003-SEMAARNAT-1997

<sup>a</sup> Parámetros: Temperatura, grasas y aceites, materia flotante, sólidos sedimentables, sólidos suspendidos totales, demanda bioquímica de oxígeno <sub>5</sub>, nitrógeno total, fósforo total, arsénico, cadmio, cianuro, cobre, cromo, mercurio, níquel, plomo y zinc; Categorías: Ríos, embalses naturales y artificiales, aguas costeras y suelo.

<sup>b</sup> Parámetros: Grasas y aceites, sólidos sedimentables, arsénico total, cadmio total, cianuro total, cobre total, cromo total, cromo hexavalente, mercurio total, níquel total, plomo total y zinc total; Categorías: Promedio mensual, promedio diario e instantáneo.

<sup>c</sup> Parámetros: Coliformes fecales, huevos de helminto, grasas y aceites, demanda bioquímica de oxígeno <sub>5</sub> y sólidos suspendidos totales; Categorías: Servicio al público con contacto directo y servicios al público con contacto indirecto u ocasional.

Asimismo, otra de las normas referentes a la salud ambiental, agua y consumo humano es la *NOM-127-SSA1-1994*, que establece los límites permisibles de calidad y tratamientos a que debe someterse el agua para su potabilización. Esta norma abarca dentro de sus límites permisibles agentes biológicos (coliformes) y agentes químicos (metales pesados, plaguicidas, sales, compuestos orgánicos, entre otros).

En lo que atañe al marco regulatorio de contaminantes emergentes, en 1987 se inició la regulación y el control intersectorial de riesgos químicos de plaguicidas, fertilizantes y sustancias tóxicas (SEMARNAT, 2018). Poco después, en el 2001, 127 países firmaron el *Convenio de Estocolmo*, entre ellos México; en el 2004 que el convenio entra en vigor, México es de los primeros países latinoamericanos que lo ratifica (SEMARNAT, 2015). La Organización de las Naciones Unidas (2021) manifiesta que el Convenio de Estocolmo busca proteger la salud humana y el medio ambiente de contaminantes orgánicos persistentes (COP's) y requiere que las partes signatarias tomen medidas para eliminar o reducir la producción, utilización, exportación y emisión de COP's al medio ambiente.

Posterior al convenio, no hay avances sobre el estudio de contaminantes emergentes. Es hasta el 2010 que el Instituto Mexicano de Tecnología del Agua (IMTA) y la Secretaría de Medio Ambiente y Recursos Naturales (SEMARNAT) desarrollan un proyecto llamado “*Informe final TC1003.1 Remoción de contaminantes emergentes de importancia ambiental y sanitaria. Segunda etapa*”, en donde se evaluaron más de 3000 sustancias químicas de las cuales seleccionaron 1400 con mayor ocurrencia en el agua potable y resistentes a los procesos de tratamiento y potabilización, después de ese análisis identificaron 879 moléculas como prioritarias debido a su toxicidad potencial; finalmente establecieron un listado de 50 contaminantes emergentes prioritarios (Cortés et al., 2010).

A pesar de este tipo de iniciativas, aun no hay un listado de contaminantes emergentes definido. Desde la perspectiva más general, México sufre un rezago en el monitoreo y la regulación de este tipo de contaminantes, Caviedes *et al* (2017) enfatiza que “solo los países primermundistas cuentan con los recursos para dimensionar verdaderamente su magnitud y desarrollar los estudios y técnicas necesarias” (p.127). Por su parte, García (2013) sugiere implementar guías armonizadas de regulación e innovar los procesos de tratamiento de aguas residuales para lograr una calidad de agua libre de contaminantes emergentes en México.

### **1.5.3 Regulación del 1 H – benzotriazol**

El 1 H – benzotriazol como la mayoría de los contaminantes emergentes carecen de normas que regulen su producción, uso y disposición. Además, es un compuesto orgánico nocivo para el ambiente y la salud humana, por tanto, debería considerarse dentro de la lista de contaminantes candidatos a regular.

En relación a la problemática expuesta, Robert y colaboradores (2011) desarrollaron un proyecto que se llevó a cabo dentro del “*Proyecto de estrategia Micropoll*” de la Oficina Federal del Medio Ambiente de Suiza (FOEN, por sus siglas en inglés). Ellos proponen un método para la evaluación de microcontaminantes de

las aguas residuales municipales; los criterios comprendidos para dicho método son los siguientes:

1. Identificación de sustancias relevantes, es decir, de los contaminantes con mayor ocurrencia en las aguas superficiales y en los efluentes de las PTAR de Suiza.
2. Derivación de estándares de calidad ambiental basados en efectos a corto y largo plazo.
3. Encuesta mediante una estrategia de muestreo que tenga en cuenta la dinámica de entrada de las sustancias relevantes.
4. Procedimiento de evaluación de la calidad del agua con respecto a la contaminación causada por microcontaminantes.

En lo que concierne al punto 2, el 1 H – benzotriazol es uno de los contaminantes emergentes relevantes para Suiza, se encuentra contemplado en la propuesta de criterios de calidad eco toxicológica derivados por el Centro Suizo de Ecotoxicología Aplicada en conjunto con el Documento de Orientación Técnica (TGD, por sus siglas en inglés) (Robert et al., 2011). La revisión más actual sobre el 1 H – benzotriazol, sugiere los siguientes estándares (Tabla 10):

**Tabla 10.** *Propuesta para estándares de calidad aguda y crónica del 1 H - benzotriazol*

Sustancia	Estándar de calidad agudo [µg/l]	Estándar de calidad crónico [µg/l]	Datos a partir de
1 H - benzotriazol	160	19	2015

*Nota.* Fuente: Oekotoxzentrum centre ecotox (2021): *Proposals for Acute and Chronic Quality Standards. Ecotoxcentre en: <https://www.ecotoxcentre.ch/expert-service/quality-standards/proposals-for-acute-and-chronic-quality-standards/>*

El Centro Suizo de Ecotoxicología Aplicada (2021) expresa que, en caso de que la concentración ambiental exceda el estándar de calidad es posible asumir un riesgo para los organismos acuáticos. En este sentido se comprende la posibilidad de homogenizar y adoptar en todo el mundo, estándares de calidad como herramienta regulatoria en el marco de la evaluación de riesgos ecológicos procedentes del 1 H – benzotriazol y otros contaminantes emergentes.

## 1.6 Programas QSAR

Para evaluar el comportamiento y destino ambiental de una sustancia química es necesario conocer sus propiedades físicas y químicas, por lo cual se realizan experimentos que implican tiempos y costos. Los modelos cuantitativos de relación estructura-actividad (QSAR, por sus siglas en inglés) surgen como una alternativa accesible que permite sustituir el desarrollo experimental por una *in silico*.

Los modelos QSAR, según Goode *et al* (2019) “correlacionan matemáticamente las propiedades estructurales, fisicoquímicas, topológicas, electrónicas y/o geométricas de un conjunto de moléculas utilizando parámetros cuantitativos experimentales o calculados, denominados descriptores” (p.28). Estos modelos pueden relacionarse con los modelos de regresión lineal múltiple, de hecho, la siguiente ecuación lo describe mejor (Goode *et al.*, 2019; Lozano & Scior, 2012):

$$\gamma = \beta_0 + \beta_1 X_1 + \beta_2 X_2 + \dots + \beta_j X_j + \varepsilon \quad (2)$$

Donde:  $\gamma$  es la actividad o propiedad de las moléculas;  $X_j$  los descriptores moleculares;  $B_j$  el coeficiente asociado al descriptor y  $\varepsilon$ , el error asociado.

Lozano & Scior (2012) indican que para llevar a cabo un estudio con modelos QSAR se debe contar con la siguiente información:

estructura molecular de diferentes compuestos que tengan un mismo mecanismo de acción; datos de actividad biológica de cada uno de los ligandos incluidos en el estudio; y propiedades fisicoquímicas de los ligandos calculados *in silico* a partir de la estructura molecular (p.82).

Debido a su aplicación en el diseño de fármacos, predicción de la toxicidad química, predicción de la actividad de compuestos en el ambiente y predicción de propiedades moleculares, los QSAR pueden ser una herramienta muy útil en la evaluación de riesgos de ciertas sustancias y en la toma de decisiones para futuras regulaciones (Cárdenas & Tripaldi, 2009).

## 1.7 EPI SUITE

La Interfaz de Programas de Estimación, EPI Suite, surge de la necesidad de evaluar los riesgos de los productos químicos. Este programa ha ido evolucionando con el paso de los años, esto debido a la integración paulatina de cada uno de los modelos que lo componen (Card et al., 2017). Sus desarrolladores son la Agencia de Protección Ambiental (EPA) y Syracuse Research Corp (SRC) (EPA, 2021).

EPI Suite incorpora en su sistema modelos cuantitativos de relación actividad-estructura (QSAR) que permiten estimar el destino ambiental de sustancias químicas, así como sus propiedades físicas y químicas. Además, facilita el acceso de información sobre nuevos productos químicos que carecen de datos experimentales, por ello cuenta con PhysProp, una base de datos de más de 40,000 sustancias químicas (Environmental Protection Agency, 2021).

EPI Suite cuenta con una variedad de modelos o subprogramas, los cuales se clasifican dependiendo del tipo de estimaciones que realizan (Tabla 11).

**Tabla 11.** *Programas de estimación de EPI Suite utilizados en la evaluación de riesgos de sustancias químicas*

Tipo de estimación	Subprogramas	Tarea asignada
Propiedades físicas y químicas	MPBPWIN	Estima el punto de fusión, ebullición y la presión de vapor de un químico.
	KOAWIN	Estima el coeficiente de partición octanol-aire ( $K_{OA}$ )
	KOWWIN	Estima el coeficiente de partición octanol-agua ( $K_{OW}$ )
	WSKOWWIN	Estima la solubilidad del agua basado en el log $K_{OW}$ y factores de corrección estructural.
	HENRYWIN	Calcula la partición entre el aire y agua (Constante de la Ley de Henry, $K_H$ )
Propiedades de transporte y destino ambiental	WATERNT	Estima la solubilidad del agua según el enfoque de fragmentos
	AEROWIN	Estima el potencial de formación de aerosoles atmosféricos (sorción a la fracción de partículas)
	AOPWIN	Estima el potencial de oxidación atmosférica

	HIDROWIN	Estima la tasa de hidrólisis
	BLOWIN	Estima la biodegradabilidad aeróbica y anaeróbica de un químico
	BioHCWIN	Estima la tasa de biodegradación de hidrocarburos
	KOCWIN	Estima el coeficiente de partición de carbono orgánico ( $K_{oc}$ )
	BCFBAF	Calcula los factores de bioconcentración y bioacumulación en peces (FBC y FBA)
	STPWIN	Predice la remoción de un químico en una planta de tratamiento de agua residual
	LEV3EPI	Predice la partición de químicos entre el aire, suelo, sedimentos y agua (Fugacidad Nivel III)
	WVOLWIN	Calcula la tasa de volatilización desde el agua
Adsorción	DERMWIN	Estima el grado de absorción dérmica de sustancias químicas orgánicas
Peligros para el ser humano y el ambiente	ECOSAR	Predice la toxicidad para la biota acuática

*Nota.* Fuente: Modificado de: Card, M., Gomez, V., Lee, W. H., Lynch, D., Orentas, N. S., Lee, M. T., Wong, E. M., & Boethling, R. S. (2017). *History of EPI Suite™ and future perspectives on chemical property estimation in US Toxic Substances Control Act new chemical risk assessments*. Environmental Science. Processes & Impacts, 19(3), 203–212.

A pesar de todos los beneficios que ofrece el uso de EPI Suite, este también posee algunas limitantes pues sus modelos no producen estimaciones exactas para los siguientes elementos: sustancias inorgánicas, sustancias organometálicas, algunos compuestos orgánicos ionizables, sustancias con un gran peso molecular, compuestos perfluorados y halogenados, compuestos que no contienen grupos funcionales comprendidos en el conjunto de entrenamiento y compuestos que contienen grupos funcionales orgánicos significativos pero que no están asociados en los modelos estadísticos (Card et al., 2017).

Sin importar esas limitantes y tomando sus respectivas precauciones, la Ley de Control de Sustancias Tóxicas (TSCA) requiere que Estados Unidos emplee los resultados proporcionados por EPI Suite para la evaluación de riesgos químicos (Card et al., 2017).

### **1.7.1 Fundamentos para el cálculo de la volatilidad en WVOLWIN**

El principio fundamental del WVOLWIN es determinar la volatilización de una sustancia química en un río y lago modelo mediante la estimación de sus vidas medias. Dicho de esta forma, la volatilidad es la tendencia de una sustancia química a pasar al ambiente, el proceso ocurre cuando ésta pasa de estado líquido o sólido a un estado gaseoso o vapor (Mc Graw Hill, 2021; Marín et al., 2017); mientras que las vidas medias ( $t_{1/2}$ ) son el tiempo necesario para que la mitad de un reactivo se consuma (Petrucci et al., 2011).

La metodología de este programa se basa en una adaptación del método recomendado descrito en el capítulo 15 del *Manual de métodos de estimación de propiedades químicas* (Thomas, 1990, citado por Environmental Protection Agency, 2021). El método de estimación considera dos películas para estimar el flujo de volátiles a través de la interfaz aire-agua (Environmental Protection Agency, 2021).

WVOLWIN no es un programa que funcione por sí solo, para ello EPI Suite v.4.11 transfiere datos como: los parámetros de volatilidad (profundidad del agua, velocidad de la corriente del agua y velocidad del viento), la constante de la Ley de Henry y el peso Molecular de la sustancia (Environmental Protection Agency, 2021).

#### **1.7.1.1 Consideraciones sobre los valores de propiedad para el cálculo de la volatilidad**

El programa toma en consideración aspectos como: los parámetros de volatilidad, la constante de la Ley de Henry y la volatilidad a diferentes temperaturas, la temperatura y la sorción de sedimentos en agua (Environmental Protection Agency, 2021).

##### **a) Parámetros de volatilidad**

Dichos parámetros son la profundidad del agua, velocidad de la corriente del agua y velocidad del viento. Los valores de cada uno de estos, para un río y lago modelo

ya fueron definidos por Thomas, según lo indica la EPA (2021). La Tabla 12.1 contiene dicha información.

**Tabla 12.1. Parámetros de entrada de WVOLWIN**

Parámetros de WVOLWIN	Río	Lago
Profundidad del agua [m]	1	1
Velocidad del viento [m/s]	5	0.5
Velocidad de la corriente [m/s]	1	0.05

*Nota.* Fuente: Environmental Protection Agency (2021). *Water Volatilization Model*

Las razones por la cuales se establecieron los valores visualizados en la Tabla 12.1 son la siguientes (EPA, 2021):

- Para un río modelo, dado que el objetivo es producir una vida media que puede ser indicativa de una volatilización relativamente rápida de las aguas ambientales (Tabla 12.2).

**Tabla 12.2. Valores del río modelo y justificación**

Parámetros de WVOLWIN	Río	Explicación
Profundidad del agua [m]	1	Se dio este valor gracias a las estimaciones de Thomas.
Velocidad del viento [m/s]	5	Sugiere un viento constante de velocidad moderada.
Velocidad de la corriente [m/s]	1	Se dio este valor gracias a las estimaciones de Thomas.

*Nota.* Fuente: Environmental Protection Agency (2021). *Water Volatilization Model-Introduction*

\* Según Thomas (1990), las velocidades del viento en el rango de 3-6 m/s muestran una mayor transferencia de intercambio de fase líquida atribuible a la aparición de ondas y un aumento en la rugosidad de la superficie del agua. Se seleccionó la velocidad del viento predeterminada de 5 m/s ya que se encuentra dentro de este rango, lo que elimina las complicaciones que pueden ocurrir al intentar modelar aguas superficiales muy agitadas con aspersion, burbujas y crestas de olas.

- Para un lago modelo, los parámetros predeterminados (Tabla 12.3) producen una tasa de volatilización mucho más lenta. Tales parámetros se seleccionaron para modelar específicamente una masa de agua en condiciones de calma que pueden ser útiles para comparar un contaminante ambiental con otro. La Tabla 12.3 indica la razón de los valores.

**Tabla 12.3. Valores del lago modelo y justificación**

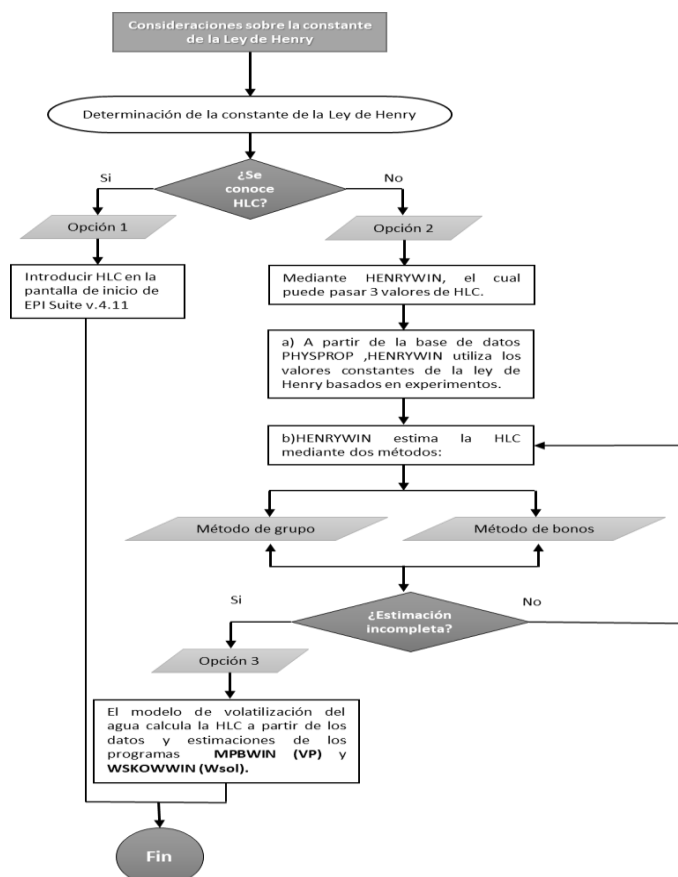
Parámetros de WVOLWIN	Lago	Explicación
Profundidad del agua [m]	1	Se dio este valor gracias a las estimaciones de Thomas.
Velocidad del viento [m/s]	0.5	Indicativas de un estanque (o lago muy poco profundo) en condiciones relativamente tranquilas.
Velocidad de la corriente [m/s]	0.05	

Nota. Fuente: Environmental Protection Agency (2021). *Water Volatilization Model-Introduction*

### b) Constante de la Ley de Henry

La constante de la ley de Henry es definida por Mackay *et al* (2006) como un coeficiente de partición aire-agua que se puede determinar midiendo las concentraciones de soluto en ambas fases, en otras palabras, es la relación entre la presión de vapor y la solubilidad del agua. Para obtener la constante de la Ley de Henry (HLC) existen tres opciones, la Figura 14 muestra de forma resumida como se determina dicha constante.

Figura 14. Diagrama sobre el cálculo de la constante de la Ley de Henry (HLC)



Nota. Fuente: Environmental Protection Agency (2021). *Estimation Considerations for the Water Volatilization Model*

En cuanto a la figura 14, cabe aclarar lo siguiente:

Para el caso de la segunda opción, inciso a, HENRYWIN utiliza una base de datos que contiene 1829 compuestos con valores HLC basados en experimentos. La base de datos de HENRYWIN tomada de PHYSPROP asigna un tipo de propiedad experimental "EXP" a 643 de los 1829 compuestos. Cabe mencionar que, para los compuestos restantes, estos fueron calculados a partir de la presión de vapor (VP) y la solubilidad del agua (WSOL) determinadas experimentalmente. PHYSPROP considera que las constantes de la Ley de Henry a través de la relación VP/WSOL se estiman, mientras que HENRYWIN los considera experimentales (Environmental Protection Agency,2021).

Por otro lado, para el inciso b, la EPA (2021) expresa que el "método de bonos o de valores de contribución de enlace" consiste en que cada compuesto se divide en una suma de los enlaces individuales que componen al compuesto. La suma se establece igual para los compuestos cuyos logaritmos de coeficientes de partición agua-aire (LWAPC, por su abreviación en inglés) son conocidos. Todos los compuestos utilizados para derivar los valores de contribución de enlace se tratan de manera similar. Los grupos funcionales seleccionados, incluidos los grupos ciano (CN), carbonilo (CO) y nitro (NO<sub>2</sub>), se tratan como átomos y no se dividen en enlaces individuales. Las LWAPC conocidas utilizadas en las ecuaciones son LWAPC medidas experimentalmente. Cuando no se dispone de un LWAPC medido, el LWAPC conocido se deriva de la relación VP/WS medida.

Mientras que en el método de grupos cada compuesto se divide en una suma de los grupos individuales que componen el compuesto. Para obtener valores, la suma se establece igual al LWAPC conocido del compuesto. En la mayoría de los casos, se considera que un grupo contiene un átomo polivalente y los átomos monovalentes unidos a él, pero el grupo se caracteriza por la naturaleza de los átomos a los que está unido, así como por los que contiene (Environmental Protection Agency,2021).

La diferencia entre ambos métodos radica en que el de bonos divide un compuesto en unidades más pequeñas (un átomo a otro átomo solamente), además incluye valores de enlaces de hidrógeno individuales y el método de grupo no lo hace.

Ahora bien, las consideraciones que HENRYWIN hará para elegir alguno de estos dos dependerá en que no deben tener fragmentos faltantes pues se considerará como un modelo incompleto, por lo general el método de grupo casi siempre presenta ese problema.

### **c) Temperatura**

La presión de vapor es una variable dependiente de la constante de la Ley de Henry la cual se ve afectada cuando ocurre algún cambio en la temperatura y por ende también en la volatilización.

La constante de la Ley de Henry impulsa el modelo de la volatilidad, se expresa como la relación entre la presión de vapor y la solubilidad del agua (Ecuación 3).

$$HLC = \frac{VP}{WSol} \quad (3)$$

Cuando la temperatura se encuentra entre los 5 a 20 °C, la presión de vapor tiende a variar en una cantidad mucho mayor a comparación de la solubilidad del agua para la mayoría de los productos químicos orgánicos líquidos y sólidos; por lo tanto, el cambio en la presión de vapor tiene un efecto mucho mayor en la constante de la Ley de Henry que la solubilidad del agua (Environmental Protection Agency, 2021).

Es importante mencionar que WVOLWIN solo trabaja a una temperatura de 25 °C, sin embargo, HENRIWIN puede generar valores de la constante de la Ley de Henry siempre y cuando el programa HENRYWIN se ejecute por separado.

### **d) Adsorción de sedimentos en agua**

La adsorción en agua puede ser un mecanismo de destino importante para los productos químicos que se absorben fuertemente en los sedimentos, no obstante,

este proceso al igual que la suspensión de material particulado en cuerpos de agua, no están considerados en el modelo de volatilización debido a que el proceso de adsorción puede limitar la cantidad de producto químico disponible para la volatilización, lo que reducirá la tasa de volatilización. En general, a medida que aumenta la sorción a los sedimentos, la tasa de volatilización disminuye (Environmental Protection Agency, 2021, 2021).

### **1.7.1.2 Cálculos para la estimación de la volatilidad**

#### **I. Cálculos para la constante de la Ley de Henry**

La constante de la Ley de Henry (HLC) se expresa en unidades de atm\*m<sup>3</sup>/mol, sin embargo, el modelo de volatilización requiere que la constante sea adimensional, por tanto, se aplica la Ecuación 4.

$$H = \frac{H'}{R * T} \quad (4)$$

Donde:

H= Constante de la Ley de Henry adimensional

H'= Constante de la Ley de Henry dimensional

R= Constante universal de los gases (0.00008206 atm\*m<sup>3</sup>/mol)

T= Temperatura estándar (25 °C= 298 °K)

#### **II. Cálculo del coeficiente de la fase líquida**

Denominado en WVOLWIN como KLC (liquid-phase coefficient), se calcula a partir de las ecuaciones de Thomas (1990):

Donde:

MW= Peso molecular

VC= Velocidad corriente en m/s

VW= Velocidad del viento en m/s

Z= Profundidad del agua en m

Sí el peso molecular del compuesto (MW) es menor que 25, entonces aplicar la Ecuación 5.1:

$$KPL^1 = 20 * \sqrt{\frac{44}{MW}} \text{ cm/hr} \quad (5.1)$$

Sí el peso molecular del compuesto (MW) es mayor o igual que 25 y la velocidad del viento (WC) es menor que 1.9 m/s, entonces aplicar la Ecuación 5.2:

$$KPL^2 = 23.51 * \left(\frac{VC^{0.969}}{Z^{0.673}}\right) * \sqrt{\frac{32}{MW}} \text{ cm/hr} \quad (5.2)$$

Sí el peso molecular del compuesto (MW) es mayor que o igual a 25 y la velocidad del viento (WC) es mayor que 1.9 m/s, entonces aplicar la Ecuación 5.3:

$$KPL^3 = 23.51 * \left(\frac{VC^{0.969}}{Z^{0.673}}\right) * \sqrt{\frac{32}{MW}} * e^{0.526(VW-1.9)} \text{ cm/hr} \quad (5.3)$$

### III. Cálculo del coeficiente de la fase gaseosa

Denominado en WVOLWIN como KPG (gas-phase coefficient), se calcula a partir de las ecuaciones de Thomas (1990).

Donde:

MW= Peso molecular

VC= Velocidad corriente en m/s

VW= Velocidad del viento en m/s

---

<sup>1</sup> Ecuación 15-35 de Thomas (1990)

<sup>2</sup> Ecuación 15-33 de Thomas (1990)

<sup>3</sup> Ecuación 15-34 de Thomas (1990)

Z= Profundidad del agua en m

Sí el peso molecular del compuesto (MW) es menor que 25, entonces aplicar la Ecuación 6.1:

$$KPL^4 = 3000 * \sqrt{\frac{18}{MW}} \text{ cm/hr} \quad (6.1)$$

Sí el peso molecular del compuesto (MW) es mayor o igual que 25 y la velocidad del viento (WC) es menor que 1.9 m/s, entonces aplicar la Ecuación 6.2:

$$KPL^5 = 1137.5 * (VW + VC) * \sqrt{\frac{18}{MW}} \text{ cm/hr} \quad (6.2)$$

#### IV. Cálculo del coeficiente global de transferencia de masa en fase líquida

Denominado en WVOLWIN como KL (overall liquid-phase mass transfer coefficient), se calcula a partir de la Ecuación 7.

Donde:

H= Constante de la Ley de Henry adimensional

KPG= Coeficiente de la fase gaseosa

KPL= Coeficiente de la fase líquida

$$KL^6 = \frac{H * KPG * KPL}{H * KPG + KPL} \quad (7)$$

#### V. Cálculo de la vida media usando el coeficiente global de transferencia de masa en fase líquida (KL) y la profundidad del agua (Z) en cm

---

<sup>4</sup> Ecuación 15-36 de Thomas (1990)

<sup>5</sup> Ecuación 15-32 de Thomas (1990)

<sup>6</sup> Ecuación 15-31 de Thomas (1990)

La Ecuación 8 es la representativa para el cálculo final de la volatilización en vidas medias.

Donde:

KL= Coeficiente global de transferencia de masa en fase líquida

Z= Profundidad del agua en cm

$$\begin{aligned} \text{Volatilización en vidas medias en hr}^7 &= \text{Ln}(2) * \left(\frac{Z}{KL}\right) \\ \text{Volatilización en vidas medias en hr} &= 0.6931 * \left(\frac{Z}{KL}\right) \end{aligned} \quad (8)$$

### **1.7.2 Fundamentos para la determinación del porcentaje de remoción y biodegradación del 1 H - benzotriazol en una planta de tratamiento de agua residual biológica**

Es un modelo de nivel de detección basado en una planta de tratamiento de aguas residuales (Sawage Treatment Plant). Inicialmente, según la Environmental Protection Agency (2021) fue desarrollado por Mackay y sus colegas.

STPWIN utiliza principios de fugacidad para poder predecir el destino ambiental de una sustancia química en un entorno evaluativo (la planta de tratamiento biológica de agua residual); por tal razón se apoya de otros programas de la interfaz.

Los procesos que se llevan a cabo en la planta convencional de tratamiento de aguas residuales incluyen un tratamiento secundario en el que se emplean lodos activados. La EPA (2021) señala que la estimación comienza desde que la sustancia química está presente en el afluente hasta el momento al que se somete a eliminación por evaporación, biodegradación u otros procesos de degradación, sorción a lodos y pérdida en el efluente final; la variable más crítica e incierta es la tasa de biodegradación y su dependencia de la concentración de biomasa.

---

<sup>7</sup> Ecuación 15-12 de Thomas (1990)

### 1.7.2.1 Consideraciones sobre STPWIN

STPWIN es un programa que depende del uso de otros, por ejemplo, de PHYSPROP, HENRYWIN, KOWWIN.

Nota: En caso de no exportar los valores de propiedad de PHYSPROP en la pantalla principal, entonces programas como MPBWIN (estima la presión de vapor) estimaran los datos faltantes. En particular, para la presión de vapor, si MPBWIN estima que es igual a cero (considerada para estimaciones menores de  $1 \times 10^{-40}$  mmHg), STPWIN empleará un valor supuesto igual a  $1 \times 10^{-15}$  mmHg (suficientemente bajo) para que los resultados no sufran alguna alteración.

No obstante, los puntos a considerar en STPWIN son:

#### a) Biodegradación

La biodegradación, según Gómez & Saíz (2020) es “la descomposición orgánica por microorganismos, en la que los materiales pueden transformarse en sustancias más simples, caso de contribuir al reciclaje de nutrientes o a la eliminación de contaminantes en la naturaleza” (p. 564). Por esta razón, la biodegradación es considerada el proceso de transformación dominante en una planta de tratamiento de agua residual.

STPWIN refiere a BIOWIN como pieza clave para los cálculos de remoción, pues estima la biodegradabilidad aerobia y anaerobia de productos químicos orgánicos en presencia de lodos activados y posee 7 modelos diferentes (EPA,2021):

#### → Probabilidad de biodegradación rápida:

Biowin1: modelo de probabilidad de regresión lineal

Biowin2: modelo de probabilidad de regresión no lineal

#### → Biodegradación de la encuesta de expertos:

Biowin3: estudio de expertos modelo de biodegradación definitivo

Biowin4: modelo de biodegradación primaria de encuesta de expertos

→ **MITI <sup>8\*</sup> Probabilidad de biodegradación:**

Biowin5: modelo de regresión lineal MITI

Biowin6: modelo de regresión no lineal MITI

Probabilidad de biodegradación anaeróbica

Biowin7: modelo de biodegradación anaeróbica

De estos 7 modelos, STPWIN ocupa Biowin 3 y 5. Por un lado Biowin 3 es un modelo de estimación para la biodegradación primaria, en la que la estructura molecular de la sustancia cambia para formar un nuevo compuesto y en la última completa, en la cual se mineraliza la molécula (Environmental Protection Agency, 2012); proporciona una indicación de la tasa de biodegradación ambiental de una sustancia química en términos relativos, como horas, horas a días, días, días a semanas, etc. Y por el otro lado, Biowin 5 proporciona la probabilidad estimada de que una sustancia pase la prueba de biodegradación para MITI (Environmental Protection Agency, 2021).

**b) EPA draft method**

Este método fue desarrollado en un ejercicio de calibración ejecutando repetidamente EPI Suite para un conjunto de 33 sustancias químicas (Environmental Protection Agency, 2021).

EPA draft method en adición con BIOWIN da como resultado una tasa de eliminación cercana al 100 %; a pesar de esa eficiencia en la remoción, sí los datos experimentales arrojan lo contrario, EPA draft method no aplicará un valor mayor al 90 % al determinar la tasa de eliminación de la planta de tratamiento de agua residual biológica (Environmental Protection Agency, 2012).

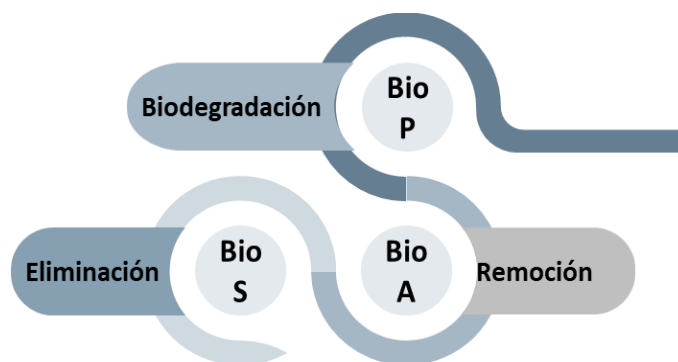
**c) Planta de tratamiento biológica de agua residual**

---

<sup>8</sup> MITI: Ministerio de Industria y Comercio Internacional de Japón

El modelo de la planta de tratamiento opera a una temperatura de 25 °C. Los procesos que ocurren para la remoción de las sustancias químicas dentro de esta se detallan a continuación en la Figura 15.

**Figura 15.** *Procesos de remoción de la planta de tratamiento biológica de agua residual*



*Nota.* Fuente: Environmental Protection Agency (2012). Sustainable Futures / P2 Framework Manual 2012 EPA-748-B12-001: Estimating Physical / Chemical and Environmental Fate Properties with EPI Suite™

\*Bio P= Clarificador primario; Bio A= Recipiente de aireación; y Bio S= decantador

Con respecto a la planta de tratamiento la Tabla 13 resume las condiciones del sistema de tratamiento predeterminado.

**Tabla 13.** *Propiedades de la PTAR definidas por el programa*

Parámetros <sup>a</sup>	Tanque 1 (clarificador primario)	Tanque 2 (recipiente de aireación)	Tanque 3 (tanque de sedimentación)
Área del tanque [m <sup>2</sup> ]	266.7	800	727.3
Profundidad del tanque [m]	3.8	10	3.8
Concentración de los sólidos volátiles suspendidos (VSS) [g/m <sup>3</sup> ]	50,000	ND	5,500
Biomasa de los sólidos volátiles suspendidos (VSS) [fracción]	0.005	0.0025	0.00055
Concentración del flujo de salida (ML) de los sólidos volátiles suspendidos [g/m <sup>3</sup> ]	80.2	2500	15
Tasa de aireación de los sólidos volátiles suspendidos [m <sup>3</sup> /hrs]	ND	8960	ND

Fracción reciclada del afluente	ND	ND	0.8
Fracción reciclada del afluente	0.0024	ND	0.015

Nota. Fuente: Environmental Protection Agency (2021). *STPWIN Help- Default Treatment System Properties*

<sup>a</sup> Otras propiedades del sistema: *Afluente total= 1000 m<sup>3</sup>/hrs; concentración del afluente de sólidos volátiles suspendidos= 200 g/m<sup>3</sup>; coeficiente de la transferencia de masa de la fase gaseosa= 5 m/hrs; coeficiente de la transferencia de masa de la fase gaseosa= 0.05 m/hrs*

#### d) Otros parámetros de entrada de STPWIN

La Figura 16 muestra algunos parámetros de entrada que ya vienen definidos por el programa.

**Figura 16.** *Parámetros de tiempos de vida media definidos por STPWIN*

BIOWIN Half-Life Relationships			
	Bio P	Bio A	Bio S
Biowin3 <= weeks + Biowin5 > 0.5	10	1	1
Biowin3 <= weeks	30	3	3
Biowin5 > 0.5	100	10	10
Biowin3 = wk-mo	300	30	30
Biowin3 = months	1000	100	100
Biowin3 = recalcit	10000	10000	10000

Nota. Fuente: Environmental Protection Agency (2021). *STPWIN Half-life parameters*

La Tabla 14 hace referencia a las horas seleccionadas para la biodegradación en el tanque de aireación (Bio A).

**Tabla 14.** *Guía para seleccionar los tiempos de vida media para Bio A*

Horas	Interpretación
1	Biodegradación rápida
3	Biodegradación moderada
10	Biodegradación de moderada a lenta
30	Biodegradación lenta
100	Biodegradación muy lenta
10,000	No hay biodegradación

Nota. Fuente: Environmental Protection Agency (2021). *STPWIN Half-life parameters*

Por su parte EPA draft method agrega una vida media de 100 hrs para Bio A; mientras que el sistema aplica para sustancias recalcitrantes una vida media de 10,000 hrs en Bio P, Bio A y Bio S.

### 1.7.2.2 Cálculos para la estimación de Biowin 5 y 3

#### I. Biowin 3

La EPA (2021) explica cómo se calcula Biowin 3 de la siguiente manera:

La calificación final o primaria de un compuesto se calcula sumando, para todos los fragmentos presentes en ese compuesto, el coeficiente del fragmento multiplicado por el número de instancias del fragmento en el compuesto (para el peso molecular, el valor de ese parámetro se multiplica por su coeficiente), y luego sumando esta suma a la constante de la ecuación que es 3.1992 para Biowin3. Los valores sumados para cada coeficiente de fragmento multiplicado por el número de instancias aparecen en la columna "VALOR" de la pantalla de resultados.

#### II. Biowin 5

La EPA (2021) explica cómo se calcula Biowin 5 de la siguiente manera:

Se compiló un conjunto de datos total de 884 sustancias químicas para derivar los valores de probabilidad de fragmentos que se aplican en este método de biodegradabilidad MITI. El conjunto de datos consta de 385 sustancias químicas que se evaluaron críticamente como "fácilmente degradables" y 499 sustancias químicas que se evaluaron críticamente como "no fácilmente biodegradables".

### 1.7.3 Fundamentos para la determinación de la fugacidad

La fugacidad, según Bru *et al* (1997) está definida como una magnitud termodinámica relacionada con el potencial químico o la actividad que caracteriza la tendencia de escape de un compuesto.

LEV3EPI es un modelo de fugacidad multimedia de nivel III que predice la partición de sustancias químicas entre el aire, el suelo, los sedimentos y el agua. La metodología y el enfoque de programación son una adaptación del método

desarrollado por el Dr. Donald Mackay y colaboradores (Environmental Protection Agency, 2021).

Un modelo de Nivel III asume un sistema en estado estacionario con diferentes fugacidades (no hay equilibrio entre los compartimentos) y pérdidas por reacción y advección (Delgado-Ortega, 2016). El programa considera al agua, aire, suelo y sedimentos como los compartimentos ambientales principales y a la fase de aerosol, sólidos suspendidos y biota acuática como subcompartimentos.

### **1.7.3.1 Consideraciones sobre LEVIII Epi**

LEV3EPI establece una temperatura fija de 25 ° C y para el transporte de masa considera procesos de volatilización, difusión, deposición y escorrentía. Además, consta de cuatro segmentos: valores de vida media, valores de emisión, valores de advección y valores del coeficiente de sorción orgánico de carbono normalizado para el suelo y los sedimentos.

#### **a) Valores de vida media**

Se requieren vidas medias para el aire, el suelo, los sedimentos y el agua. El modelo no puede funcionar sin ellos, para ello el modelo ocupa programas como BLOWIN para estimar la vida media de degradación de un compuesto químico en agua, suelo y sedimentos; y para la vida media de degradación en el aire se utilizará AOPWIN.

Como se menciona con anterioridad en el apartado de “Consideraciones de STPWIN” sobre BLOWIN 3, este modelo proporciona términos relativos al tiempo de degradación. En LEV3Epi las salidas de Biowin 3 no pueden pasarse directamente por lo que la EPA (2021) explica lo siguiente:

El valor medio dentro del rango de tiempo estimado devuelto por BLOWIN 3 se convierte en una vida media utilizando un conjunto de factores de conversión. Estos factores de conversión consideran que 6 vidas medias constituyen una degradación "completa" de una sustancia química, asumiendo cinéticas de primer orden.

En la Tabla 15 se muestran los siguientes factores:

**Tabla 15. Relaciones de estimación de Biowin 3**

Salidas de Biowin 3	Vidas medias en días
Horas	0.17
Horas a días	1.25
Días	2.33
Días a semanas	8.67
Semanas	15
Semanas a meses	37.5
Meses	60
Recalcitrantes	180

*Nota.* Fuente: Environmental Protection Agency (2021). *Fugacity-Input parameters*

\*El valor máximo devuelto por este modelo es de 180 días, aunque es probable que la vida media de las moléculas recalcitrantes en el medio ambiente sea sustancialmente más larga.

La EPA (2021) sostiene que:

La biodegradación final es generalmente más lenta en condiciones anaerobias que en condiciones aerobias. BOWIN 3 asume condiciones aeróbicas, pero las capas más profundas de sedimentos acuáticos suelen ser anaeróbicas.

La interfaz (EPI Suite) utiliza los siguientes factores de conversión (Figura 17).

**Figura 17. Factores de conversión de vidas media de Biowin**

<b>Biowin Half-Life Factors:</b>	
Water Factor:	<input type="text" value="1"/>
Soil Factor:	<input type="text" value="2"/>
Sediment Factor:	<input type="text" value="9"/>

*Nota.* Fuente: Environmental Protection Agency (2021). *Fugacity- Half Life values*

Estos factores se establecieron en el Marco P2 de la Environmental Protection Agency para (Environmental Protection Agency, 2021):

- Sedimentos: Se asume que estos son anaeróbicos y que la tasa de biodegradación final en ellos es en promedio una novena (1/9) de la de la columna de agua (que se supone que es aeróbica).
- Suelo: La tasa de biodegradación de una sustancia química en el suelo es, en promedio, la mitad (1/2) que en el agua. Por lo tanto, EPI Suite asigna una vida media en el suelo dos veces mayor que la estimada para el agua.

### b) Valores de emisión

LEV3Epi consigna valores predeterminados que establecen emisiones de 1000 kg/h en agua, aire y suelo mientras que para los sedimentos esta tiene una emisión igual a 0. El modelo de “Salida de Nivel Múltiple” permite valorar siete escenarios de emisiones que van desde los 0 a los 1000 kg/h para los cuatro compartimientos ambientales.

### c) Valores de advección

La advección es definida por Kirkham (2014) como “el intercambio de energía, humedad o momento como resultado de la heterogeneidad horizontal “ (p.509). LEV3EPI define valores de advección únicamente para el aire, agua y sedimentos (Tabla 16).

**Tabla 16.** *Valores de advección definidos en compartimientos ambientales*

Compartimiento	Valor de advección [hrs]	Explicación
Aire	100 ~ 4 días	Los tiempos de residencia más cortos tienden a hacer que la pérdida advectiva de aire sea un mecanismo dominante.
Agua	1000 ~ 42 días	Refleja una mezcla de ríos y lagos
Sedimentos	5000 ~ 5.7 años	Se trata como una pérdida advectiva y solo es importante para las sustancias hidrófobas persistentes.

*Nota.* Fuente. Modificado de: Mackay, D., Paterson, S., & Shiu, W. (1992). *Generic models for evaluating the regional fate of chemicals*. Adv. Mater., 24(6), 695–717

#### **d) Valores del coeficiente de sorción orgánico de carbono normalizado para el suelo y los sedimentos.**

El modelo de fugacidad necesita el coeficiente de sorción orgánico de carbono normalizado para el suelo y los sedimentos (koc) ya que proporciona información sobre la tendencia de un compuesto a adsorberse y adherirse estrechamente al material húmico del suelo (Intitution for Environmental and Health, 2004)

El primer método desarrollado para la estimación del Koc fue el método EQC, sin embargo, en el 2008 la EPA reemplazó dicho método con el MCI<sup>9</sup>, ya que se anticipó que proporcionaría mejores resultados para este parámetro ambiental. No obstante MCI presento algunas anomalías cuando los valores del log kow eran mayores a 7 (Environmental Protection Agency, 2021).

El modelo actualizado de EPI Suite Fugacity conserva el método de estimación MCI predeterminado, pero también incluye la salida del método EQC original para la comparación.

Nota: Cuando el Log Kow es mayor a 7, el modelo puede estar subestimando la masa de material en el sedimento y sobrestimando la masa de material en la columna de agua (biota), por tal motivo se utilizarán los resultados del modelo EQC predeterminado.

#### **e) Otros parámetros de LEV3Epi**

El programa LEVIII Epi restringe el acceso del usuario a muchos parámetros en el Modelo Mackay Nivel III, como lo son: la tasa de lluvia, la deposición de aerosoles, la escorrentía del agua del suelo y los coeficientes de transferencia de masa por difusión; esto también es cierto para el modelo EQC (Environmental Protection Agency,2021).

---

<sup>9</sup> Índice de conectividad molecular de primer orden

Existen otros parámetros que el usuario no puede modificar pero que el programa define, como son las dimensiones del compartimiento para el modelo de nivel III (Tabla 17) y otras propiedades fijas para el modelo de la fugacidad (Tabla 18).

**Tabla 17.** Dimensiones de los compartimientos ambientales para el modelo de fugacidad de nivel III

Dimensiones	Aire	Agua	Suelo	Sedimentos
Volumen [m <sup>3</sup> ]	1x10 <sup>14</sup>	2x10 <sup>11</sup>	1.8x10 <sup>10</sup>	5x10 <sup>8</sup>
Profundidad [m]	1000	20	0.2	0.05
Área [m <sup>2</sup> ]	1x10 <sup>11</sup>	1x10 <sup>10</sup>	9x10 <sup>10</sup>	1x10 <sup>10</sup>

*Nota.* Fuente: Environmental Protection Agency (2021). *Level III Fugacity Model—Theory and Detail*

**Tabla 18.** Valores de destino ambiental del modelo de multimedia

Parámetros	Aire	Agua	Suelo	Sedimentos
<b>Fración volumen</b>				
Aerosol	2x10 <sup>-11</sup>			
Partículas suspendidas		5x10 <sup>6</sup>		
Pez		1x10 <sup>6</sup>		
Aire			0.2	
Agua			0.3	0.8
Sólidos			0.5	0.2
<b>Densidad [km/m<sup>3</sup>]</b>				
A granel	1.19	1000	1500	1280
Aire puro	1.19			
Aerosol	2000			
Líquidos		1000		
Partículas suspendidas		1500		
Pez		1000		
Aire			1.19	
Agua			1000	1000
Sólidos			2400	2400

*Nota.* Fuente: Environmental Protection Agency (2021). *Level III Fugacity Model—Theory and Detail*

### 1.7.3.2 Cálculos para la estimación de la fugacidad

Los cálculos involucran los procesos de transporte, degradación y advección, así como balances de masa del modelo.

## I. Procesos de transporte del modelo

A continuación, se presenta los algoritmos necesarios para calcular las rutas de transporte entre los cuatro compartimentos principales del modelo. Estas ecuaciones ilustran los supuestos importantes del modelo que gobiernan el transporte químico.

### a) Transporte del aire al agua ( $D_{12}$ )

El modelo asume que cuatro procesos gobiernan el transporte de aire a agua:

1. Difusión: Se adopta un enfoque de dos películas y lo representa la Ecuación 9.1.

$$D_{Vw} = \frac{A_w}{\left(\frac{1}{U_1 * Z_1}\right) + \left(\frac{1}{U_2 * Z_2}\right)} \quad (9.1)$$

Donde:

$A_w$ : Área del cuerpo de agua

$U_1$ : Coeficiente de transferencia de masa del lado aire-agua

$U_2$ : Coeficiente de transferencia de masa del lado agua-aire

$Z_1$ : Capacidad de fugacidad en aire (excluidos aerosoles)

$Z_2$ : Capacidad de fugacidad en agua (excluidos sólidos en suspensión y biota)

Estas y otras capacidades de fugacidad se definen en la Tabla 19. Estas capacidades de fugacidad subcompartimental se utilizan para desarrollar la capacidad de fugacidad a granel para cada uno de los cuatro compartimentos principales.

**Tabla 19.** *Definición de las capacidades de fugacidad*

---

$$\begin{aligned} Z_1 &= 1/RT \\ Z_2 &= 1/H \\ Z_3 &= Z_2 * f_3 * K_{oc} / 1000 \\ Z_4 &= Z_2 * f_4 * K_{oc} / 1000 \\ Z_5 &= Z_2 * f_5 * K_{oc} / 1000 \end{aligned}$$

$$Z_6 = Z_2 \cdot 6 \cdot L \cdot K_{ow} / 1000$$

$$Z_7 = Z_1 \cdot 6 \times 10^6 / P_{sl}$$

$$Z_{aire} = Z_1 + 2 \times 10^{-11} \cdot Z_7$$

$$Z_{agua} = Z_2 + 5 \times 10^{-6} \cdot Z_5 + 1 \times 10^{-6} \cdot Z_6$$

$$Z_{suelo} = 0.2 \cdot Z_1 + 0.3 \cdot Z_2 + 0.5 \cdot Z_3$$

$$Z_{sedimento} = 0.8 \cdot Z_2 + 0.2 \cdot Z_4$$

*Nota.* Fuente: Environmental Protection Agency (2021). *Level III Fugacity Model—Theory and Detail*  
 \*R= Constante universal de los gases; T= Temperatura; H= Constante de la Ley de Henry;  $\rho_i$  = densidad de la fase;  $f_i$  = Fracción de la fase de carbono orgánico;  $K_{oc}$  = Coeficiente de adsorción del suelo; L = Contenido lípido para;  $K_{ow}$  = Coeficiente de partición octanol-agua;  $P_{sl}$  = Presión de vapor refrigerada por líquido

2. Disolución en lluvia (químico en fase de vapor): Se calcula a partir de la tasa de lluvia ( $U_3$ ) que tiene unidades de [m/año] y el proceso de transporte viene dado por Ecuación 9.2:

$$D_{RW} = \frac{U_3 A_W}{Z_2} \quad (9.2)$$

3. Deposición húmeda y seca para compuestos en fase particulada: Ambas dependen de la velocidad de deposición del aerosol MTC ( $U_4$ ) y están dadas por la Ecuación 9.3:

$$D_{QW} = \frac{U_4 A_W}{Z_7} \quad (9.3)$$

El transporte total del aire al agua (Ecuación 9.4) es la suma de las ecuaciones 9.1, 9.2 y 9.3.

$$D_{12} = D_{VW} + D_{RW} + D_{QW} \quad (9.4)$$

Para el transporte de agua a aire, la volatilización es el único proceso considerado y es equivalente a la inversa de la difusión por absorción, la Ecuación 9.5 indica este cambio:

$$D_{21} = D_{VW} \quad (9.5)$$

#### **b) Transporte del aire al suelo ( $D_{13}$ )**

Los procesos de transporte que gobiernan el flujo de productos químicos hacia y desde el compartimento del suelo al compartimento de aire son similares a los procesos de transporte de aire a agua. El transporte difusivo hacia y desde el suelo viene dado por:

$$D_{VS} = \frac{1}{\frac{1}{D_s} + \frac{1}{(D_w + D_A)}} \quad (9.6)$$

Donde:

$$D_S = U_7 A_S Z_1 \quad (9.6.1)$$

$$D_S = U_6 A_S Z_2 \quad (9.6.2)$$

$$D_A = U_5 A_S Z_1 \quad (9.6.3)$$

As: Área horizontal de la capa de suelo,

U<sub>5</sub>, U<sub>6</sub> y U<sub>7</sub>: Son coeficiente de transferencia de masa para difusión suelo-aire, suelo-agua y suelo, respectivamente.

1. La disolución por lluvia de compuestos en fase vapor se describe a través de la Ecuación 9.7:

$$D_{RS} = U_3 A_S Z_7 \quad (9.7)$$

2. La deposición húmeda y seca de compuestos en fase particulada en el compartimento del suelo viene dada por:

$$D_{QS} = U_4 A_S Z_7 \quad (9.8)$$

El transporte total del aire al suelo (Ecuación 9.9) es la suma de las ecuaciones 9.6, 9.7 y 9.8.

$$D_{13} = D_{VS} + D_{RS} + D_{QS} \quad (9.9)$$

Para el transporte de suelo al aire, la volatilización es el único proceso considerado y es equivalente a la inversa de la difusión por absorción, la Ecuación 9.10 indica este cambio:

$$D_{31} = D_{VS} \quad (9.10)$$

### c) Transporte del agua a sedimentos (D<sub>24</sub>)

La transferencia de agua a sedimentos se modela mediante dos procesos, difusión y deposición. La EPA (2021) señala que:

La difusión de una sustancia química desde la columna de agua al sedimento se caracteriza por un coeficiente de transferencia de masa ( $U_8$ ) equivalente a la difusividad molecular dividida por la longitud del camino. El caudal de deposición volumétrica en el modelo de fugacidad genérico desarrollado por Mackay et al. (1992) se supone que ocurre a  $5000 \text{ m}^3 / \text{h}$ , que se utiliza para calcular el coeficiente de transferencia de masa ( $U_9$ ). La transferencia total viene dada por (Ecuación 9.11):

$$D_{24} = U_8 A_W Z_2 + U_9 A_W Z_5 \quad (9.11)$$

#### d) Transporte del sedimento al agua ( $D_{42}$ )

El movimiento del sedimento al agua tiene en cuenta la tasa de resuspensión del sedimento con el coeficiente de transferencia de masa apropiado ( $U_{10}$ ) (Ecuación 9.12).

$$D_{42} = U_8 A_W Z_2 + U_{10} A_W Z_4 \quad (9.12)$$

#### e) Transporte del suelo al agua ( $D_{32}$ )

La escorrentía y la erosión de una sustancia química del suelo al agua vienen definidas por la Ecuación 9.13:

$$D_{32} = U_{11} A_S Z_2 + U_{12} A_S Z_3 \quad (9.13)$$

Donde:

$U_{11}$  y  $U_{12}$  son los coeficientes de transferencia de masa para escorrentía del suelo al agua y el suelo a los sólidos.

Mientras tanto, los valores aplicados en el modelo aparecen en la Tabla 20, los cuales están determinados por el programa.

**Tabla 20.** Valores del MTC para los procesos de transporte intermedia del modelo<sup>1</sup>

MTC <sup>a</sup>	Descripción	Valores [m/h]
$U_1$	Lado aire, aire-agua	5
$U_2$	Lado agua, aire-agua	0.05

U <sub>3</sub>	Tasa de lluvia	1x10 <sup>-4</sup>
U <sub>4</sub>	Deposición de aerosol	6x10 <sup>-10</sup>
U <sub>5</sub>	Difusión de la fase suelo-aire	0.02
U <sub>6</sub>	Trasporte de la fase suelo-agua	1x10 <sup>-5</sup>
U <sub>7</sub>	Capa límite de suelo-aire	5
U <sub>8</sub>	Sedimentos-agua	1x10 <sup>-4</sup>
U <sub>9</sub>	Deposición de sedimentos	5x10 <sup>-7</sup>
U <sub>10</sub>	Resuspensión de sedimentos	2x10 <sup>-7</sup>
U <sub>11</sub>	Escorrentía de suelo-agua	5x10 <sup>-5</sup>
U <sub>12</sub>	Escorrentía de suelo-sólidos	1x10 <sup>-8</sup>

Nota. Fuente: Environmental Protection Agency (2021). *Level III Fugacity Model—Theory and Detail*

a Coeficiente de Transferencia de Masa

<sup>1</sup>Valores obtenidos de Mackay et al., 1992

## II. Procesos de degradación y advección en el modelo

Por lo general, la degradación se contabiliza en cada compartimento considerando una única tasa de degradación para la reacción adecuada (por ejemplo, biodegradación, hidrólisis, etc.). Matemáticamente, estas pérdidas están representadas por las siguientes ecuaciones:

$$DR_1 = V_1 Z_{aire} k_{aire} \quad (10.1)$$

$$DR_2 = V_2 Z_{agua} k_{agua} \quad (10.2)$$

$$DR_3 = V_3 Z_{suelo} k_{suelo} \quad (10.3)$$

$$DR_4 = V_4 Z_{sedimentos} k_{sedimentos} \quad (10.4)$$

Donde:

K: Constante de velocidad de primer orden

V<sub>1</sub>, V<sub>2</sub>, V<sub>3</sub> y V<sub>4</sub>: Volúmenes del compartimento de aire, agua, suelo y sedimentos.

En cuanto a las pérdidas por advección solo se consideran en aire, agua y sedimentos. Se calculan multiplicando un caudal volumétrico apropiado para un medio en particular, por la capacidad de fugacidad correspondiente de ese medio.

## III. Balance de masa

El sistema asume que no hay emisiones directas al compartimento de sedimentos y que el compartimento del suelo no tiene pérdidas por advección. Se desarrollaron un conjunto de ecuaciones diferenciales para el cambio de concentración con

respecto al tiempo en cada uno de los cuatro compartimentos ambientales, a continuación, se muestran las ecuaciones del balance de masa:

$$\frac{dC_1}{dT} = V_1 Z_1 \frac{df_1}{dT} = E_1 + f_2 D_{21} + f_3 D_{31} - f_1 D_{12} - f_1 D_{13} - f_1 DR_1 - f_1 DA_1 \quad (11.1)$$

$$\frac{dC_2}{dT} = V_2 Z_2 \frac{df_2}{dT} = E_2 + f_1 D_{12} + f_3 D_{32} + f_4 D_{42} - f_2 D_{21} - f_2 D_{24} - f_2 DR_2 - f_2 DA_2 \quad (11.2)$$

$$\frac{dC_3}{dT} = V_3 Z_3 \frac{df_3}{dT} = E_3 + f_1 D_{13} - f_3 D_{31} - f_3 D_{32} - f_3 DR_3 \quad (11.3)$$

$$\frac{dC_4}{dT} = V_4 Z_4 \frac{df_4}{dT} = f_2 D_{24} - f_4 D_{42} - f_4 DR_4 - f_4 DA_4 \quad (11.4)$$

Donde:

E<sub>i</sub>: Tasa de emisión al i-ésimo compartimento (i = 1,2,3,4 para aire, agua, suelo y sedimento, respectivamente).

F<sub>i</sub>: Fugacidad en el i-ésimo compartimento

DA<sub>i</sub>: Pérdidas advectivas en el i-th compartimento

Suponiendo condiciones de estado estacionario en las que el cambio en la concentración de la sustancia química en cada medio ambiental con respecto al tiempo se acerca a cero (ecuaciones 11.1 -11.4 se acerca a cero), es posible resolver la fugacidad en cada compartimento. Estas soluciones son:

$$f_1 = \frac{(J_1 + f_2 J_2)}{J_3} \quad (11.5)$$

$$f_2 = \frac{\left[ E_2 + \frac{J_1 J_4}{J_3} + \frac{E_3 D_{32}}{DT_3} \right]}{\left[ DT_2 - \frac{J_2 J_4}{J_3} - \frac{D_{24} D_{42}}{DT_4} \right]} \quad (11.6)$$

$$f_3 = \frac{(E_3 + f_1 D_{13})}{DT_3} \quad (11.7)$$

$$f_4 = \frac{f_2 D_{24}}{DT_4} \quad (11.8)$$

En las ecuaciones anteriores (11.5 -11.8) las DT<sub>i</sub> se obtienen a partir de estas:

$$DT_1 = DR_1 + DA_1 + D_{12} + D_{13} \quad (11.9)$$

$$DT_2 = DR_2 + DA_2 + D_{21} + D_{23} + D_{24} \quad (11.10)$$

$$DT_3 = DR_3 + D_{31} + D_{32} \quad (11.11)$$

$$DT_4 = DR_4 + DA_4 + D_{42} \quad (11.12)$$

Para  $J_i$ , se obtienen por medio de estas ecuaciones:

$$J_1 = \frac{E_1}{DT_1} + \frac{E_3 D_{31}}{DT_3 DT_1} \quad (11.13)$$

$$J_2 = \frac{D_{21}}{DT_1} \quad (11.14)$$

$$J_3 = 1 + \frac{D_{31} D_{13}}{DT_1 DT_3} \quad (11.15)$$

$$J_4 = D_{12} + \frac{D_{32} D_{13}}{DT_3} \quad (11.16)$$

Usando la relación de que la concentración en un compartimiento particular es equivalente a la fugacidad multiplicada por la capacidad de fugacidad apropiada ( $C_i = f_i Z_i$ ), se calculó la concentración en estado estacionario en cada medio ambiental (aire, agua, suelo, sedimento)

## CAPÍTULO II: METODOLOGÍA

EPI Suite v.4.11 es una Interfaz de Programas de Estimación de destino ambiental y propiedades físicas y químicas cuya finalidad es proporcionar información de nuevos productos químicos que carecen de datos experimentales (EPA, 2021).

Para poder utilizar cualquiera de los programas de EPI Suite v.4.11 fue necesario indicar cual sustancia química es la que se iba a evaluar, de acuerdo con la Figura 18 existen tres opciones para hacerlo:

Figura 18. Pantalla de inicio de EPI Suite v.4.11

The screenshot shows the EPI Suite v.4.11 Welcome Screen. The interface includes a menu bar at the top with options: File, Edit, Functions, Batch Mode, Show Structure, Output, Fugacity, STP, and Help. Below the menu is a navigation bar with buttons: PhysProp, Previous, Get User, Save User, Search CAS, and Calculate. On the left side, there is a vertical sidebar with buttons for various models: AOPWIN, KOWWIN, BIOWIN, MPBPVP, WSKOW, WATERNT, HENRYWIN, KOAWIN, KOCWIN, BCFBAF, HYDROWIN, BioHCwin, DERMWIN, ECOSAR, and EPI Links. The main area contains input fields for 'Input CAS #', 'Input Smiles:', and 'Input Chem Name'. Below these are 'Name Lookup' options for 'River' and 'Lake' with numerical inputs for 'Water Depth', 'Wind Velocity', and 'Current Velocity'. There are also fields for 'Henry LC', 'Melting Point', 'Boiling Point', 'Water Solubility', 'Vapor Pressure', and 'Log Kow'.

Nota. Fuente: Environmental Protection Agency (2021). *EPI Suite-Welcome Screen*

La primera opción es "Input CAS #", en ella se colocó el número de CAS del 1-H benzotriazol y después se dio clic en el botón de "Search CAS" como se muestra en la Figura 19.1

Figura 19.1. Introducción del 1 H- benzotriazol mediante Input CAS #

The screenshot shows the EPI Suite - Welcome Screen. The main form area contains the following fields and values:

- Input CAS #: 95147
- Input Smiles: (empty)
- Input Chem Name: (empty)
- Henry LC: (empty) atm-m<sup>3</sup>/mole
- Water Solubility: (empty) mg/L
- Melting Point: (empty) Celsius
- Vapor Pressure: (empty) mm Hg
- Boiling Point: (empty) Celsius
- Log Kow: (empty)
- Water Depth: 1 (River) / 1 (Lake) meters
- Wind Velocity: 5 (River) / 0.5 (Lake) meters/sec
- Current Velocity: 1 (River) / 0.05 (Lake) meters/sec

Nota. Fuente: Environmental Protection Agency (2021). *EPI Suite-Welcome Screen*

Una vez hecho esto, automáticamente se llenan las casillas “Input SMILES” e “Input Chem Name”, así como la estructura del 1 H- benzotriazol; en la Figura 19.2 se puede observar dicho cambio.

Figura 19.2. “Input CAS #” y los demás valores de entrada completos

The screenshot shows the EPI Suite - Welcome Screen with the following fields and values:

- Input CAS #: 95147
- Input Smiles: c1ccc2nnnc2c1
- Input Chem Name: 1H-Benzotriazole
- Henry LC: (empty) atm-m<sup>3</sup>/mole
- Water Solubility: (empty) mg/L
- Melting Point: (empty) Celsius
- Vapor Pressure: (empty) mm Hg
- Boiling Point: (empty) Celsius
- Log Kow: (empty)
- Water Depth: 1 (River) / 1 (Lake) meters
- Wind Velocity: 5 (River) / 0.5 (Lake) meters/sec
- Current Velocity: 1 (River) / 0.05 (Lake) meters/sec

The chemical structure of 1H-Benzotriazole is shown on the right side of the form.

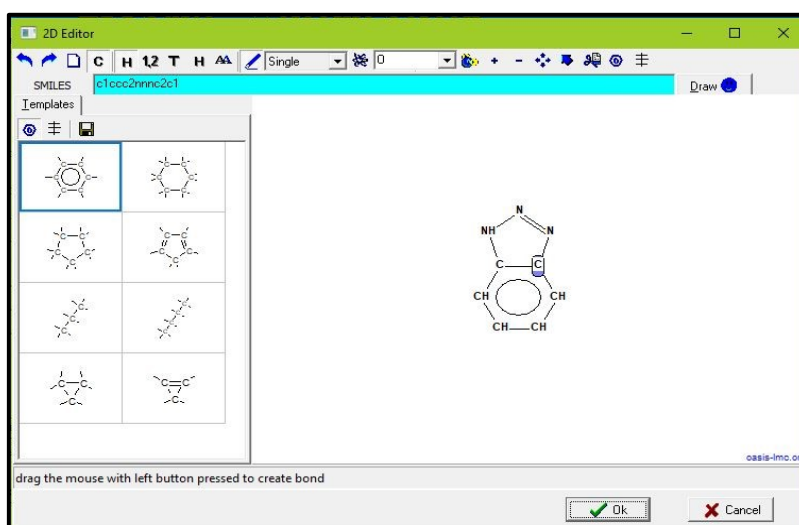
Nota. Fuente: Environmental Protection Agency (2021). *EPI Suite-Welcome Screen*

La segunda opción mediante “Input SMILES” (Simplified Molecular Input Line Entry System), en donde se escribió la notación química del 1 H- benzotriazol (Figura 20.1) y junto con el botón DRAW se obtuvo su estructura química (Figura 20.2).

**Figura 20.1.** Introducción del 1 H- benzotriazol mediante Input SMILES

*Nota.* Fuente: Environmental Protection Agency (2021). *EPI Suite-Welcome Screen*

**Figura 20.2.** Estructura química del 1 H- benzotriazol en DRAW



*Nota.* Fuente: Environmental Protection Agency (2021). *Structure drawing module*

En la Figura 20.3 aparecen automáticamente llenas las casillas de “Input CAS” e “Input Chem Name” una vez que se aceptó la estructura proporcionada por DRAW.

**Figura 20.3.** “Input SMILES” y los demás valores de entrada completos

The screenshot shows the EPI Suite - Welcome Screen interface. The left sidebar contains various assessment methods like ADPWIN, KOWWIN, etc. The main area has input fields for 'Input CAS #' (000095-14-7), 'Input Smiles:' (c12c(cccc1)N=NN2), and 'Input Chem Name:' (1H-BENZOTRIAZOLE). Below these, a 'Name Lookup' section displays calculated properties: Henry LC (3 atm-m/mole), Water Solubility (1.98E+004 mg/L), Melting Point (100 Celsius), Vapor Pressure, Boiling Point (350 Celsius), Log Kow (1.44), and water flow parameters (River/Lake) for Water Depth, Wind Velocity, and Current Velocity. A chemical structure diagram of 1H-benzotriazole is shown on the right.

Nota. Fuente: Environmental Protection Agency (2021). *EPI Suite-Welcome Screen*

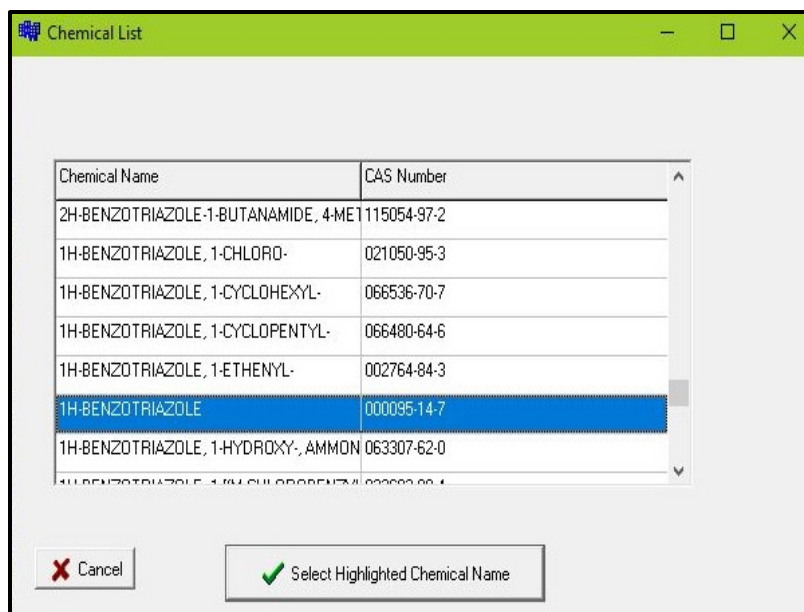
Finalmente, la tercera opción fue “Input Chem Name”, en la cual solo se añadió el nombre (Figura 21.1) y se dio clic en el recuadro “Name Look up” para elegir el 1 H-benzotriazol de la lista de sustancias químicas (Figura 21.2).

**Figura 21.1.** Introducción del 1 H- benzotriazol mediante Input Chem Name

This screenshot shows the same EPI Suite - Welcome Screen interface, but with the 'Input Chem Name:' field containing the text '123 benzotriazole'. The 'Name Lookup' button is highlighted with a dashed box, indicating the next step in the process. The other input fields and calculated parameters are currently empty.

Nota. Fuente: Environmental Protection Agency (2021). *EPI Suite-Welcome Screen*

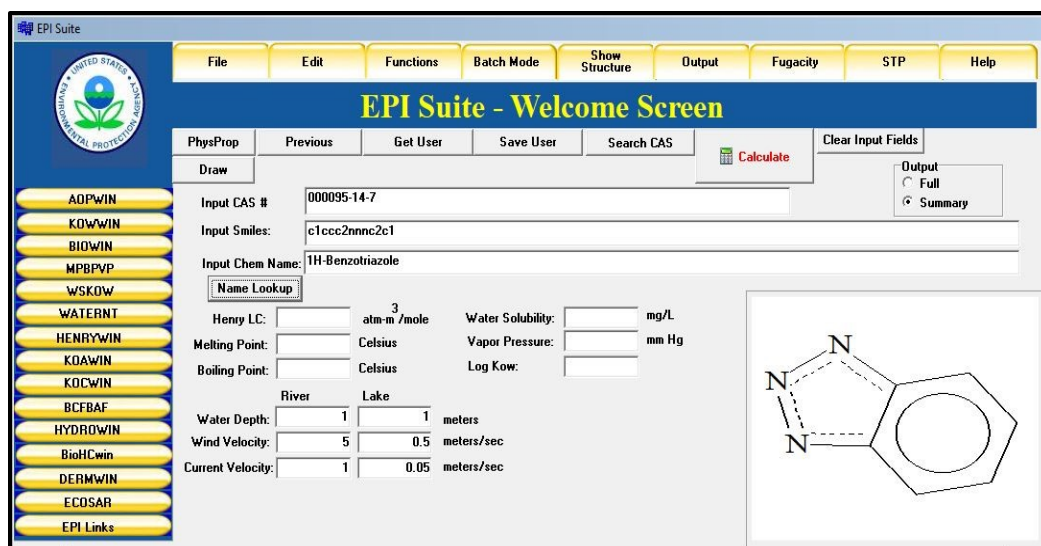
**Figura 21.2.** Lista de sustancias químicas de EPI Suite



*Nota.* Fuente: Environmental Protection Agency (2021). *Chemical list*

De igual manera que las opciones anteriores, al aceptar “Select Highlighted Chemical Name” automáticamente se llenaron los campos de “Input CAS #”, “Input SMILES” y la estructura química del 1 H-benzotriazol también conocido como 1,2,3 benzotriazol; la Figura 21.3 es ejemplo de ello.

**Figura 21.3.** “Input Chem Name” y los demás valores de entrada completos



*Nota.* Fuente: Environmental Protection Agency (2021). *EPI Suite-Welcome Screen*

Considerando lo anterior, se pudo utilizar cualquiera de las tres formas para ingresar el 1 H- benzotriazol, de ahí se transfirieron los datos de las propiedades fisicoquímicas de dicha sustancia mediante el botón “PhysProp” (Figura 22).

**Figura 22.** *Trasferencia de datos de propiedades fisicoquímicas del 1 H- benzotriazol*

The screenshot displays the EPI Suite software interface. The main window is titled "EPI Suite - Welcome Screen" and features a menu bar with options: File, Edit, Functions, Batch Mode, Show Structure, Output, Fugacity, STP, and Help. On the left side, there is a vertical toolbar with buttons for various models: ADPWIN, KOWWIN, BIOWIN, MPBPVP, WSKOW, WATERNT, HENRYWIN, KOAWIN, KOCWIN, BCFBAF, HYDROWIN, BioHCwin, DERMWIN, ECOSAR, and EPI Links. The "PhysProp" window is open, showing "Physical Chemical Properties". It contains a table of experimental data from the PhysProp Database:

Experimental Data from PhysProp Database:	
CAS Number	000095-14-7
Chem Name	1H-BENZOTRIAZOLE
MP (deg C)	100
BP (deg C)	350
Log Kow	1.44
Kow ref	HANSCH,C ET AL. (1995)
Water Sol	1.98E+004 mg/L
WS temp	25 deg C
WS ref	DAVIS, LN ET AL. (1977)
Vapor Pr	...
Henry LC	...
pKa	8.37
pKa temp	20 deg C
pKa ref	SERJEANT, EP & DEMPSEY, B (1979)
DH Rate	...
Experimental Data from PhysProp	
CAS Number	000273-02-9
Chem Name	2H-BENZOTRIAZOLE
MP (deg C)	...

Below the table, a message states: "There are several isomers listed in the physical/chemical properties database for this chemical. Please select the desired isomer and press the Transfer Data button." At the bottom, there is a "Cancel" button, a dropdown menu showing "000095-14-7", and a "Transfer data to EPI screen" button.

*Nota.* Fuente: Environmental Protection Agency (2021). *Physical Chemical Properties*

## 2.1 Estimación de la volatilidad del 1 H- benzotriazol

### 2.1.1 Criterios para la interpretación de resultados de WVOLWIN

Para interpretar que tan volátil es la sustancia de interés con respecto a la constante de la Ley de Henry, el programa proporciona una tabla (Tabla 21) con la cual se pueden cotejar los resultados.

**Tabla 21.** Constante de Ley de Henry- Volatilidad en varios rangos

Rangos de la cte de Henry (H)	Especificaciones
$H < 3 \times 10^{-7} \text{ atm-m}^3/\text{mol}$	La sustancia es menos volátil que el agua y su concentración incrementará a medida que el agua se evapore. La sustancia es no volátil.
$10^{-7} < H < 10^{-5} \text{ atm-m}^3/\text{mol}$	La sustancia se volatiliza lentamente a una velocidad que depende de H. La resistencia en fase gaseosa domina a la resistencia en fase líquida por un factor de diez como mínimo. La velocidad se controla mediante una difusión molecular lenta a través del aire.
$H < 2 \times 10^{-5} \text{ atm-m}^3/\text{mol}$	La sustancia química tiende a dividirse en el líquido (es decir, es bastante soluble) y la transferencia se controla en fase gaseosa.
$10^{-5} < H < 10^{-3} \text{ atm-m}^3/\text{mol}$	La resistencia en fase líquida y en fase gaseosa son importantes. La volatilización de compuestos en este rango es menos rápida que para compuestos en el rango más alto de H, pero sigue siendo un mecanismo de transferencia significativo. Muchos hidrocarburos aromáticos policíclicos (HAP) y aromáticos halogenados se encuentran en este rango.
$H > 10^{-3} \text{ atm-m}^3/\text{mol}$	La resistencia de la película de agua domina por un factor de al menos diez. La transferencia se controla en fase líquida. La volatilización es rápida.

*Nota.* Fuente: Environmental Protection Agency (2021). *Estimation Considerations for the Water Volatilization Model*

En relación con la constante de la Ley de Henry, esta implica algunas propiedades físicas que pueden apoyar para la interpretación de los resultados, tal es el caso de la presión de vapor y la solubilidad del agua.

Para la presión de vapor (VP), esta se obtiene junto con el punto de fusión (MP) y ebullición (BP) en el programa MPBPWIN. La Tabla 22 concierne a rangos de estos valores que pueden aportar una idea más clara sobre a qué compartimento ambiental se desplazará la sustancia una vez liberada.

**Tabla 22.** Rangos de punto de fusión, ebullición y presión de vapor

Punto de fusión	
Rangos del punto de fusión (MP)	Especificación
MP < 25 ° C	Evaluado como un líquido
MP > 25 ° C	Evaluado como un sólido
Punto de ebullición	
Rangos del punto de fusión (BP)	Especificación
BP < 25 ° C	Evaluado como un gas
Presión de vapor	
Rangos del punto de fusión (MP)	Especificación
VP > 10 <sup>-4</sup>	Existe principalmente en la fase gaseosa
VP de 10 <sup>-5</sup> a 10 <sup>-7</sup>	Existe en fase vapor y particulada
VP < 10 <sup>-8</sup>	Existe principalmente en la fase solida

Nota. Fuente: Environmental Protection Agency (2012). Sustainable Futures / P2 Framework Manual 2012 EPA-748-B12-001/5. Estimating Physical / Chemical and Environmental Fate Properties with EPI Suite™

En concerniente a la solubilidad calculada en los programas WATERNT y WSKOWWIN, esta revela información sobre la distribución de la sustancia química en el agua, aire, suelo y sedimentos; y sobre la exposición ambiental o humana a través de la liberación al medio acuático. La EPA (2012) señala que:

Los productos químicos que no son solubles en agua no entrarán en la columna de agua y no es probable que sean motivo de preocupación para la exposición de los seres humanos por la ingestión de agua potable (p.9).

La Tabla 23 brinda rangos de solubilidad junto con su clasificación:

**Tabla 23.** Clasificación de la solubilidad de acuerdo con sus rangos

Rangos de la solubilidad en agua (WSol) [mg/l]	Clasificación
Wsol > 10,000	Muy soluble
Wsol > 1000 a 10,000	Soluble
Wsol > 100 a 1000	Moderadamente soluble
Wsol > 0.1 a 100	Ligeramente soluble
Wsol < 0.1	Insignificadamente soluble

Tabla. Nota. Fuente: Environmental Protection Agency (2012). Sustainable Futures / P2 Framework Manual 2012 EPA-748-B12-001/5. Estimating Physical / Chemical and Environmental Fate Properties with EPI Suite™

## 2.1.2 Ejecución del modelo para estimar la volatilidad del 1 H-benzotriazol

WVOLLWIN posee tres campos de entrada para un río y lago modelo, en la Figura 23 se muestran los parámetros (profundidad del agua, velocidad del viento y velocidad de la corriente) junto con los valores establecidos por el programa.

Figura 23. Parámetros de entrada de WVOLLWIN

	River	Lake	units
Water Depth:	1	1	meters
Wind Velocity:	5	0.5	meters/sec
Current Velocity:	1	0.05	meters/sec

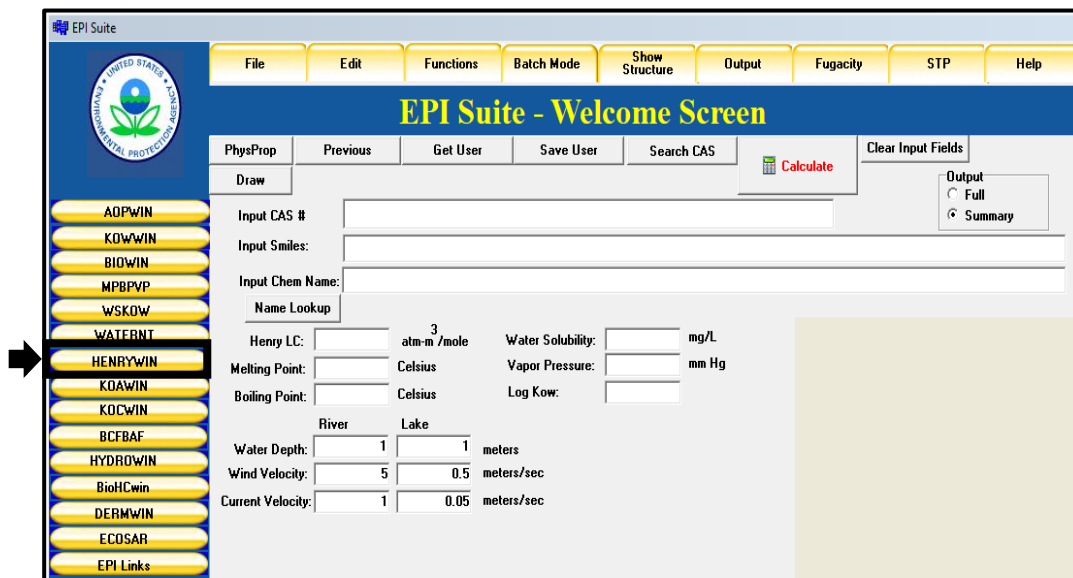
Nota. Fuente: Environmental Protection Agency (2021). EPI Suite-Welcome Screen-WVOLLWIN

WVOLLWIN se ejecutó transfiriendo datos del 1 H-benzotriazol como son: el peso molecular, la constante de la Ley de Henry (usando el programa HENRYWIN) y los valores de la Figura 22.

**NOTA:** El programa HENRYWIN proporciona la constante de la ley de Henry. Si se desea conocer dicha constante a diferentes temperaturas para observar el efecto de la volatilidad de cualquier sustancia es posible saberlo. Para hacerlo es necesario ejecutar el programa HENRYWIN por separado, este puede generar valores en un rango de 0 a 50 °C.

HENRYWIN se encuentra en la parte izquierda de la interfaz, la Figura 24.1 indica su ubicación.

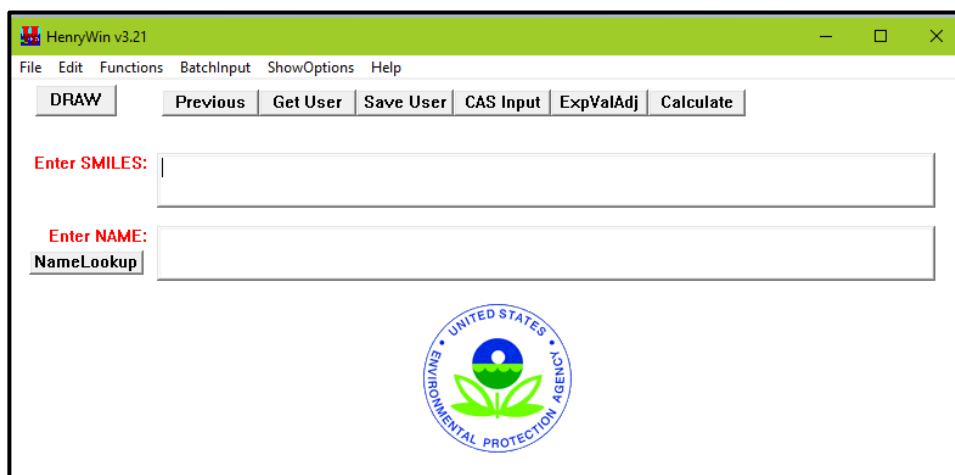
Figura 24.1. Elección del programa HENRYWIN



Nota. Fuente: Environmental Protection Agency (2021). *EPI Suite-Welcome Screen-HENRYWIN*

Una vez seleccionado HENRYWIN, existen dos formas para ingresar el nombre del 1 H- benzotriazol, ya sea por “Input SMILES” o por “Input Chem Name” (Figura 24.2).

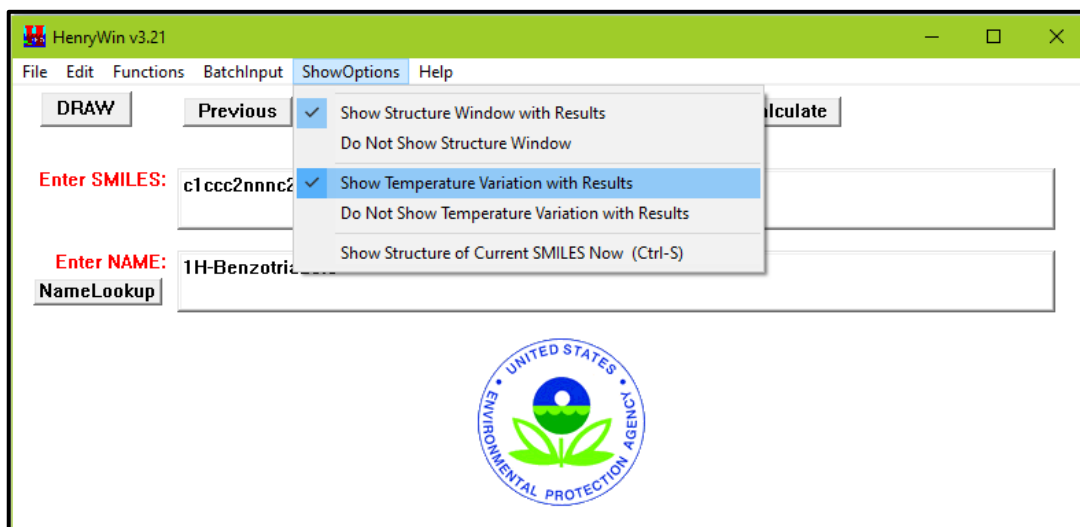
Figura 24.2. Pantalla de inicio de HENRYWIN



Nota. Fuente: Environmental Protection Agency (2021). *HenryWin v.3.21*

Realizado el llenado de cualquiera de esos campos se seleccionó en la pestaña Show Options la opción “Show Temperature Variation with Results” como se muestra en la Figura 24.3.

**Figura 24.3.** Selección de la constante de la Ley de Henry a diferentes temperaturas



*Nota.* Fuente: Environmental Protection Agency (2021). *HenryWin v.3.21*

## 2.2 Cálculo del porcentaje de remoción y biodegradación del 1 H-benzotriazol en una planta de tratamiento de agua residual biológica

### 2.2.1 Criterios para la interpretación de resultados de STPWIN

Para poder interpretar los resultados sobre la remoción de una sustancia química en una planta de tratamiento de agua residual con tratamiento secundario es posible apoyarse de la biodegradación, de hecho, la Tabla 24 proporciona información acerca del tiempo para los modelos Biowin 3 y 5.

**Tabla 24.** *Tiempos de biodegradación*

<b>Biowin 3 (última degradación)</b>	
<b>Valor</b>	<b>Tiempo</b>
>4.75 - 5	Horas
>4.25 - 4.75	Horas a días
>3.75 - 4.25	Días
>3.25 - 3.75	Días a semanas
>2.75 - 3.25	Semanas
>2.25 - 2.75	Semanas a meses
>1.75 - 2.25	Meses
<1.75	Recalcitrante
<b>Biowin5 (MITI linear)</b>	
> 0.50	Probable a biodegradarse rápidamente
< 0.50	No es probable a biodegradarse rápidamente

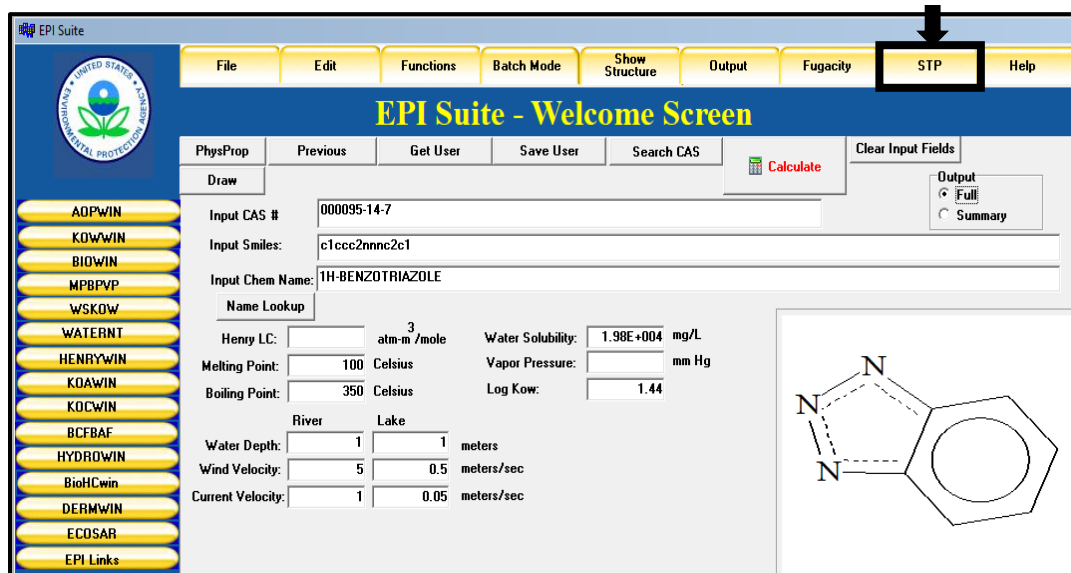
*Nota.* Fuente: Environmental Protection Agency (2012). Sustainable Futures / P2 Framework Manual 2012 EPA-748-B12-001: Estimating Physical / Chemical and Environmental Fate Properties with EPI Suite™

La información pertinente a la Tabla 24 podría justificar la persistencia de los compuestos químicos, los cuales si poseen tiempos de biodegradación muy largos pueden ser muy persistentes en el medio ambiente si no están sujetos a destrucción por otros procesos como fotólisis, hidrólisis, etc.

## 2.2.2 Modelamiento para estimar el porcentaje de remoción y biodegradación del 1 H-benzotriazol en una planta de tratamiento de agua residual biológica

Para correr el programa STPWIN fue necesario situarse en la barra superior y acceder al botón “STP” (Figura 25.1).

Figura 25.1. Elección del programa STPWIN



Nota. Fuente: Environmental Protection Agency (2021). *EPI Suite-Welcome Screen-STP*

“STP” cuenta con tres opciones:

- Usar 10,000 horas para para el clarificador primario, el recipiente de aireación y el tanque de sedimentación.
- Usar estimaciones basadas en las salidas del programa BIOWIN y un método de la EPA para vidas medias de biodegradación.
- Usar valores de vida media para el clarificador primario, el recipiente de aireación y el tanque de sedimentación. Esta opción se ocupa en caso de contar con esa información.

Se eligió la opción A y B, la primera para observar el peor de los escenarios en caso de que no se llevara a cabo la biodegradación, y respectivamente la segunda para calcular el porcentaje de remoción y biodegradación mediante el método de la EPA

(EPA draft method) que recomienda la literatura de esta. En la Figura 25.2 se pueden ver las opciones, así como las relaciones de vida media que usa BIOWIN.

**Figura 25.2. Parámetros de las vidas media de STPWIN**

	Bio P	Bio A	Bio S
Biowin3 <= weeks + Biowin5 > 0.5	10	1	1
Biowin3 <= weeks	30	3	3
Biowin5 > 0.5	100	10	10
Biowin3 = wk-mo	300	30	30
Biowin3 = months	1000	100	100
Biowin3 = recalcit	10000	10000	10000

*Nota. Fuente: Environmental Protection Agency (2021). STP Half-Life Parameters*

## 2.3 Estimación de la fugacidad del 1 H- benzotriazol

### 2.3.1 Criterios para la interpretación de resultados de LEVIII Epi

El modelo de fugacidad requiere del empleo de diferentes variables además de las mencionadas en el apartado de “ Consideraciones de LEVIII Epi”, dichas variables son: el punto de fusión, la presión de vapor, la constante de la Ley de Henry y el log kow.

Para las interpretaciones del punto de fusión, la presión de vapor y la constante de la Ley de Henry estas se encuentran descritas en el apartado de “Criterios para la interpretación de resultados de WVOLWIN”.

Mientras que para el coeficiente de partición octanol agua (log kow), este indica la afinidad que tendrá la sustancia química con respecto a las grasas o a los lípidos y proveerá un panorama del destino de la sustancia química hacia alguno de los cuatro compartimientos ambientales. Además, es un parámetro importante que permite estimar otras propiedades, como lo son: la solubilidad del agua, la bioconcentración, la adsorción del suelo y la toxicidad en el medio acuático (Environmental Protection Agency, 2012).

La Tabla 25 proporciona los rangos del log kow para poder reconocer que tan hidrofílico o lipofílico es la sustancia química.

**Tabla 25. Especificaciones de Log kow**

Rangos de Log kow	Especificaciones
Log kow<1	Altamente soluble en agua (hidrofílico)
Log kow>4	No tan soluble en agua (hidrofóbico)
Log kow>8	No es fácilmente biodisponible
Log kow>10	No biodisponible (difícil de medir experimentalmente)

*Nota.* Fuente: Environmental Protection Agency (2012). Sustainable Futures / P2 Framework Manual 2012 EPA-748-B12-001: Estimating Physical / Chemical and Environmental Fate Properties with EPI Suite™

Ahora bien, el coeficiente adsorción del suelo (log Koc) es la capacidad de una sustancia química para adherirse a la porción orgánica del suelo, sedimentos y lodos. La EPA (2012) menciona que el Koc indica la posibilidad de que el químico se filtre a través del suelo y se introduzca en el agua subterránea y se reparta entre el agua y los sólidos en suspensión y los sedimentos en la columna de agua; también recalca que la fuerte adsorción al suelo afectará otras propiedades del destino. La Tabla 26 presentada a continuación revela información acerca de los rangos del log koc con respecto a que tan fuerte o débil es la adsorción de una sustancia química.

**Tabla 26.** Adsorción de una sustancia química mediante su log koc

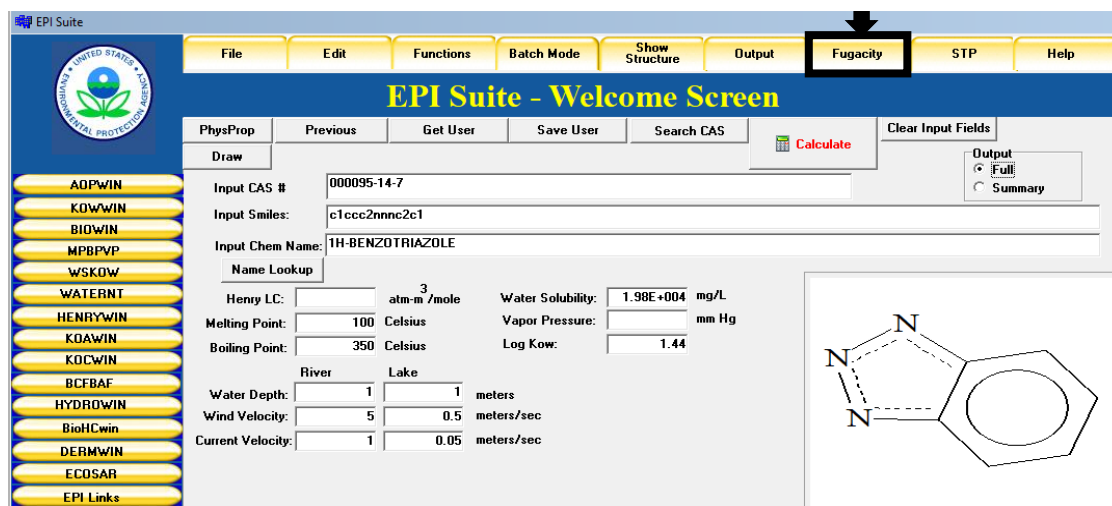
Rangos de Log koc	Clasificación de adsorción
Log koc > 4.5	Muy fuerte adsorción al suelo/ Sedimentos, insignificante migración a las aguas subterráneas
Log koc de 3.5 a 4.4	Fuerte adsorción al suelo/ Sedimentos, insignificante migración lenta a las aguas subterráneas
Log koc de 2.5 a 3.4	Moderada adsorción al suelo/ Sedimentos, migración lenta a las aguas subterráneas
Log koc de 1.5 a 2.4	Baja adsorción al suelo/ Sedimentos, migración moderada a las aguas subterráneas
Log koc < 1.5	Insignificante adsorción al suelo/ Sedimentos, migración rápida a las aguas subterráneas

*Nota.* Fuente: Environmental Protection Agency (2012). Sustainable Futures / P2 Framework Manual 2012 EPA-748-B12-001: Estimating Physical / Chemical and Environmental Fate Properties with EPI Suite™

### 2.3.2 Modelamiento para estimar la fugacidad del 1 H- benzotriazol

El programa de fugacidad, denominado en EPI Suite v.4.11 como LEVIIIIEPI se encuentra posicionado en la barra superior (Figura 26.1)

Figura 26.1. Elección del programa LEVIII EPI



Nota. Fuente: Environmental Protection Agency (2021). *EPI Suite-Welcome Screen-Fugacity*

En el programa de Fugacity se desplegarán cuatro parámetros necesarios para ejecutar el programa (Figura 26.2) y para cada una se seleccionó la manera en que se realizaron las estimaciones:

Figura 26.2. Parámetros de Fugacity



Nota Fuente: Environmental Protection Agency (2021). *EPI Suite-Welcome Screen-Fugacity*

### Valores de vida media

Posee tres opciones, sin embargo, se eligió “Use BLOWIN (Ultimate) y AOPWIN estimates”; posteriormente en el apartado de **Set Biowin Half-Live Values** se usaron los valores por Default de la EPA y se aceptaron los cambios (Figura 26.2.1).

**Figura 26.2.1.** Selección del modelo y valores para los valores de vida media de la fugacidad.

Nota. Fuente: Environmental Protection Agency (2021). *Fugacity Half-Life selection*

### Valores de emisión

Posee dos modelos:

- A. Single Level III Output: Utiliza tasas de emisión de 1000 kg/h para agua, aire y suelo, para sedimentos es de 0 kg/h.
- B. Multiple Level III Output: Utiliza tasas de emisión de 0 a 1000 kg/h para agua, aire, suelo y sedimentos.

Se usó “Multiple Level III Output” (Modelo de Salidas de Nivel Múltiple III) debido a las siete iteraciones que realiza para poder observar el comportamiento del 1 H-benzotriazol a diferentes emisiones en cada compartimento ambiental (Figura 26.2.2).

**Figura 26.2.2. Selección del modelo de emisiones**

*Nota.* Fuente: Environmental Protection Agency (2021). *Level III Emissions*

### Valores de advección

En esta sección se usaron los valores por default, como se observan en la Figura 26.2.3

**Figura 26.2.3. Selección de los tiempos de advección**

*Nota.* Fuente: Environmental Protection Agency (2021). *Advection Times*

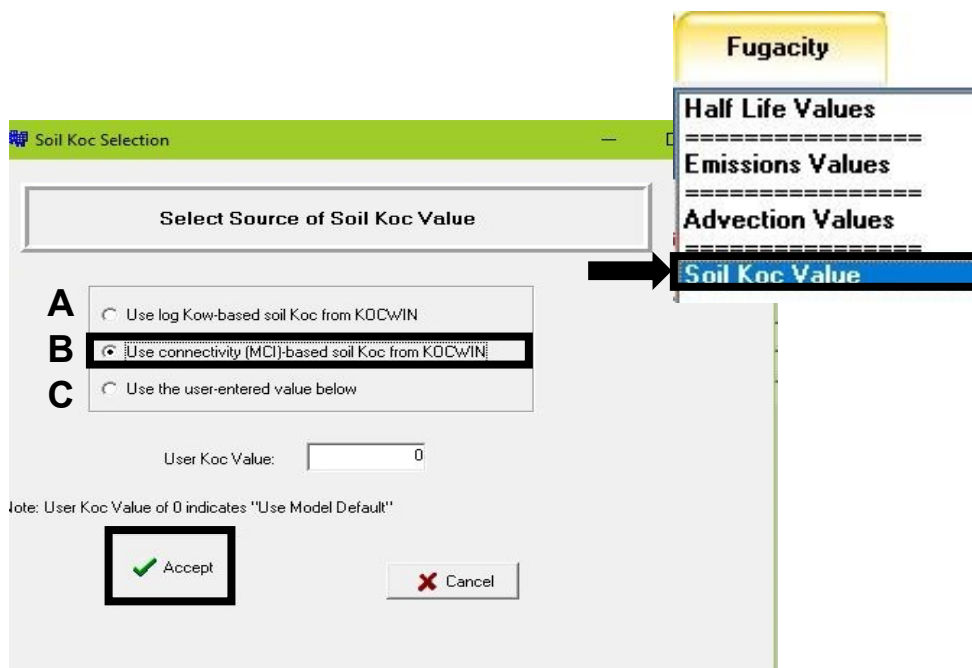
Valores de del Koc (coeficiente de sorción orgánico de carbono normalizado para el suelo y los sedimentos)

Tiene tres opciones:

- A. Usar log kow basado en el koc del suelo desde KOCWIN.
- B. Usar el MCI basado en el koc del suelo desde KOCWIN.
- C. Usar el koc del suelo predeterminado por el usuario.

Se usó la opción B ya que cuenta con mayor precisión, esto es visible en la Figura 26.2.4.

**Figura 26.2.4. Selección del modelo MCI**



*Nota.* Fuente: Environmental Protection Agency (2021). *Soil Koc Selection*

Finalmente, ya que se establecieron los modelos, variables y valores se ejecutaron todos los programas en conjunto en el botón “Calculate” (Figura 27.1). Para poder ver los resultados completos se eligió el modo “Full” (Figura 27.2).

**Figura 27.1 y 27.2 Opciones para finalizar los cálculos y obtener resultados**



*Nota.* Fuente: Environmental Protection Agency (2021). *EPI Suite-Welcome Screen*

## CAPÍTULO III: RESULTADOS Y DISCUSIÓN

### 3.1 Estimación de la volatilidad del 1 H- benzotriazol

#### 3.1.1 Constante de la Ley de Henry

Mediante la base de datos PHYSPROP, se exportaron las propiedades fisicoquímicas del 1 H benzotriazol, y se comenzó a correr los programas. Sin embargo, la base de datos no provee el valor de la constante de la ley de Henry y el de la presión de vapor. Como usuario, existe la opción de introducir el valor de la constante de la Ley de Henry, así como de los demás parámetros que aparecen en la pantalla de inicio, no obstante, la suite tiene un programa que brinda esa información. (Figura 28).

Figura 28. Datos faltantes

The screenshot shows the EPI Suite - Welcome Screen interface. The main window contains the following data and controls:

- Menu Bar:** File, Edit, Functions, Batch Mode, Show Structure, Output, Fugacity, STP, Help.
- Header:** EPI Suite - Welcome Screen.
- Navigation:** PhysProp, Previous, Get User, Save User, Search CAS, Calculate, Clear Input Fields.
- Input Fields:**
  - Input CAS #: 000095-14-7
  - Input Smiles: c1ccc2nnnc2c1
  - Input Chem Name: 1H-BENZOTRIAZOLE
- Results:**
  - Henry LC: 100 atm-m<sup>3</sup>/mole
  - Water Solubility: 1.98E+004 mg/L
  - Vapor Pressure: mm Hg
  - Log Kow: 1.44
- Chemical Structure:** 1H-benzotriazole (SMILES: c1ccc2nnnc2c1).
- Other Fields:** Melting Point: 100 Celsius; Boiling Point: 350 Celsius; Molecular Weight: 119.13; Mol. For: C6 H5 N3.

Nota. Fuente: Environmental Protection Agency (2021). *EPI Suite-Welcome Screen*

La interfaz ejecutó el programa HENRYWIN para calcular la constante de la Ley de Henry. Como se muestra en la Tabla 27 de resultados, la constante fue obtenida de dos formas: la primera, mediante el “método de bono o de valores de contribución de enlace” ya que se presentó como una estimación completa, a comparación del “método de contribución de grupo” definida por el programa como un método

incompleto por la carencia de fragmentos; y la segunda, por medio de la relación VP/WSol (presión de vapor y solubilidad del agua).

**Tabla 27. Constante de la Ley de Henry a 25 °C mediante diferentes métodos**

Método	Constante de la Ley de Henry [atm*m <sup>3</sup> /mol]	Constante de la Ley de Henry [pa*m <sup>3</sup> /mol]
Ingresado por el usuario	No ingresado	No ingresado
Método de bonos	1.47x10 <sup>-7</sup>	1.49x10 <sup>-2</sup>
Método de grupos	Incompleto	Incompleto
Estimación de la relación VP/WSol	1.947x10 <sup>-10</sup>	1.973x10 <sup>-5</sup>

*Nota.* Fuente: Environmental Protection Agency (2021). *All results- HENRYWIN Program Results*

\*Donde: VP: 2.46x10<sup>-5</sup> mmHg obtenido de MPBPVP; Wsol: 1.98x10<sup>4</sup> mg/ L obtenido de PHYSPROP

En relación con el valor de la constante de la Ley de Henry, se puede incluir esta misma a diferentes temperaturas (Tabla 28).

**Tabla 28. Constante de la Ley de Henry a diferentes temperaturas**

Temperatura [°C]	Constante de la Ley de Henry		
	atm*m <sup>3</sup> /mol	Pa*m <sup>3</sup> /mol	Adimensional
0	2.71x10 <sup>-8</sup>	0.00275	1.21x10 <sup>-6</sup>
5	3.89x10 <sup>-8</sup>	0.00395	1.71x10 <sup>-6</sup>
10	5.52x10 <sup>-8</sup>	0.00559	2.38x10 <sup>-6</sup>
15	7.73x10 <sup>-8</sup>	0.00784	3.27x10 <sup>-6</sup>
20	1.07x10 <sup>-7</sup>	0.0109	4.45x10 <sup>-6</sup>
25	1.47x10 <sup>-7</sup>	0.0149	5.99x10 <sup>-6</sup>
30	1.99x10 <sup>-7</sup>	0.0201	7.99x10 <sup>-6</sup>
35	2.67x10 <sup>-7</sup>	0.027	1.06x10 <sup>-5</sup>
40	3.55x10 <sup>-7</sup>	0.036	1.38x10 <sup>-5</sup>
45	4.68x10 <sup>-7</sup>	0.0474	1.79x10 <sup>-5</sup>
50	6.11x10 <sup>-7</sup>	0.0619	2.3x10 <sup>-5</sup>

*Nota.* Fuente: Environmental Protection Agency (2021). *All results-HENRYWIN*

\*HLC [atm\*m<sup>3</sup>/mol]= exp (2.7114-(5500-T)); la T es en °K

Los datos de la Tabla 28 se obtienen de la base de datos experimental EXPHEN.DB, esta contiene ecuaciones para 297 compuestos.

### 3.1.2 Volatilidad del 1 H - benzotriazol

Los resultados derivados del programa WVOLWIN para calcular la volatilidad del 1 H-benzotriazol fueron los siguientes (Tabla 29.1).

**Tabla 29.1.** *Propiedades fisicoquímicas consideradas para el cálculo de la volatilidad*

Propiedades fisicoquímicas	Valores
Peso molecular [g/mol]	119.13
Solubilidad del agua [ppm]	1.98x10 <sup>4</sup>
Presión de vapor [mm Hg]	-----
Constante de la Ley de Henry [atm*m3/mol]	1.47x10 <sup>-7</sup>

*Nota.* Fuente: Environmental Protection Agency (2021). *All results-Volatilization from water*

**Tabla 29.2.** *Resultados de la volatilidad del 1 H-benzotriazol para un río y lago*

Parámetros	Río	Lago
Profundidad del agua [m]	1	1
Velocidad del viento [m/s]	5	0.5
Velocidad de la corriente [m/s]	1	0.05
Resultados de volatilidad		
Vidas medias [horas]	4348	47,530
Vidas medias [días]	181.2	1980
Vidas medias [años]	0.496	5.422

*Nota.* Fuente: Environmental Protection Agency (2021). *All results-Volatilization from water*

### 3.1.3 Discusión de resultados

De acuerdo con las propiedades fisicoquímicas que presenta el 1 H-benzotriazol (Figura I) y de acuerdo con la Tabla 22 “Criterios para la interpretación de resultados de WVOLWIN”, se puede inferir que por su punto de fusión (igual a 100 °C) y ebullición (igual a 350 °C), el estado físico del 1 H-benzotriazol es sólido; por su presión de vapor (igual a 2.46x10<sup>-5</sup> mm Hg) existe en fase vapor y particulada; y por su solubilidad en el agua (igual a 1.98x10<sup>4</sup> mg/L) se puede identificar de la Tabla 23 que es una sustancia química muy soluble. En lo que concierne a la presión de vapor y la solubilidad, estos pueden indicar el grado de exposición del 1 H-benzotriazol en la salud, de acuerdo con la Environmental Protection Agency (2012) “*al ser una sustancia química que se encuentra en fase vapor*” las vías de exposición potenciales son el contacto dérmico y la inhalación de polvo; y al ser muy soluble en

el agua, la vía de exposición es a través de la ingestión de agua potable y la biota acuática en las aguas superficiales.

En cuanto a la constante de la Ley de Henry (igual a  $1.47 \times 10^{-7}$ ), mediante la Tabla 21, el 1 H-benzotriazol se puede clasificar como una sustancia menos volátil que el agua y a medida que esta se evapora su concentración incrementará; por tanto, el 1 H-benzotriazol tenderá a permanecer disuelto en el medio acuático (Environmental Protection Agency, 2012; Intitution for Environmental and Health, 2004).

Retomando las constantes de la Ley de Henry a diferentes temperaturas (de los 0 a los 50 °C), generadas únicamente de HENRYWIN, podemos observar en la Tabla 28 las siguientes variaciones:

- De 0 a 15 °C el 1 H-benzotriazol es una sustancia no volátil.
- De 20 a 50 °C el 1 H-benzotriazol es menos volátil que el agua.

La temperatura altera ligeramente la constante de la ley de Henry, esto se debe al efecto que ejerce sobre la presión de vapor y, en menor medida, por el efecto de la solubilidad, en adición a esto, Mackey *et al* (1982) explica lo siguiente:

La  $H^{10}$  suele ser una función suave y continua de la temperatura a través del punto de fusión, mientras que la  $P^{s11}$  y la  $C^{s12}$  experimentan cambios abruptos en la pendiente, los gradientes de ambos aumentan en una cantidad correspondiente a la entalpía de fusión. Pero dado que la  $H$  es la relación (o diferencia en logaritmos), no experimenta este cambio abrupto (p.37).

Por otro lado, está la cuestión de las vidas medias de volatilización las cuales tienden a decrecer cuando aumenta la presión de vapor y disminuye la solubilidad del agua (Mackey *et al.*, 1982). Las vidas medias de volatilización del 1 H-benzotriazol no solo dependerán de las propiedades fisicoquímicas que este posea,

---

<sup>10</sup> Constante de la Ley de Henry

<sup>11</sup> Presión de vapor

<sup>12</sup> Solubilidad

sino que también intervienen factores de la naturaleza del compartimento ambiental como: la intensidad de la luz, la concentración de radicales hidroxilo y la naturaleza de la comunidad microbiana, así como la temperatura (Donald Mackay et al., 2006).

Como se observa en la Tabla 29.2, las vidas medias de volatilización del 1 H-benzotriazol en un lago son mucho más lentas que en un río.

Para un río hay que tomar en cuenta que, al pasar de la mayor parte del agua a la atmósfera, el contaminante experimentará tres procesos de difusión: la primera, la difusión desde la mayor parte del río hasta la interfaz; la segunda, la difusión a través del líquido cercano a la superficie hasta la interfaz; y la tercera, la difusión a través de la atmósfera en la capa cercana a la superficie del agua. De acuerdo con la constante de la ley de Henry del 1 H-benzotriazol, este compuesto se volatilizará lentamente a una velocidad que dependerá de dicha constante y será controlada por la difusión en la fase gaseosa (Mackey et al., 1982). Así mismo, la velocidad del viento es un factor influyente en las tasas de volatilización, puesto que las interacciones que este tenga con la superficie del agua originarán turbulencias que, a su vez dan como resultado la formación de olas y corrientes superficiales; el alcance del efecto que tiene el viento dependerá de su dirección en relación con la dirección y ancho del río (Mattingly, Downing & Truesdale, p. 180-181, citado por Mackey et al 1982).

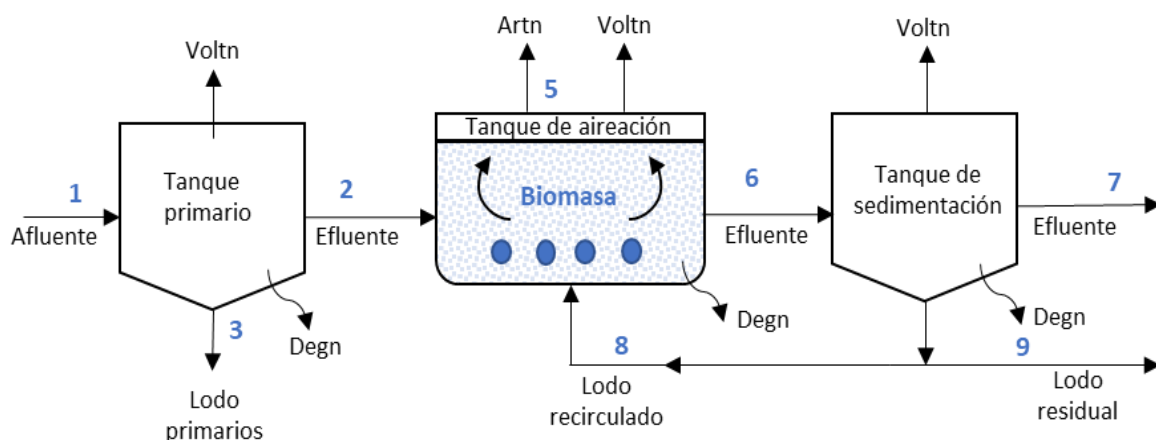
Dentro de este orden de ideas, para el cálculo de la tasa de volatilización de un lago, autores como Mackey *et al* (1982) asumen que el volumen de agua para un lago está bien mezclado en una escala de tiempo que es corta en comparación con la línea de volatilización, y que la resistencia a la volatilización se encuentra en la región interfacial; aunado a esto, ellos plantean que en tramos cortos cuando el viento está acelerado, en las capas de la superficie del agua, hay mayores coeficientes de arrastre y velocidades de fricción, mayor turbulencia y, por lo tanto, una transferencia de masa más rápida. Sin embargo, como se puede identificar en la Tabla 29.2 la velocidad del viento y de la corriente en el lago, son muy bajas y, por ende, retomando el planteamiento de Mackey y sus colaboradores la

transferencia de masa será mucho menos rápida, es por esa razón que el 1 H-benzotriazol podría tardar hasta cinco años en reducir medianamente su concentración.

## 3.2 Cálculo del porcentaje de remoción y biodegradación del 1 H-benzotriazol en una planta de tratamiento de agua residual biológica

*STPWIN* es un modelo de detección basado en una planta convencional de tratamiento de agua residual biológica, por tanto, la Figura 29 ilustra el proceso de transporte del afluente y el destino del efluente.

**Figura 29.** Esquema del transporte y destino en una planta de tratamiento de agua residual de lodos activados



*Nota.* Fuente: Modificado de: Seth, R., Webster, E., & Mackay, D. (2008). *Continued development of a mass balance model of chemical fate in a sewage treatment plant.* *Water Research*, 42(3), 595–604.

\*Voltn: Volatilización; Artn: Pérdida de aireación; y Degn: Degradación

Según Seth *et al* (2008), los tres procesos por los que un contaminante puede ser removido durante su paso por la planta de tratamiento de agua residual son: por la sorción de sólidos suspendidos, principalmente en el sedimentador primario; por aireación, algunas sustancias químicas tienden a volatilizarse a la atmósfera; y finalmente por el proceso dominante en las plantas de tratamiento de tipo biológico, la biodegradación, llevada a cabo en los tanques de aireación.

### 3.2.1 Biodegradación del 1 H-benzotriazol

Retomando lo anterior, la biodegradación es el proceso de transformación dominante en una planta de tratamiento de agua residual con lodos activados.

El programa BIOWIN proporcionó las tasas de biodegradación del 1 H-benzotriazol (Tabla 30) a partir de los modelos *BIOWIN 3* y *BIOWIN5*:

**Tabla 30. Resultados de BIOWIN para el 1 H- benzotriazol**

Modelo de BIOWIN	Tasa de biodegradación
3	2.9359
5	0.3681

*Nota.* Fuente: Environmental Protection Agency (2021). *All results- BIOWIN Program Results*

De acuerdo con la Tabla 30 de la sección “Criterios para la interpretación de resultados de STPWIN” el modelo BIOWIN 3 indica que el 1 H-benzotriazol tardará semanas en biodegradarse, por su parte el modelo BIOWIN 5 indica que el 1 H-benzotriazol es una sustancia química cuya probabilidad de biodegradación es lenta. Esta información, como lo menciona la EPA (2012) permite conocer la posible persistencia de la sustancia química de estudios en los diferentes compartimentos ambientales, así como la posible eliminación en las PTAR.

### 3.2.2 Porcentaje de remoción y biodegradación del 1 H-benzotriazol en una PTAR

Para establecer los balances de agua, aire, biomasa, y del 1 H-benzotriazol, así como el transporte y destino de este último, el programa STPWIN considera las siguientes propiedades fisicoquímicas:

**Tabla 31. Propiedades fisicoquímicas consideradas para el cálculo de remoción y biodegradación en una PTAR biológica**

Propiedades fisicoquímicas	Valores
Peso molecular [g/mol]	119.13
Solubilidad del agua [ppm]	1.98x10 <sup>4</sup>
Presión de vapor [mm Hg]	-----
Constante de la Ley de Henry [atm*m3/mol]	1.47x10 <sup>-7</sup>
Coefficiente de partición aire-agua	6.01186x10 <sup>-6</sup>
Coefficiente de partición octanol-agua	1.44
Coefficiente de partición biomasa-agua	6.30846
Temperatura [°C]	25

*Nota.* Fuente: Environmental Protection Agency (2021). *All results- STP Fugacity Model: Predicted Fate in a Wastewater Treatment Facility*

Citando el apartado metodológico “Desarrollo experimental para la determinación del porcentaje de remoción y biodegradación del 1 H-benzotriazol en una planta de tratamiento de agua residual biológica” se eligieron las opciones A y B, he aquí sus respectivos resultados:

**A. Usar 10,000 horas para para el clarificador primario, el recipiente de aireación y el tanque de sedimentación.**

**Tabla 32.1. Condiciones del sistema de tratamiento: Método predeterminado por EPI Suite**

Contenedor	h-1 <sup>a</sup>	t1/2 <sup>b</sup>	Lodos activados
Tanque primario	0.01	124.60	10000
Tanque de aireación	0.01	124.60	10000
Tanque de sedimentación	0.01	124.60	10000

*Nota.* Fuente: Environmental Protection Agency (2021). *All results- STP Fugacity Model: Predicted Fate in a Wastewater Treatment Facility*

<sup>a</sup> Constantes de tasa de biodegradación

<sup>b</sup> Vidas medias en biomasa

**Tabla 32.2. Balance de masa de la PTAR biológica: Método predeterminado por EPI Suite**

	g/h	mol/h	Porcentaje
Influente	1.00x10 <sup>1</sup>	8.4x10 <sup>-2</sup>	100
Lodos primarios	3.15x10 <sup>-2</sup>	2.6x10 <sup>-4</sup>	0.32
Lodos residuales	1.55x10 <sup>-1</sup>	1.3x10 <sup>-3</sup>	1.55
Volatilización primaria	8x10 <sup>-5</sup>	6.7x10 <sup>-7</sup>	0
Volatilización de sedimentación	2.18x10 <sup>-4</sup>	1.8x10 <sup>-6</sup>	0
Aireación de gas	5.37 x10 <sup>-4</sup>	4.5x10 <sup>-6</sup>	0.01
Biodegradación primaria	1.78x10 <sup>-3</sup>	1.5x10 <sup>-5</sup>	0.02
Biodegradación en la sedimentación	5.32x10 <sup>-4</sup>	4.5x10 <sup>-6</sup>	0.01
Biodegradación en la aireación	7x10 <sup>-3</sup>	5.9 x10 <sup>-5</sup>	0.07
Efluente final	9.80	8.2 x10 <sup>-2</sup>	98.12
<b>Remoción total</b>	1.96 x10 <sup>1</sup>	1.6x10 <sup>-3</sup>	1.88
<b>Biodegradación total</b>	9.31x10 <sup>-3</sup>	7.8x10 <sup>-5</sup>	1

*Nota.* Fuente: Environmental Protection Agency (2021). *All results- STP Fugacity Model: Predicted Fate in a Wastewater Treatment Facility*

**B. Usar estimaciones basadas en las salidas del programa BIOWIN y un método de la EPA para vidas medias de biodegradación.**

**Tabla 33.1. Condiciones del sistema de tratamiento: Método EPA draft-BIOWIN**

Contenedor	h-1 <sup>a</sup>	t1/2 <sup>b</sup>	Lodos activados
Tanque primario	1.85	0.37	30
Tanque de aireación	18.54	0.04	3
Tanque de sedimentación	18.54	0.04	3

Nota. Fuente: Environmental Protection Agency (2021). *All results- STP Fugacity Model: Predicted Fate in a Wastewater Treatment Facility*

<sup>a</sup> Constantes de tasa de biodegradación

<sup>b</sup> Vidas medias en biomasa

**Tabla 33.2. Balance de masa de la PTAR biológica: Método EPA draft-BIOWIN**

	g/h	mol/h	Porcentaje
Influyente	1.00x10 <sup>1</sup>	8.4x10 <sup>-2</sup>	100
Lodos primarios	2.98x10 <sup>-2</sup>	2.5x10 <sup>-4</sup>	0.30
Lodos residuales	3.90x10 <sup>-2</sup>	3.3x10 <sup>-4</sup>	0.39
Volatilización primaria	7.55x10 <sup>-5</sup>	6.3x10 <sup>-7</sup>	0
Volatilización de sedimentación	5.49x10 <sup>-5</sup>	4.6x10 <sup>-7</sup>	0
Aireación de gas	1.49x10 <sup>-4</sup>	1.2x10 <sup>-6</sup>	0
Biodegradación primaria	5.59x10 <sup>-1</sup>	4.7x10 <sup>-3</sup>	5.59
Biodegradación en la sedimentación	4.47x10 <sup>-1</sup>	3.7x10 <sup>-3</sup>	4.47
Biodegradación en la aireación	6.45	5.4x10 <sup>-2</sup>	64.54
Efluente final	2.47	2.1x10 <sup>-2</sup>	24.71
<b>Remoción total</b>	<b>7.53</b>	<b>6.3x10<sup>-2</sup></b>	<b>75.29</b>
<b>Biodegradación total</b>	<b>7.46</b>	<b>6.3x10<sup>-2</sup></b>	<b>74.60</b>

Nota. Fuente: Environmental Protection Agency (2021). *All results- STP Fugacity Model: Predicted Fate in a Wastewater Treatment Facility*

### 3.2.3 Discusión de resultados

Se consideró correr las opciones A y B para contar con dos panoramas: el primero, en caso de que el 1 H- benzotriazol no se biodegradara y el segundo, la biodegradación y remoción del 1 H- benzotriazol conforme a su paso por el tren de tratamiento biológico con todas las condiciones que establece STPWIN. En cuanto a los balances que se muestran en las Tablas 4.2 y 5.2, estos se establecieron por el programa en función de lo que plantea Clark *et al* (1995):

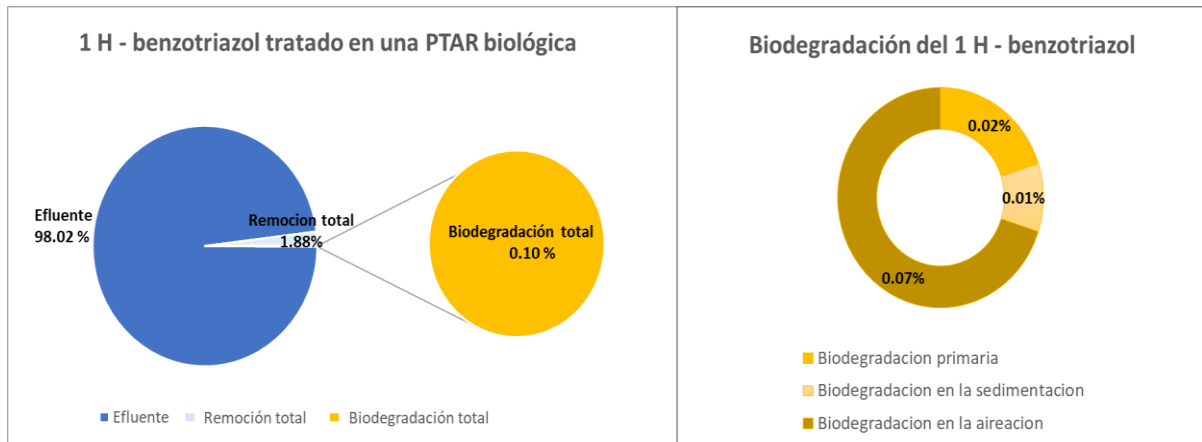
Para facilitar el cálculo, se supone que existe un reparto de equilibrio para el producto químico entre la fase de agua y de biomasa en cada tanque. Se cree que esta suposición es razonable, ya que, para la mayoría de los productos químicos, el equilibrio se acerca sustancialmente durante el tiempo

de residencia del tratamiento. En el tanque de aireación, se supone que la corriente de aire de los gases de escape alcanza el equilibrio con la fase acuosa. Esta suposición de equilibrio se usa ampliamente en modelos predictivos para el destino químico en STP<sup>13</sup>, pero se pueden usar otras expresiones de "aproximación parcial al equilibrio" más rigurosas (p. 1490).

Dentro de los balances de ambos casos (opción A y B), no hay pérdida del 1 H-benzotriazol por volatilización puesto que es una sustancia muy poco volátil por lo que tenderá a permanecer en el agua residual.

En lo que respecta a la remoción y biodegradación total, como se muestra en la Figura 30.1, por el "Método predeterminado" solo se elimina un 1.88 % del afluente que ingresa a la PTAR y de este porcentaje el 0.1 % corresponde a la biodegradación que se lleva a cabo, que es casi nula, presentándose el peor de los casos y resultando una descarga del 98.02% del efluente no tratado hacia las aguas superficiales.

**Figura 30.1.** Remoción y biodegradación del 1 H-benzotriazol en una PTAR biológica: Método predeterminado



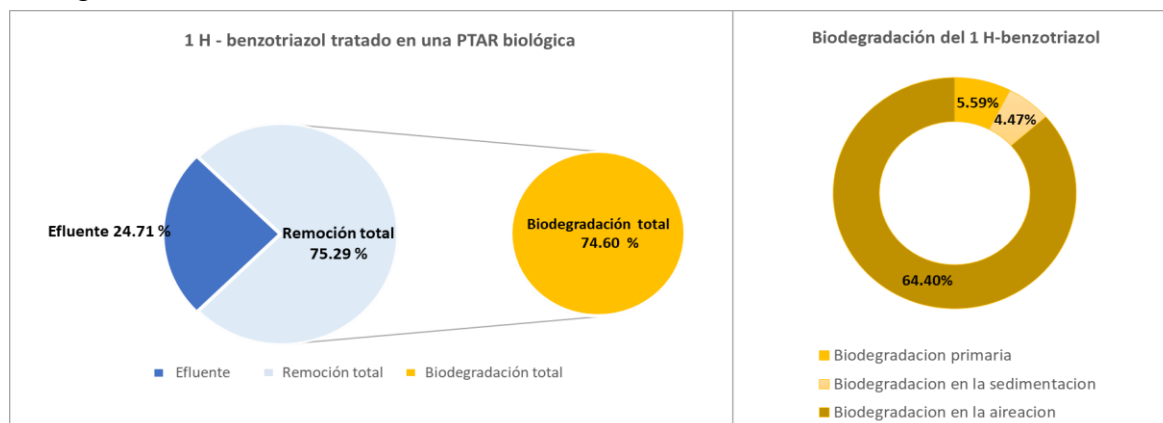
Nota. Fuente: Elaboración propia

En comparación con lo anterior, el Método EPA draft-BIOWIN presenta mejores resultados, ya que la biodegradación domina fuertemente el proceso de remoción del 1 H-benzotriazol, en donde se alcanza una remoción y biodegradación total del

<sup>13</sup> Sewage Treatment Plant

75.29 % y 74.60 % respectivamente, dejando el 24.71 % de la concentración del 1 H - benzotriazol en el efluente (Figura 30.2).

**Figura 30.2.** Remoción y biodegradación del 1 H-benzotriazol en una PTAR biológica: Método EPA-draft-BIOWIN



*Nota.* Fuente: Elaboración propia

Comparando los resultados obtenidos en ambos métodos con respecto a datos reales (Tabla 34), es posible observar que el porcentaje de remoción del 1 H-benzotriazol calculado por el “Método EPA draft-BIOWIN” es el más aproximado, por tanto, STPWIN es una herramienta muy útil que predice el transporte y destino de cualquier sustancia química en una PTAR.

**Tabla 34.** Comparación de los porcentajes reales de remoción en una PTAR biológica vs porcentajes de STPWIN

Fuente	% de remoción real	% de remoción Método EPA predeterminado	% de remoción Método EPA draft-BIOWIN
Weiss et al., 2006	5-60		
Asimakopoulos et al., 2013	20-70		
Herzog et al., 2014	60	1.96	75.29
Mazioti et al., 2015	43-76		

*Nota.* Fuente: Elaboración propia

Considerando los resultados expuestos por el programa STPWIN, así como de los datos experimentales relacionados con la remoción del 1 H-benzotriazol, es notorio que el tratamiento convencional de estos es ineficaz ya que permanecen disueltos en los efluentes, por tal motivo es necesario aplicar tecnologías de remoción avanzadas que garanticen la eliminación total de este tipo de contaminantes emergentes.

### 3.3 Estimación de la fugacidad del 1 H – benzotriazol

El programa LEVIII EPI permite conocer el perfil de comportamiento ambiental de diversas sustancias químicas, entre ellas, el 1 H – benzotriazol. Sin embargo, para obtener mejores resultados LEVIII EPI sugiere determinar el modelo evaluativo apropiado para cada sustancia en función de sus propiedades fisicoquímicas (Tabla 35) (EPA, 2021).

**Tabla 35.** *Propiedades fisicoquímicas consideradas para el cálculo de fugacidad*

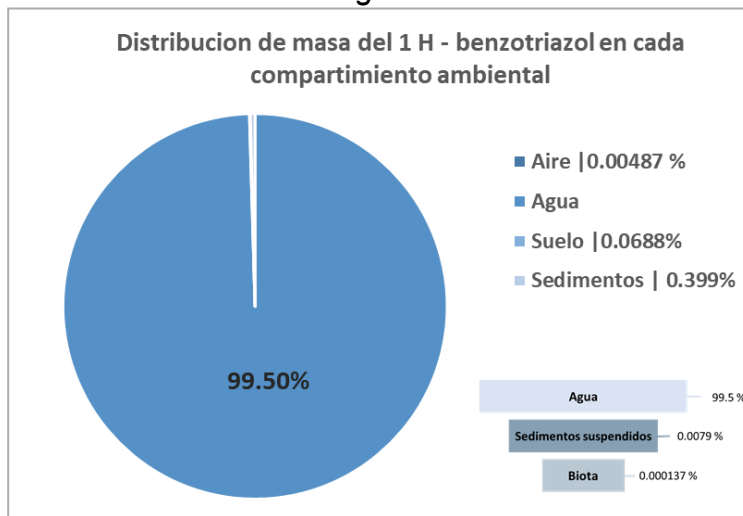
Propiedades fisicoquímicas	Valores	Obtenido de
Peso molecular [g/mol]	119.13	
Constante de la Ley de Henry [atm*m <sup>3</sup> /mol]	1.47x10 <sup>-7</sup>	
Presión de vapor [mm Hg]	2.46x10 <sup>-5</sup>	Mpbpwin program
Presión de vapor líquida [mm Hg]	0.000136	Super enfriado
Punto de fusión °C	100	Physprop
Log kow	1.44	Physprop
Suelo koc	52.9	KOCWIN Método MCI
Log koc	1.72	KOCWIN Método MCI
Temperatura [°C]	25	

*Nota.* Fuente: Environmental Protection Agency (2021). *Level III Fugacity Model (Full-Output): MCI Method*

Las propiedades fisicoquímicas de la Tabla 35, son las que se utilizan como parte complementaria de los cálculos de fugacidad y permiten elucidar el modelo evaluativo del 1 H-benzotriazol, el agua. En adición, Mackay & Paterson (1981) mencionan que dichos modelos proporcionan información sobre el proceder de la sustancia, es decir, su distribución en cada compartimiento ambiental, procesos de transporte, la persistencia, así como las reacciones dominantes.

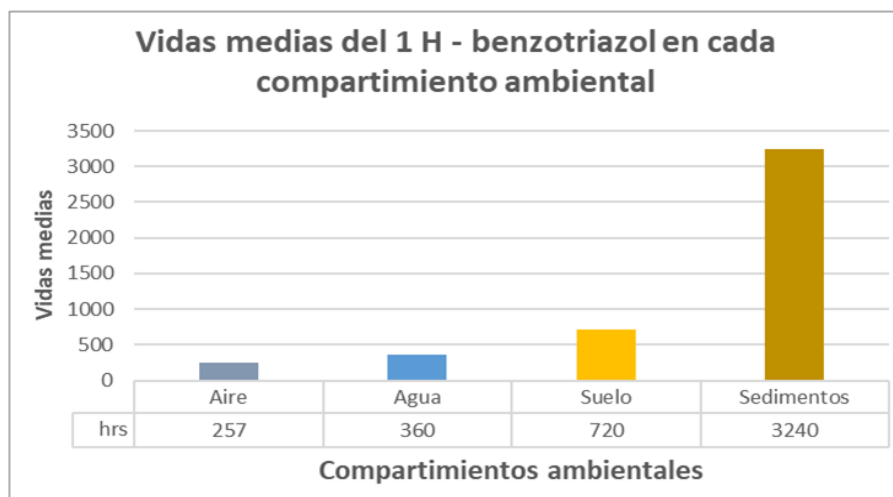
El agua, al ser el escenario principal de emisión del 1 H – benzotriazol supone una descarga total de 1000 kg/hrs, y 0 kg/hr para el aire, suelo y sedimentos. La Figura 31 expone la distribución porcentual de masa para cada compartimiento ambiental y la Figura 32 sus vidas medias.

**Figura 31.** Perfil de distribución del 1 H – benzotriazol en los compartimientos ambientales. Escenario de emisión: Agua



Nota. Fuente: Elaboración propia, con resultados tomados de: Environmental Protection Agency (2021). *All results-Level III Fugacity model: (MCI Method)*

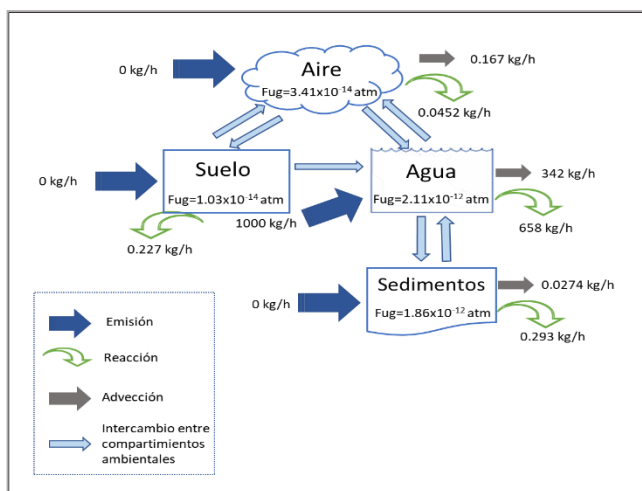
**Figura 32.** Vidas medias del 1 H – benzotriazol en cada compartimiento ambiental



Nota. Fuente: Elaboración propia, con resultados tomados de: Environmental Protection Agency (2021). *All results-Level III Fugacity model: (MCI Method)*

Desde la perspectiva más general, la Figura 33 ilustra la partición del 1 H – benzotriazol en el aire, agua, suelo y sedimentos.

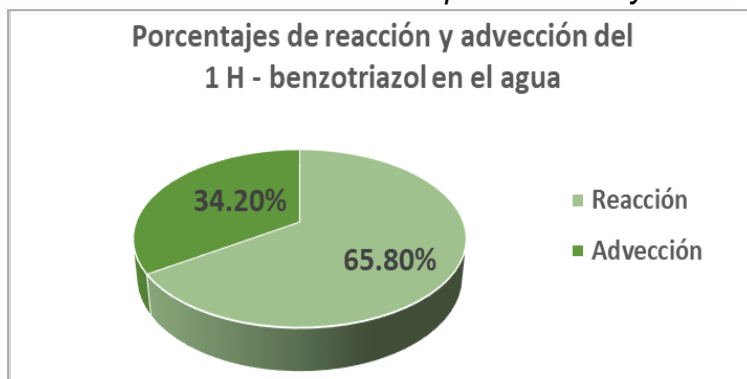
**Figura 33.** Partición del 1 H – benzotriazol en los compartimientos ambientales. Entorno evaluativo: Agua



*Nota.* Fuente: Elaboración propia, con resultados tomados de: Environmental Protection Agency (2021). *All results-Level III Fugacity model: (MCI Method)*

Para obtener una mejor comprensión sobre la dinámica ambiental del 1 H – benzotriazol, LEVIII EPI presenta la pérdida de dicha sustancia por procesos de reacción y advección (Figura 34).

**Figura 34.** Pérdidas del 1 H – benzotriazol por reacción y advección en el agua



*Nota.* Fuente: Elaboración propia, con resultados tomados de: Environmental Protection Agency (2021). *All results-Level III Fugacity model: (MCI Method)*

### 3.3.1 Discusión de resultados

El 1 H – benzotriazol es mayormente detectado en el medio acuático debido a su carácter fisicoquímico, de hecho, al ser una sustancia orgánica con coeficientes de partición octanol-agua ( $\log k_{ow}=1.44$ ) y adsorción del suelo ( $\log k_{oc}= 1.72$ ) muy bajos, se considera, de acuerdo con los “*Criterios para la interpretación de*

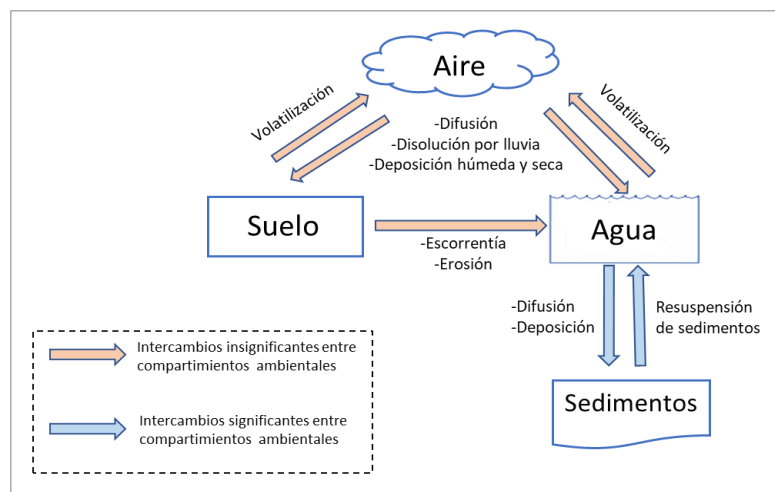
*resultados de LEVIII EPI*” como una sustancia hidrofílica con menor tendencia a adsorberse en el suelo y a bioconcentrarse. Para este caso, en donde el escenario de emisión es el agua, la distribución del 1 H - benzotriazol será casi del 100 % y en mucho menor proporción en el aire, suelo, sedimentos y en los subcompartimentos del agua (biota y sedimentos suspendidos) (Figura 31).

En atención del reparto de masa en los compartimientos ambientales, el programa asigna vidas medias para cada uno de ellos. Acorde la Figura 32, el aire es el compartimiento que posee vidas medias más cortas en virtud del ataque de radicales hidroxilos; seguidamente el agua, en donde la degradación del 1 H - benzotriazol ocurre en condiciones aerobias; y finalmente, en el suelo y los sedimentos EPI Suite utiliza un *factor de escala 1:2:9* para las tasas de degradación finales, es decir, en el suelo las vidas medias serán el doble de las de la columna de agua y similarmente en lo sedimentos el nóuple de las de la columna de agua (EPA, 2021). En cuestión de estas circunstancias y comparando los cuatro compartimientos ambientales, el 1 H – benzotriazol tardará más tiempo en degradarse en los sedimentos debido a que las velocidades de reacción son más lentas en condiciones anaerobias (EPA, 2021; Mackay et al., 2001).

Por otro lado, la Figura 33 compila esquemáticamente el modelo MCI de fugacidad del 1 H – benzotriazol; este modelo se eligió puesto que proporciona estimaciones más exactas, además LEVIII EPI recomienda usarlo solo sí el valor del coeficiente de partición octanol agua es menor a 7. Cabe mencionar que el programa se basa en un sistema en estado estacionario, por lo que la tasa total de entrada del 1 H – benzotriazol es igual a la tasa total de salida como se muestra en la Figura 33, particularmente en el agua ( Mackay et al., 2001). Así mismo, el modelo supone que no existe un equilibrio común entre las fases y, por tanto, sí el 1 H – benzotriazol se emite en el agua este puede repartirse en los demás compartimientos.

En cuanto al intercambio del 1 H – benzotriazol entre el agua, aire, suelo y sedimentos, la Figura 35 describe los principales procesos de transporte.

**Figura 35.** Intercambio del 1 H – benzotriazol entre compartimientos ambientales y sus procesos de transporte



Nota. Fuente. Elaboración propia

Conforme a la figura anterior es posible observar que la interfaz agua-aire experimenta escasamente un intercambio como consecuencia de la baja volatilidad del 1 H – benzotriazol, sin embargo, no se descarta su entrada por la interfaz aire-agua ya que es una sustancia que existe en fase vapor y particulada; la interfaz aire-suelo sugiere la transferencia del 1 H – benzotriazol por difusión, precipitación y deposición, no obstante, el 1 H – benzotriazol es poco probable que se absorba en el suelo y por tanto el intercambio suelo-agua es casi insignificante. Por lo contrario, en las interfaces agua-sedimentos y sedimentos-agua hay una mayor interacción, además los procesos de transferencia que se llevan a cabo dilucidan la movilidad del 1 H – benzotriazol a través de la columna de agua.

Respecto a la Figura 34, las pérdidas del 1 H – benzotriazol son mucho mayores a comparación de las pérdidas por advección. Las reacciones de degradación del 1 H – benzotriazol en el agua pueden ser por fotólisis, hidrólisis, óxido-reducción y biodegradación.

## CONCLUSION

Gracias a los modelos WVOLWIN, STPWIN y LEV3EPI de EPI Suite v.4.11 fue posible conocer el riesgo ambiental del 1 H – benzotriazol provocado por su vertido en cuerpos de agua. Con los resultados obtenidos se concluye que:

- i. El 1 H - benzotriazol es una sustancia poco volátil, hidrofílica y muy soluble en agua, por tanto, permanecerá disuelto en ella, sobre todo en lagos donde la velocidad del viento y la corriente son muy bajas. Por su parte, los ríos experimentan una mayor corriente de arrastre lo que podría facilitar el transporte del 1 H – benzotriazol hacia otros cuerpos de agua.
- ii. El porcentaje de remoción del 1 H – benzotriazol en una PTAR biológica, según STPWIN, es del 75.29 %. La biodegradación aerobia fue el proceso dominante de descomposición, sin embargo, la remoción sigue siendo parcial por lo que podrían aplicarse tecnologías de oxidación avanzada que garanticen la eliminación total de este tipo de contaminantes emergentes.
- iii. Dado que el escenario de emisión es el agua y por las propiedades fisicoquímicas del 1 H – benzotriazol, este podría repartirse mayormente en ella. El transporte de masa principal se da entre el agua y los sedimentos. Las pérdidas del 1 H – benzotriazol por reacción son más que por las de advección, por lo que podrían generarse subproductos en los procesos reactivos.
- iv. Datos como las propiedades fisicoquímicas y porcentajes de remoción son similares a los reportados en diferentes literaturas.

De acuerdo con los resultados arrojados por los modelos de EPI Suite v.4.11, se concluye que el 1 H – benzotriazol es una sustancia persistente, estable, resistente a los procesos de degradación y potencialmente tóxica. Este al ser vertido en cuerpos de agua puede transportarse hacia otros compartimentos ambientales, lo que origina efectos adversos sobre la salud humana, animal, vegetal y paulatinamente la degradación del ambiente, pérdida de la biodiversidad, los ecosistemas y la alteración de la calidad del agua, aire y el suelo.

## BIBLIOGRAFIAS

- Acciona. (2020). Tratamiento de aguas residuales. Acciona. Disponible en: <https://www.acciona.com/es/tratamiento-de-agua/depuracion/>
- Asimakopoulou, A. G., Ajibola, A., Kannan, K., & Thomaidis, N. S. (2013). Occurrence and removal efficiencies of benzotriazoles and benzothiazoles in a wastewater treatment plant in Greece. *Science of the Total Environment*, 452–453, 163–171. <https://doi.org/10.1016/j.scitotenv.2013.02.041>
- Bajaj, K., & Sakhuka, R. (2016). Benzotriazoles: Much more than just synthetic heterocyclic chemistry. *Top Heterocycl Chem*, 43(01), 235–284. <https://doi.org/10.1007/7081>
- Barceló, D., & López, M. (n.d.). Contaminación y calidad química del agua: el problema de los contaminantes emergentes. *Fundación Nueva Cultura Del Agua*. <https://doi.org/10.1097/ICB.0b013e3181ad3957>
- Barceló, D., Sabater, S., Guasch, H., Moreno, R., Romaní, A., & Muñoz, I. (2008). Aguas continentales. Gestión de recursos hídricos, tratamiento y calidad del agua. In *Aguas continentales: gestión de recursos hídricos, tratamiento y calidad del agua*. CSIC. [http://s9c21adfc2988c5cf.jimcontent.com/download/version/1445896795/module/7866296786/name/aguas continentales csic.book\\_109\\_com.pdf](http://s9c21adfc2988c5cf.jimcontent.com/download/version/1445896795/module/7866296786/name/aguas%20continentales%20csic.book_109_com.pdf)
- Baz, L. (2019). *Contaminantes emergentes. Impacto sobre la salud y el medio ambiente*. Universidad Complutense.
- Beltoft, V., Nielsen, E., & Ladefoged, O. (2013). Benzotriazole and Tolyltriazole. Evaluation of health hazards and proposal of health based quality criteria for soil and drinking water. *Environmental Project No. 1526, Environ. Proj. No. 1526*, 1. <https://www2.mst.dk/Udgiv/publications/2013/12/978-87-93026-81-0.pdf>
- Calderon, C. (2010). *Serie autodidactica de medicion de la calidad del agua*. [http://www.conagua.gob.mx/CONAGUA07/Noticias/Sistemas\\_secundarios.pdf](http://www.conagua.gob.mx/CONAGUA07/Noticias/Sistemas_secundarios.pdf)
- Calvo, F., García, J. I., & Dobado, J. A. (2018). Emerging Pollutants: Origin, Structure and properties. In *Handbook of Environmental Analysis* (1era ed.). WILEY-VCH. <https://doi.org/10.1201/b10505-26>
- Cantwell, M. G., Sullivan, J. C., & Burgess, R. M. (2015). Benzotriazoles: History, Environmental Distribution, and Potential Ecological Effects. In *Comprehensive Analytical Chemistry* (Vol. 67). Elsevier. <https://doi.org/10.1016/B978-0-444-63299-9.00016-8>
- Card, M., Gomez, V., Lee, W. H., Lynch, D., Orentas, N. S., Lee, M. T., Wong, E. M., & Boethling, R. S. (2017). History of EPI Suite™ and future perspectives on chemical property estimation in US Toxic Substances Control Act new chemical

- risk assessments. *Environmental Science. Processes & Impacts*, 19(3), 203–212. <https://doi.org/10.1039/c7em00064b>
- Cárdenas, L. F., & Piero, C. (2009). *Modelización de la estructura-toxicidad de diversos pesticidas utilizando métodos QSAR*. 947–953.
- Careghini, A., Mastorgio, A. F., Saponaro, S., & Sezenna, E. (2015). Bisphenol A, nonylphenols, benzophenones, and benzotriazoles in soils, groundwater, surface water, sediments, and food: a review. *Environmental Science and Pollution Research*, 22(8), 5711–5741. <https://doi.org/10.1007/s11356-014-3974-5>
- Carmona, I. (2008). Desarrollo y validación de un método de extracción en fase sólida para la determinación de plaguicidas cationicos (cuats) en alimentos. In *Universidad Autónoma de Nuevo León* (Issue 81). Universidad Autónoma de Nuevo León.
- Caviedes, D., Delgado, D., & Olaya, A. (2017). Environmental normativity to regulate the presence of residual pharmaceutical products in aquatic environments. *Revista Jurídica Piélagus*, 16(1), 121–130.
- Chiaia, A. C., Ashauer, R., Moest, M., Hollingshaus, T., Jeon, J., Spaak, P., & Hollender, J. (2013). Bioconcentration of organic contaminants in *Daphnia* resting eggs. *Environmental Science and Technology*, 47(18), 10667–10675. <https://doi.org/10.1021/es401763d>
- Clark, B., Henry, J. ., & Mackay, D. (1995). Fugacity analysis and model of organic chemical fate in a sewage treatment plant. *Environmental Science & Technology*, 29(6), 1488–1494.
- Comisión Nacional del Agua. (2015). Monitoreo de calidad del agua. CONAGUA. Disponible en: [http://www.conagua.gob.mx/CONAGUA07/Contenido/Documentos/TF\\_CalidaddelAgua/CalidaddelAgua.pdf](http://www.conagua.gob.mx/CONAGUA07/Contenido/Documentos/TF_CalidaddelAgua/CalidaddelAgua.pdf)
- Comisión Nacional del Agua. (2018). Estadísticas del agua en México 2018. CONAGUA. Disponible en: [http://sina.conagua.gob.mx/publicaciones/EAM\\_2018.pdf](http://sina.conagua.gob.mx/publicaciones/EAM_2018.pdf)
- Cortés, J. E., Martín, A., Calderón, C. G., & Palacios, L. (2010). *Remoción de contaminantes emergentes de importancia ambiental y sanitaria. Segunda etapa. Informe final*.
- Cuenca, M. T. (2019). *Contaminantes emergentes: origen y destino*. Universidad de Alcalá.
- Davis, L., Santodonato, J., Howard, P., & Sexena, J. (1977). *Investigation of selected potential environmental contaminants: Benzotriazoles*.
- De la Vega, M. (2012). *Eficiencia en plantas de tratamiento de aguas residuales*

- (1era ed.). Refugia Centro para la conservación de la ecobiodiversidad A.C.
- Delgado-Ortega, H. S. (2016). *Análisis de la exposición de compuestos emergentes en varios escenarios de usos del agua*. 98.
- Durán, J. C., Prado, B., González, D., Sánchez, Y., & Jiménez, B. (2015). Environmental fate of naproxen, carbamazepine and triclosan in wastewater, surface water and wastewater irrigated soil - Results of laboratory scale experiments. *Science of the Total Environment*, 538, 350–362. <https://doi.org/10.1016/j.scitotenv.2015.08.028>
- Durán, Juan C., Sánchez, Y., Prado, B., & Jiménez, B. (2014). The transport of three emerging pollutants through an agricultural soil irrigated with untreated wastewater. *Journal of Water Reuse and Desalination*, 4(1), 9–17. <https://doi.org/10.2166/wrd.2013.003>
- Durjava, M. K., Kolar, B., Arnus, L., Papa, E., Kovarich, S., Sahlin, U., & Peijnenburg, W. (2013). Experimental assessment of the environmental fate and effects of triazoles and benzotriazole. *ATLA Alternatives to Laboratory Animals*, 41(1), 65–75. <https://doi.org/10.1177/026119291304100108>
- European Commission. (2020): What are endocrine disruptors?. European Commission. Disponible en: [https://ec.europa.eu/environment/chemicals/endocrine/definitions/endodis\\_en.htm](https://ec.europa.eu/environment/chemicals/endocrine/definitions/endodis_en.htm)
- EUR-Lex. (2021). Directive 2000/60/EC of the European Parliament and of the Council of 23 October 2000 establishing a framework for Community action in the field of water policy. EUR-Lex. Disponible en: <https://eur-lex.europa.eu/legal-content/EN/TXT/HTML/?uri=CELEX:32000L0060&from=ES>
- EUR-Lex. (2021). Directive 2008/105/EC of the European Parliament and of the Council of 16 December 2008 on environmental quality standards in the field of water policy, amending and subsequently repealing Council Directives 82/176/EEC, 83/513/EEC, 84/156/EEC, 84/491/EEC, 86/280/EEC and amending Directive 2000/60/EC of the European Parliament and of the Council. EUR-Lex. Disponible en: <https://eur-lex.europa.eu/eli/dir/2008/105/2013-09-13>
- Fondo para la comunicación y la Educación Ambiental A.C (2020): Contaminación en México. Agua.org.mx. Disponible en: <https://agua.org.mx/agua-contaminacion-en-mexico/>
- Geissen, V., Mol, H., Klumpp, E., Umlauf, G., Nadal, M., van der Ploeg, M., van de Zee, S. E. A. T. M., & Ritsema, C. J. (2015). Emerging pollutants in the environment: A challenge for water resource management. *International Soil and Water Conservation Research*, 3(1), 57–65. <https://doi.org/10.1016/j.iswcr.2015.03.002>
- Goode, G., Aguayo, R., & Dominguez, L. (2019). Relaciones cuantitativas

estructura-actividad/propiedad en dos dimensiones empleando el programa R. *Educación Química*, 30(2), 27. <https://doi.org/10.22201/fq.18708404e.2019.2.67211>

Herzog, B., Lemmer, H., Helmreich, B., Horn, H., & Müller, E. (2014). Monitoring benzotriazoles: a 1 year study on concentrations and removal efficiencies in three different wastewater treatment plants. *Water Science and Technology*, 69(4), 710–717. <https://doi.org/10.2166/wst.2013.766>

Herzog, B., Lemmer, H., Huber, B., Horn, H., & Müller, E. (2014). Xenobiotic benzotriazoles-biodegradation under meso- and oligotrophic conditions as well as denitrifying, sulfate-reducing, and anaerobic conditions. *Environmental Science and Pollution Research*, 21(4), 2795–2804. <https://doi.org/10.1007/s11356-013-2199-3>

Instituto Nacional de Ecología y Cambio Climático. (2007). Evaluación de riesgos ambientales de sustancias químicas: Introducción y visión panorámica. SEMARNAT. Disponible en: <http://www2.inecc.gob.mx/publicaciones2/libros/224/eval.html>

Intitution for Environmental and Health. (2004). *A screening method for ranking chemicals by their fate and behaviour in the environment and potential toxic effects in humans following non-occupational exposure* (Issue April).

Kirkham, M. B. (2014). Potential Evapotranspiration. In *Principles of Soil and Plant Water Relations* (pp. 501–514). <https://doi.org/10.1016/b978-0-12-420022-7.00028-8>

Leal, M. T. (2005). Tecnologías convencionales de tratamiento de agua y sus limitaciones. In *Solar Safe water* (pp. 63–72). <http://scholar.google.com/scholar?hl=en&btnG=Search&q=intitle:Tecnolog?as+convencionales+de+tratamiento+de+agua+y+sus+limitaciones#0>

Ley de Aguas Nacionales. Diario Oficial de la Federación, México, 1 de Junio de 2020

Ley Federal de Responsabilidad Ambiental. Art.2. 20 de mayo de 2021 (México)

Li, J., Zhao, H., Zhou, Y., Xu, S., & Cai, Z. (2017). Determination of benzotriazoles and benzothiazoles in human urine by UHPLC-TQMS. *Journal of Chromatography B: Analytical Technologies in the Biomedical and Life Sciences*, 1070, 70–75. <https://doi.org/10.1016/j.jchromb.2017.10.045>

Lozano, J., & Scior, T. (2012). ¿Qué sabe Ud. acerca de...QSAR? *Revista Mexicana de Ciencias Farmacéuticas*, 43(2), 82–84.

LU, J., WANG, M. M., WANG, Q., LI, H. P., & YANG, Z. G. (2018). Determination of Benzotriazole and its derivatives in aqueous sample with air-assisted liquid-liquid microextraction followed by High-performance Liquid Chromatography.

*Chinese Journal of Analytical Chemistry*, 46(4), e1817–e1825.  
[https://doi.org/10.1016/S1872-2040\(17\)61082-X](https://doi.org/10.1016/S1872-2040(17)61082-X)

- Luján, D. (2015). Nuevas tecnologías para el análisis de contaminantes emergentes. *Instituto Universitario Del Agua y Las Ciencias Ambientales.*, 101.
- Mackay, Don, Sharpe, S., Cahill, T., Gouin, T., Cousins, I., & Toose, L. (2001). *Assessing the environmental persistence of a variety of chemical substances including metals.* November, 1–52.  
<http://www.trentu.ca/academic/aminss/envmodel/CEMC200104.pdf>
- Mackay, Donald, & Paterson, S. (1981). Calculating fugacity. *Environmental Science and Technology*, 15(9), 1006–1014. <https://doi.org/10.1021/es00091a001>
- Mackay, Donald, Shiu, W.-Y., Shiu, W.-Y., & Lee, S. C. (2006). Handbook of Physical-Chemical Properties and Environmental Fate for Organic Chemicals. In *Handbook of Physical-Chemical Properties and Environmental Fate for Organic Chemicals: Vol. III.* <https://doi.org/10.1201/9781420044393>
- Mackey, D., Ying-Shiu, W., Bobra, A., Billington, J., Chau, E., Yeun, A., Ng, C., & Szeto, F. (1982). Volatilization of organic pollutants from water. *Environmental Protection Agency, April.*
- Marín, D., Montes de Oca, O., & González, Y. (2017). Evaluación de riesgos químicos en un laboratorio de química analítica por el método Cossh Essentials. *Ciencia En Su PC*, 3, 91–106.
- Mazioti, A. A., Stasinakis, A. S., Pantazi, Y., & Andersen, H. R. (2015). Biodegradation of benzotriazoles and hydroxy-benzothiazole in wastewater by activated sludge and moving bed biofilm reactor systems. *Bioresource Technology*, 192, 627–635. <https://doi.org/10.1016/j.biortech.2015.06.035>
- Mendoza, A., & Ize, I. (2017). Las sustancias químicas en México. Perspectivas para un manejo adecuado. *Revista Internacional de Contaminacion Ambiental*, 33(4), 719–745. <https://doi.org/10.20937/RICA.2017.33.04.15>
- Minella, M., De Laurentiis, E., Pellegrino, F., Prozzi, M., Bello, F. D., Maurino, V., & Minero, C. (2020). Photocatalytic transformations of 1h-benzotriazole and benzotriazole derivatives. *Nanomaterials*, 10(9), 1–15.  
<https://doi.org/10.3390/nano10091835>
- Ministerio para la Transición Ecológica y el Reto Demográfico. (2021). Textos legislativos. Gobierno de España. Disponible en: <https://www.miteco.gob.es/es/agua/temas/planificacion-hidrologica/marco-del-agua/LegislacionDMA.aspx>
- Montalvo, R., Salinas, M., Becerra, E. M., & Barrón, A. (2013). *Química Orgánica: Introducción a la química heterocíclica* (2da ed.). Universidad Autónoma de Nayarit.

- Naciones Unidas. (2021). Convenio de Estocolmo sobre Contaminantes Orgánicos Persistentes. Observatorio del Principio 10 en América Latina y el Caribe. Disponible en: <https://observatoriop10.cepal.org/es/tratados/convenio-estocolmo-contaminantes-organicos-persistentes>
- National Center for Biotechnology Information (2021): 1 H-Benzotriazole. NIH. Disponible en: <https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/compound/1H-Benzotriazole>
- National Institute of Neurological Disorders and Stroke. (2019): Neurotoxicity information page. NIH. Disponible en: <https://www.ninds.nih.gov/Disorders/All-Disorders/Neurotoxicity-Information-Page>
- Nava, L., Gasperín, R., & Durán, A. (2014). Comparación de un reactor de biomasa suspendida y un reactor de biomasa adherida para la biodegradación de compuestos tóxicos presentes en aguas residuales de refinerías de petróleo. *Revista Internacional de Contaminacion Ambiental*, 30(1), 101–112.
- Network of reference laboratories, research centres and related organizations for monitoring of emerging environmental substances (2021): NORMAN List of Emerging Substances. NORMAN Network en: <https://www.normannetwork.com/?q=node%2F81&fbclid=IwAR2FM0ul2FVvk1f9p7XrdzpKBrr9MPAfBI3yiP-IzC84k0rRFuCSIp1rITgQ>
- NOM-001-SEMARNAT-1996. (1996). Norma Oficial Mexicana NOM-001-SEMARNAT-1996, Que establece los límites máximos permisibles de contaminantes en las descargas de aguas residuales en aguas y bienes nacionales
- NOM-002-SEMARNAT-1996. (1996). Norma Oficial Mexicana NOM-002-SEMARNAT-1996, Que establece los límites máximos permisibles de contaminantes en las descargas de aguas residuales a los sistemas de alcantarillado urbano o municipal
- NOM-003-SEMARNAT-1997. (1997). Norma Oficial Mexicana NOM-003-SEMARNAT-1997, Que establece los límites máximos permisibles de contaminantes para las aguas residuales tratadas que se reusen en servicios al público
- NOM-127-SSA1-1994. (1994). Norma Oficial Mexicana NOM-127-SSA1-1994, Salud ambiental, agua para uso y consumo humano-límites permisibles de calidad y tratamientos a que debe someterse el agua para su potabilización.
- Oekotoxzentrum centre ecotox (2021): Proposals for Acute and Chronic Quality Standards. Ecotoxcentre en: <https://www.ecotoxcentre.ch/expert-service/quality-standards/proposals-for-acute-and-chronic-quality-standards/>
- Petrucci, R. H., Herring, F. G., Madura, J. D., & Bissonnette, C. (2011). Química general. In *Química General* (10 ma). Pearson.

- Robert, K., I L, E. R., Marion, J., Christian, G., & Hollender, J. (2011). Assessment of micropollutants from municipal wastewater- combination of exposure and ecotoxicological effect data for Switzerland. *Waste Water - Evaluation and Management*. <https://doi.org/10.5772/16152>
- Robledo, V. H., Velázquez, M. A., Montañez, J. L., Pimentel, J. L., Vallejo, A. A., López, M. D., & Venegas, J. (2017). Hidroquímica y contaminantes emergentes en aguas residuales urbano industriales de Morelia, Michoacán, México. *Revista Internacional de Contaminación Ambiental*, 33(2), 221–235. <https://doi.org/10.20937/RICA.2017.33.02.04>
- Robles, J., García, J., Antonio, M., Rodríguez, A., Aguera, A., Gómez, M. J., Martínez, M. J., Hernando, M. D., Mezcuca, M., Gómez, M., & Herrera, S. (2016). Protocolo de técnicas de muestreo y técnicas analíticas de contaminantes emergentes y prioritarios. *Consolider Tragua*, 34(15\_suppl), 4–65. [https://doi.org/10.1200/jco.2016.34.15\\_suppl.2525](https://doi.org/10.1200/jco.2016.34.15_suppl.2525)
- Rodríguez, E. (2015). *Eliminación de contaminantes emergentes en aguas por métodos físicos y químicos*.
- Romero, A. (2010). Aprovechamiento de la biomasa como fuente de energía alternativa a los combustibles fósiles. *Rev. R.Acad. Exac. Fís. Nat.(Esp)*, 104(2), 331–345. <http://www.rac.es/ficheros/doc/00979.pdf>
- Seeland, A., Oetken, M., Kiss, A., Fries, E., & Oehlmann, J. (2012). Acute and chronic toxicity of benzotriazoles to aquatic organisms. *Environmental Science and Pollution Research*, 19(5), 1781–1790. <https://doi.org/10.1007/s11356-011-0705-z>
- Secretaría de Medio Ambiente y Recursos Naturales. (2015). Convenio de Estocolmo. SEMARNAT. Disponible en: <https://www.gob.mx/semarnat/acciones-y-programas/convenio-de-estocolmo>
- Secretaría de Medio Ambiente y Recursos Naturales. (2018). El Convenio de Estocolmo busca eliminar las sustancias más tóxicas usadas en el mundo. SEMARNAT. Disponible en: <https://www.gob.mx/semarnat/articulos/el-convenio-de-estocolmo-busca-eliminar-las-sustancias-mas-toxicas-usadas-en-el-mundo>
- Secretaría de Medio Ambiente y Recursos Naturales. (2018). Impacto ambiental y tipos de impacto ambiental. SEMARNAT. Disponible en: <https://www.gob.mx/semarnat/acciones-y-programas/impacto-ambiental-y-tipos-de-impacto-ambiental>
- Secretaría de Medio Ambiente y Recursos Naturales. (2020). Indicadores de calidad del agua. SEMARNAT. Disponible en: [http://dgeiawf.semarnat.gob.mx:8080/ibi\\_apps/WFServlet?IBIF\\_ex=D3\\_R\\_AG](http://dgeiawf.semarnat.gob.mx:8080/ibi_apps/WFServlet?IBIF_ex=D3_R_AG)

UA05\_01%26IBIC\_user=dgeia\_mce%26IBIC\_pass=dgeia\_mce

- Servicio Geológico de Estados Unidos. (2021): *Emerging Contaminants*.Usgs.gov. Disponible en: [https://www.usgs.gov/mission-areas/water-resources/science/emerging-contaminants?qt-science\\_center\\_objects=0#qt-science\\_center\\_objects](https://www.usgs.gov/mission-areas/water-resources/science/emerging-contaminants?qt-science_center_objects=0#qt-science_center_objects)
- Seth, R., Webster, E., & Mackay, D. (2008). Continued development of a mass balance model of chemical fate in a sewage treatment plant. *Water Research*, 42(3), 595–604. <https://doi.org/10.1016/j.watres.2007.08.004>
- Solano, A. M. (2005). Capítulo IX Bioensayo de toxicidad por Microtox. *Movilización de Metales Pesados En Residuos y Suelos Industriales Afectados Por La Hidrometalurgia Del Cinc*, 239–255.
- Sosa, Z., Mahugo, C., & Santana, J. J. (2013). Analytical methodologies for the determination of endocrine disrupting compounds in biological and environmental samples. *BioMed Research International y Hindawi*. <https://doi.org/10.1002/bmc.4528>
- Stuart, M., & Lapworth, D. (2013). Emerging organic contaminants in groundwater . *ReseachGate*, 4. <https://doi.org/10.1007/978-3-642-37006-9>
- Tchobanoglous, G., Stensel, H.D., Burton, F., Abu, M & Bowden, G. (2014). *Wastewater engineering: Treatment and resource recovery* (5ta ed). McGraw Hill-Education
- Trizio, D., Basketter, D. A., Botham, P. A., Graepel, P. H., Lambré, C., Magda, S. J., Pal, T. M., Riley, A. J., Ronneberger, H., & Van Sittert, N. J. (1988). Identification of immunotoxic effects of chemicals and assessment of their relevance to man. *Food and chemical toxicology : an international journal published for the British Industrial Biological Research Association*, 26(6), 527–539. [https://doi.org/10.1016/0278-6915\(88\)90006-3](https://doi.org/10.1016/0278-6915(88)90006-3)
- United States Environmental Protection Agency (2012). *Sustainable Futures / P2 Framework Manual 2012 EPA-748-B12-001: Estimating Physical / Chemical and Environmental Fate Properties with EPI Suite™*
- United States Environmental Protection Agency (2012). *Sustainable Futures / P2 Framework Manual 2012 EPA-748-B12-001 Appendix A. Glossary of Useful Terms*
- United States Environmental Protection Agency (2019): *Contaminant Candidate List 1 - CCL 1*. Epa.gov. Disponible en: <https://www.epa.gov/ccl/contaminant-candidate-list-1-ccl-1>
- United States Environmental Protection Agency (2019): *Contaminant Candidate List 2 - CCL 2*. Epa.gov. Disponible en: <https://www.epa.gov/ccl/contaminant-candidate-list-2-ccl-2>

- United States Environmental Protection Agency (2021): *Contaminant Candidate List 3 - CCL 3*. Epa.gov. Disponible en: <https://www.epa.gov/ccl/contaminant-candidate-list-3-ccl-3>
- United States Environmental Protection Agency (2021): *Contaminant Candidate List 4 - CCL 4*. Epa.gov. Disponible en: <https://www.epa.gov/ccl/contaminant-candidate-list-4-ccl-4-0>
- United States Environmental Protection Agency (2019): *Contaminant Candidate List 5 (CCL 5)*. Epa.gov. Disponible en: <https://www.epa.gov/ccl/contaminant-candidate-list-5-ccl-5>
- United States Environmental Protection Agency (2021): *EPI Suite™-Estimation Program Interface*. Epa.gov. Disponible en: <https://www.epa.gov/tsca-screening-tools/epi-suitetm-estimation-program-interface>
- Vargas, M., & Palacios, J. (2017). Propuesta de clasificación de los procesos de oxidación avanzada (POA). *Revista ambiental agua, aire y suelo*, 8(1). <https://doi.org/10.24054/19009178.v1.n1.2017.3274>
- Water Quality Association. (2014). *PPCP & EDC Fact Sheet (Issue Ccl Iii)*. [https://www.wqa.org/Portals/0/Technical/Technical\\_Fact\\_Sheets/2014\\_Ps-PCPs-EDCs.pdf](https://www.wqa.org/Portals/0/Technical/Technical_Fact_Sheets/2014_Ps-PCPs-EDCs.pdf)
- Weiss, S., Jakobs, J., & Thorsten, R. (2006). Discharge of three benzotriazole corrosion inhibitors with municipal wastewater and improvements by membrane bioreactor treatment and ozonation. *Environmental Science and Technology*, 40(23), 7193–7199. <https://doi.org/10.1021/es061434i>
- Wilkinson, J., Hooda, P. S., Barker, J., Barton, S., & Swinden, J. (2017). Occurrence, fate and transformation of emerging contaminants in water: An overarching review of the field. *Environmental Pollution*, 231, 954–970.