



BENEMÉRITA UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE PUEBLA
FACULTAD DE INGENIERÍA QUÍMICA
COLEGIO DE INGENIERÍA AMBIENTAL

ESTIMACIÓN *IN SILICO* DEL DESTINO AMBIENTAL DE
COMPUESTOS DE AMONIO CUATERNARIO USADOS PARA
DESINFECCIÓN CONTRA EL VIRUS SARS-CoV-2

TESIS PROFESIONAL

Para obtener el grado de:
Licenciatura en Ingeniería Ambiental

PRESENTA:
María Teresa Miranda Pérez

DIRECTOR DE TESIS:
M.I. Ángel Silveti Loeza

Puebla, Pue.

Octubre 2022

A mi familia y amigos

AGRADECIMIENTOS:

A la Benemérita Universidad Autónoma de Puebla, por el aprendizaje y valores que me ha brindado, por las oportunidades otorgadas durante mi estancia y por las personas que puso en mi camino.

Al M.I. Ángel Silveti Loeza, por apoyarme no sólo para la realización de este trabajo, si no por su apoyo para mi crecimiento profesional y personal, por compartir sus conocimientos conmigo y por los consejos brindados. Lo considero una persona íntegra, profesional y un buen amigo.

A la M.I.A. Miriam Vega Hernández por su apoyo mediante las observaciones y comentarios a este trabajo, por ser un gran ejemplo a seguir, es una maravillosa docente, con amplio conocimiento, valor y bondad.

A la Dra. Gabriela Pérez Osorio por el conocimiento que me ha compartido para esta investigación y en las asignaturas en las que tuve la oportunidad de ser su estudiante, gracias por su confianza y tiempo brindado para realizar este trabajo.

A mis papás, por apoyarme y brindarme todo lo posible tangible e intangible para mi crecimiento personal y profesional, por los valores enseñados, por el amor incondicional que siempre me han demostrado. A mi mamá que es una increíble madre, con gran fortaleza, un gran ejemplo a seguir. A mi padre, que siempre ha procurado estar para la familia, por las enseñanzas para mi vida adulta, por el conocimiento y principios que me ha dado. Por ustedes yo he logrado lo que soy ahora, los amo con mi alma.

A mis hermanas, y a Sergio; que me han apoyado a sus diferentes maneras, que me han dado palabras de consuelo y amor en mis momentos más difíciles, por ser mis cómplices y pilares en mi vida; sé que puedo contar con ustedes.

A mis amigos, con los que he compartido memorables momentos en esta vida, gracias por estar en los momentos buenos y malos, gracias por las locuras, las risas, los consejos y todo lo bello que me ha brindado su amistad. Nos hemos visto unos a otros crecer, profesional y personalmente, y estoy tan orgullosa de cada uno de ustedes.

A mi novio, que me ha demostrado sólo amor y comprensión, que me ha apoyado en cada momento desde que estamos juntos, por las risas y momentos compartidos, gracias por amar cada parte de mí, por ser mi mejor amigo, mi cómplice, por tener un corazón tan noble y por ser una persona maravillosa.

A todos ustedes, gracias.

RESUMEN

Desde el inicio de la pandemia por SARS-CoV-2 a finales del 2019, la humanidad incrementó el uso de todo tipo de desinfectantes con la intención de prevenir la propagación de dicho virus. Los ingredientes activos más usados en desinfectantes de acuerdo a la EPA (Lista N: desinfectantes para usar contra el SARS-CoV-2), son los compuestos de amonio cuaternario (Quats), específicamente cinco de ellos: el Cloruro de alquil dimetil bencil amonio (BAC), Cloruro de alquil dimetil etil bencil amonio (ADEBAC), Cloruro de didecil dimetil amonio (DDAC), Cloruro de octil decil dimetil amonio (ODDAC) y el Cloruro de dioctil dimetil amonio (Dio-DAC).

A pesar de que se ha detectado que los Quats son persistentes en los sedimentos, no existe suficiente información sobre su historial de descarga y su destino ambiental. Esta tesis pretende aportar un poco más de información sobre el destino ambiental del BAC, ADEBAC, DDAC, ODDAC y el Dio-DAC, mediante un estudio *in silico* que permite realizar un análisis de las propiedades de estos compuestos de manera rápida y económica en comparación a un estudio experimental.

Se analizaron estos cinco compuestos mediante la interfaz de EPI Suite™ v4.11, para la estimación de sus propiedades fisicoquímicas y de destino ambiental. Los resultados obtenidos muestran que estos quats no son volátiles y tienden a transportarse a los compartimentos ambientales de suelo y sedimento, con tiempos de permanencia que van de semanas a meses; en cuanto a su remoción biológica, son eliminados principalmente por procesos de degradación y en menor parte por la adsorción en lodos.

ABSTRACT

Since the beginning of the SARS-CoV-2 pandemic at the end of 2019, mankind increased the use of all types of disinfectants with the intention of preventing the spread of this virus. The most commonly used active ingredients in disinfectants according to the EPA (List N: Disinfectants for use against SARS-CoV-2), are quaternary ammonium compounds (Quats), specifically five of them: alkyl dimethyl benzyl ammonium chloride (BAC), alkyl dimethyl ethyl benzyl ammonium chloride (ADEBAC), didecyl dimethyl ammonium chloride (DDAC), octyl decyl dimethyl ammonium chloride (ODDAC) and dioctyl dimethyl ammonium chloride (Dio-DAC).

Although Quats have been found to be persistent in sediments, there is insufficient information on their discharge history and environmental fate. This thesis aims to provide some more information about the environmental fate of BAC, ADEBAC, DDAC, ODDAC and Dio-DAC, through an *in silico* study that allows a quick and inexpensive analysis of the properties of these compounds compared to an experimental study.

These five compounds were analyzed using the EPI Suite™ v4.11 interface, for the estimation of their physicochemical and environmental fate properties. The results obtained show that these quats are non-volatile and tend to be transported to the environmental compartments of soil and sediment, with residence times ranging from weeks to months; as for their biological removal, they are eliminated mainly by degradation processes and to a lesser extent by adsorption on sludge.

Contenido	
INTRODUCCIÓN.....	1
PLANTEAMIENTO DEL PROBLEMA.....	3
JUSTIFICACIÓN.....	5
OBJETIVOS	6
OBJETIVO GENERAL:.....	6
OBJETIVOS ESPECÍFICOS:	6
HIPÓTESIS	6
CAPÍTULO I. ANTECEDENTES.....	7
I.1 AMONIOS CUATERNARIOS.....	7
I.1.1 CARACTERÍSTICAS GENERALES.....	7
I.1.2 SÍNTESIS DE AMONIO CUATERNARIO.....	8
I.1.3 CLASIFICACIÓN DE LOS AMONIOS CUATERNARIOS	9
I.1.4 MECANISMO DE ACCIÓN DEL AMONIO CUATERNARIO.....	10
I.1.5 USO DE AMONIO CUATERNARIO DURANTE LA PANDEMIA.....	10
I.1.5 BAC y ADEBAC	14
I.1.6 DDAC, ODDAC, Dio-DAC	18
I.1.7 RIESGO MEDIO AMBIENTAL DE LOS QUATS.....	21
I.1.8 TOXICIDAD ACUÁTICA DE LOS QUATS	21
I.1.9 EVALUACIÓN DEL DESTINO AMBIENTAL DE LOS QUATS	22
I.1.10 RIESGO DE LOS QUATS A LA SALUD HUMANA.....	23
I.2 FUGACIDAD.....	24
I.3 TRATAMIENTO DE AGUA RESIDUAL	24
I.3.1 BIODEGRADABILIDAD EN EL MEDIO ACUÁTICO	26
I.4 ESTIMACIÓN <i>IN SILICO</i>	27
I.5 MODELOS MULTIMEDIA.....	27
I.5.1 MODELOS DE FUGACIDAD.....	28
I.6 MODELOS QSAR.....	28
I.7 EPI Suite™	29
CAPÍTULO II. METODOLOGÍA.....	31
II.1 ESTIMACIÓN DEL DESTINO AMBIENTAL CON EPI Suite™	31
II.2 MODELO DE FUGACIDAD NIVEL III DE EPI Suite™ (LEVEL3NT)	34

II. 3 MODELO DE REMOCIÓN EN PLANTAS DE TRATAMIENTO DE AGUA RESIDUAL DE LODOS ACTIVADOS DE EPI Suite™ (STPWIN)	46
II. 4 CRITERIOS PARA INTERPRETACIÓN DE RESULTADOS, LEVEL3NT Y STPWIN	51
CAPÍTULO III. RESULTADOS Y DISCUSIÓN	55
III.1 ESTIMACIÓN DE LA FUGACIDAD DEL BAC, ADEBAC, DDAC. ODDAC Y Dio-DAC	57
III.1.1 BAC	58
III.1.2 ADEBAC	62
III. 1.3 DDAC	65
III.1.4 ODDAC	69
III.1.5 Dio-DAC	72
III.1.6 DISCUSIÓN DE RESULTADOS, LEVEL3NT.	76
III.2 CÁLCULO DEL PORCENTAJE DE REMOCIÓN DEL BAC, ADEBAC, DDAC, ODDAC Y Dio-DAC, EN UNA PLANTA DE TRATAMIENTO BIOLÓGICA.	77
III.2.1 Escenario sin biodegradación	77
III.2.2 Método de la EPA para vidas medias de biodegradación (usando BIOWIN)	83
III.2.1 DISCUSIÓN DE RESULTADOS, STPWIN.....	89
CONCLUSIONES.....	91
REFERENCIAS:	93

INTRODUCCIÓN

En diciembre del 2019 se registró en la ciudad de Wuhan, China, un brote inusual de neumonía de causa desconocida. Fue hasta el 7 de enero del 2020 que las autoridades chinas anunciaron que se trataba de un nuevo tipo de coronavirus denominado SARS-CoV-2, o Covid-19 (siglas de “Coronavirus disease 2019”). Los contagios incrementaron rápidamente, durante los primeros días la enfermedad se extendió inicialmente en países vecinos como Tailandia, Japón y Corea; y para las primeras semanas del 2020 se registraron casos similares fuera del continente asiático, siendo Estados Unidos, Francia y Brasil de los primeros. Finalmente fue el 11 de marzo que la Organización Mundial de la salud (OMS) declaró oficialmente una pandemia mundial. (Ruiz & Jiménez, 2020).

Desde el inicio de la pandemia por Covid-19 se han usado diferentes desinfectantes como medida de prevención y control de la propagación del virus, tales como soluciones de hipoclorito de sodio, etanol y soluciones de amonio cuaternario especialmente a nivel hospitalario. Simultáneamente a principios de marzo 2020, la Agencia de Protección Ambiental de Estados Unidos publicó la denominada “Lista N: Desinfectantes para usar contra SARS-CoV-2” (EPA, 2020), inicialmente con 85 productos comerciales y que con el tiempo ha ascendido a listar poco más de 600, de los cuales casi la mitad, contienen amonio cuaternario como ingrediente activo. La mayoría de desinfectantes pertenecientes a la Lista N, se aprobaron basándose en la actividad comprobada contra otros coronavirus similares y a otros virus más resistentes. En julio del 2020, la EPA aprobó los primeros dos desinfectantes efectivos probados específicamente contra el virus, Lysol Disinfectant Spray y Lysol Disinfectant Max Cover Mist.

Los cuaternarios de amonio son un grupo de compuestos químicos clasificados como surfactantes/tensioactivos catiónicos usados principalmente en productos de limpieza por su alta acción como bactericida, fungicida y viricida. A lo largo del tiempo la composición de los cuaternarios de amonio se ha ido modificando dando lugar a sus diferentes generaciones.

La finalidad de la siguiente investigación es la estimación *in silico* del destino ambiental de compuestos de amonio cuaternario, mediante la evaluación de su fugacidad en el medio, así como de un análisis de su remoción en una Planta de Tratamiento de Aguas Residuales de lodos activados. Para el estudio se ocupará el software de simulación EPIWEB 4.11 desarrollado por la EPA y Syracuse Research Corp. (SRC), el cuál es un conjunto de programas de estimación de propiedades físicas/químicas y de destino ambiental de sustancias orgánicas. Dicho software funciona mediante estudios de modelación por Relaciones Cuantitativas Estructura-Actividad, mejor conocido como QSAR por sus siglas en inglés.

Una de las principales ventajas de este estudio *in silico*, es que los resultados son proyectados de forma inmediata por parte del programa tomando en cuenta que los datos de entrada son correctos y se pueden interpretar en el mismo momento. A diferencia de un estudio experimental, en el que se requieren más recursos a los de acceso limitado, y en el que también se requiere mucho más tiempo tanto para obtención de resultados como para su interpretación.

PLANTEAMIENTO DEL PROBLEMA

Con el fin de tratar de controlar la pandemia mundial por SARS-CoV-2, la humanidad ha intensificado el uso de desinfectantes de todo tipo, en especial aquellos cuyo ingrediente activo son compuestos de amonio cuaternario (Quats), su empleo masivo involucra consecuencias negativas de misma magnitud al medio ambiente y a la salud. (Hora, Pati, & McNamara, 2020). Los quats son un grupo de sustancias químicas orgánicas que contienen un grupo amino cuaternario con carga positiva y una o dos cadenas de alquilo largas. Debido a sus propiedades anfílicas son ampliamente usados como tensioactivos y biocidas presentes en productos de limpieza, cuidado personal y formulaciones de pesticidas.

Estos compuestos son intercambiadores de cationes hidrofóbicos, por lo que tienen afinidad por las partículas suspendidas y es por lo que terminan principalmente en los sedimentos. Aunque se ha detectado que los quats en los sedimentos son persistentes y en altas concentraciones en varios estuarios de China y Estados Unidos, aún existe información limitada sobre su historial de descarga y destino ambiental. (Dai, y otros, 2018). La alta concentración de quats en el medio ambiente inhibiría la absorción de nutrientes por parte de las algas, aumentaría la resistencia bacteriana a antibióticos y limitaría el proceso de digestión anaerobia. El análisis de todos los tipos de quats presentes en el medio ambiente es un reto ambicioso, pero difícil de cumplir debido a la gran diversidad de estos compuestos y aún más por su extraordinaria similitud.

Cada grupo de quats manifiesta características y propiedades diferentes, por ejemplo, su hidrofobicidad cambia considerablemente según el número de átomos de carbono en la cadena de alquilo, lo que puede afectar su comportamiento cromatográfico. Es por esto que el análisis de los quats se ha centrado a los grupos principales de cloruros de alquil dimetil bencil amonio (BAC o ADBAC), cloruros de dialquil dimetil amonio (DADMAC o DDAC) y cloruros de dialquil trimetil amonio (ATMAC), siendo los únicos compuestos cuantificados mediante cromatografía líquida acoplada a espectrometría de masas (Pati & Arnold, 2020). Sin mencionar que los estudios se limitan únicamente a cuantificar o en su defecto a evaluar sólo una o dos propiedades del contaminante o en su defecto a un análisis de dos o tres tipos de quats en un mismo aspecto de su destino ambiental.

Realizar una investigación convencional sobre el destino y comportamiento ambiental de este compuesto o de cualquier otra sustancia química, requiere una alta variedad de recursos económicos, tecnológicos y materiales; que no resultan fáciles de conseguir. Asimismo, una investigación con una metodología práctica necesita de mucho tiempo para la preparación de

la estrategia de trabajo, la ejecución experimental, la realización de pruebas, la obtención de resultados, interpretación y finalmente también para llegar a una conclusión.

En conjunto con esto, y por desgracia, en México son limitadas las fuentes de información oficiales que reportan datos sobre sustancias químicas, así como su registro y control. En nuestro país, las problemáticas ambientales suelen atenderse conforme llegan a ser evidentes y graves. Aún con el impedimento económico y tecnológico para la evaluación de riesgos ambientales causados por sustancias químicas, en otros países han podido adoptar regulaciones precautorias, pero en el marco legal mexicano aún no puede llevarse a cabo. (Mendoza & Ize, 2017).

A pesar de que México es miembro de algunos de los convenios y protocolos internacionales a favor del medio ambiente más importantes, existe aún una deficiencia en su cumplimiento y una extrema falta de concientización a la sociedad. Probablemente esto se deba a que, en ocasiones, los objetivos de dichos acuerdos internacionales no siempre son prioridad nacional, así que se convierten en temas pendientes por atender.

Con este estudio se espera obtener información complementaria y actualizada sobre el destino ambiental de los compuestos de amonio cuaternario más usados durante la pandemia por SARS-CoV-2, así como de su comportamiento en el medio.

JUSTIFICACIÓN

Se estima que la mayoría de las aplicaciones de los quats terminan eventualmente en sistemas de desagüe y, por lo tanto, en plantas de tratamiento de aguas residuales; aunque se han detectado quats en todo el mundo, su destino ambiental se centra en el medio acuático, en efluentes tratados, aguas superficiales, lodos, sedimentos y suelos asociados con biosólidos. A pesar de que se ha demostrado que los quats se eliminan en aproximadamente un 90 por ciento durante el tratamiento convencional de aguas residuales mediante una combinación de sorción a biosólidos y biodegradación, estos compuestos se encuentran en grandes concentraciones en el medio acuático debido a que se producen en volúmenes exagerados. (Hora, Pati, & McNamara, 2020).

En consecuencia, a medida que crece la producción y consumo de quats a nivel mundial, dichos compuestos ingresarán cada vez más al medio ambiente, y pese a que la emergencia sanitaria derivada de la pandemia ha disminuido, el consumo de estos desinfectantes sigue siendo excesivo debido a la reanudación de actividades de la población, nuevos protocolos de desinfección en más espacios y de manera constante.

Los amonios cuaternarios son inactivados por cationes como el sodio y aluminio, por otros detergentes y por materia orgánica, por lo que su aplicación ante cualquiera de estos elementos no sólo es inútil, si no, perjudicial. El mecanismo de acción inespecífico de los quats altera los perfiles de resistencia a los antibióticos de las comunidades microbianas, incluso puede presentarse la co-resistencia, es decir, la adquisición de resistencia tanto a los quats como a los antibióticos. Por ejemplo, múltiples estudios revelaron que el cloruro de benzalconio aumentó la resistencia al ciprofloxacino, que es uno de los cinco antibióticos más recetados y el más abundante en los biosólidos en Estados Unidos (Hora, Pati, & McNamara, 2020).

Realizar un seguimiento sobre los riesgos ambientales que puede conllevar el uso de desinfectantes durante la pandemia es importante para buscar soluciones que maximicen la eficacia, pero con las mínimas consecuencias negativas para el medio ambiente y la salud humana y no sólo durante la contingencia sanitaria por el coronavirus, si no, de manera permanente en las rutinas de limpieza y desinfección. Es necesario desarrollar una jerarquía de recomendaciones para el uso de estos productos, así como el correcto esparcimiento de información verídica a toda la población a nivel mundial, para tener un control de los efectos adversos en el actual contexto de crisis socio ambiental.

Mediante la estimación del destino ambiental de cualquier contaminante in silico, específicamente, con los programas LEVEL3NT y STPWIN de la interfaz de EPI Suite™, se

puede obtener un estudio confiable que serviría de referencia para futuras investigaciones experimentales, y en un periodo corto de tiempo para recabar los resultados y realizar su respectiva interpretación, sin mencionar que EPI Suite™ es un programa gratuito que puede ser descargado directamente de la página oficial de la EPA.

OBJETIVOS

OBJETIVO GENERAL:

- ✚ Estimar mediante modelos *in silico* el destino ambiental de compuestos de amonio cuaternario usados en desinfectantes durante la pandemia mundial por SARS-CoV-2.

OBJETIVOS ESPECÍFICOS:

- ✚ Estimar la fugacidad de compuestos de amonio cuaternario en el medio, con el programa LEVEL3NT de EPI Suite™
- ✚ Calcular el porcentaje de remoción de compuestos de amonio cuaternario en una PTAR a base de lodos activados con el programa STPWIN de EPI Suite™

HIPÓTESIS

Los modelos de estimación muestran que los procesos biológicos no logran la remoción completa de los compuestos de amonio cuaternario, su distribución final en ecosistemas es principalmente en los sedimentos y su destino ambiental se centra en el medio acuático.

CAPÍTULO I. ANTECEDENTES

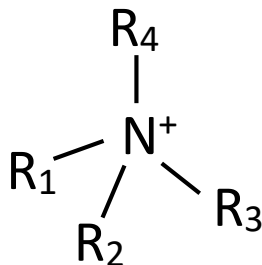
I.1 AMONIOS CUATERNARIOS

Los compuestos de amonio cuaternario (QACs o Quats) son empleados actualmente como agentes bioactivos, debido a que presentan un rango muy amplio de actividad biológica y antimicrobiana. Estas propiedades únicas de los quats han originado sus diversas aplicaciones y a su gran producción industrial que supera las 500.000 toneladas al año en todo el mundo. (Bures, 2019). Los quats han sido incluidos en la lista de productos químicos producidos a gran volumen por la Organización para la Cooperación y el Desarrollo Económico (OCDE).

Los quats comparten el catión de amonio cuaternario común ilustrado en la Figura 1. La naturaleza de los sustituyentes R1, R2, R3 y R4 varía para influir en las propiedades del ion. En estado puro, los quats también contienen un anión, como el cloruro, el bromuro o el metosulfato. Cuando están en solución, como en un sistema de aguas residuales, las sustancias se disocian y el anión con el que los quats estaban asociados es irrelevante (Kaj, Wallberg, & Brorström-Lundén, 2014).

Figura 1.

Fórmula general de un catión de amonio cuaternario



Nota. Fuente: (Kaj, Wallberg, & Brorström-Lundén, 2014)

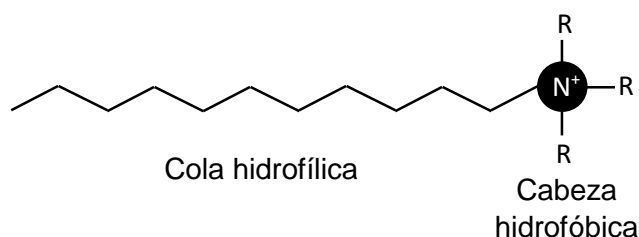
I.1.1 CARACTERÍSTICAS GENERALES

Los quats son generalmente muy voluminosos, sus cuatro sustituyentes alquilo/arilo explican el porqué de la separación tan significativa del R_4N^+ de su anión contrario, especialmente en solución, pues como se mencionó anteriormente se cree que el R_4N^+ (denominado metal alcalino sintético) se disocia completamente en soluciones acuosas. Como sustancias iónicas los quats son generalmente muy solubles en disolventes polares y próticos como el agua y el alcohol. Sin embargo, su solubilidad disminuye dramáticamente con el aumento de la longitud

de cadena y los quats con R superior a C14 tienen baja solubilidad o son prácticamente insolubles en agua. Por lo contrario, la solubilidad de los quats de cadena larga mejora en disolventes no polares. Otra característica notable de los quats es su conductividad iónica, sus soluciones son muy buenos electrolitos. Debido a sus estructuras, terminales polares (N^+) y no polares (R) los quats son capaces de absorber en una superficie o interfaz, para reducir su tensión; esta característica los hace un grupo de tensioactivos muy popular.

Figura 2.

Polaridad de las moléculas de quats



Nota. Fuente: (Bures, 2019)

Los quats presentan una amplia actividad biológica y microbiana, de ello su aplicación actual como agentes bioactivos. Las propiedades fisicoquímicas de los quats han dado lugar a su extenso uso y su producción industrial que supera las 500.000 toneladas por año en todo el mundo. (Bures, 2019).

I.1.2 SÍNTESIS DE AMONIO CUATERNARIO

El método tradicional de formación de amonios cuaternarios mediante síntesis química es la que se hace reaccionar el amoniaco con haluros de alquilo como por ejemplo yoduro de metilo, lo que genera una mezcla de aminas primarias, secundarias y terciarias. Usando un exceso de reactivo puede obtenerse un compuesto de amonio cuaternario con cuatro grupos orgánicos unidos al átomo de nitrógeno.

Los procesos de síntesis de compuestos de amonio cuaternario requieren normalmente un disolvente no reactivo para reducir la viscosidad de las aminas antes y durante la cuaternización. El disolvente más frecuentemente usado es alcohol isopropílico. Una vez completada la cuaternización, los quats se venden como composiciones en una mezcla de dichos disolventes o se secan, se trituran y se venden como polvos relativamente libres de disolvente. (New Jersey Patente nº EP 0 726 246 A1, 1996)

I.1.3 CLASIFICACIÓN DE LOS AMONIOS CUATERNARIOS

La estructura básica del ión amonio (NH_4) presente en estos compuestos puede ser modificada dando lugar a las diferentes generaciones de quats:

Primera generación: En esta clasificación se encuentra el cloruro de benzalconio, también llamado cloruro de n-alkil dimetil bencil amonio, donde la cadena alquílica puede tener variaciones en la composición de número de carbonos (C12, C14, C16, C18). Este compuesto fue principalmente usado en los años 50, la EPA registró un producto con este ingrediente por primera vez en 1947. Al ser el quat más usado por largo tiempo, actualmente se considera el de menor efectividad biocida y se ha demostrado que ya presenta resistencia bacteriana.

Segunda generación: Habiendo modificado el anillo aromático de la primera generación añadiendo un radical etil, en esta generación surge el Cloruro de N-alkil dimetil etil bencil amonio. De acuerdo con la literatura, este producto dejó de existir comercialmente en los años 2000, sin embargo, datos de la investigación en proceso muestra que actualmente podemos encontrar productos comerciales con este ingrediente.

Tercera generación: En esta clasificación se encuentran compuestos resultado de la mezcla de las dos primeras generaciones. Esta mezcla resulta en una mayor actividad biocida, mayor detergencia y relativa baja toxicidad.

Cuarta generación: Este grupo de compuestos se conoce como cuaternarios de “cadena gemela” o “cadena dual”. Son productos cuaternarios con cadenas di alquílicas lineales y no poseen anillo bencénico, tales como: Cloruro de didecil dimetil amonio (DDAC), Cloruro de dioctil dimetil amonio (Dio-DAC) o Cloruro de octil decil amonio (ODDAC), cada uno aislado. Los de cuarta generación tienen una excelente actividad biocida, casi no forman espuma, poseen una elevada tolerancia a los residuos de proteína y al agua dura y baja toxicidad.

Quinta generación: Son compuestos mezcla de la segunda y cuarta generación, existe una gran variedad de formulaciones, actualmente son los de mayor efectividad biocida en condiciones hostiles.

Tabla 1.

Clasificación de quats por generación.

TIPO	COMPUESTO (S)	ABREVIATURAS
Primera Generación	Cloruro de alquil dimetil bencil amonio o Cloruro de benzalconio	BAC o ADBAC

TIPO	COMPUESTO (S)	ABREVIATURAS
Segunda Generación	Cloruro de alquil dimetil etilbencil amonio	ADEBAC
Tercera Generación	Mezcla de primera y segunda generación	BAC + ADEBAC
Cuarta Generación	Cloruro de didecil dimetil amonio, Cloruro de dioctil dimetil amonio, Cloruro de octil decil amonio, entre otros.	DDAC, Dio-DAC, ODDAC, respectivamente
Quinta Generación	Mezcla de primera y cuarta generación. (Existe una amplia variedad de formulaciones).	BAC+DDAC+Dio-DAC+ODDAC

Nota. Fuente: Elaboración propia

I.1.4 MECANISMO DE ACCIÓN DEL AMONIO CUATERNARIO

Los amonios cuaternarios actúan de diferentes maneras sobre los microorganismos, pueden reaccionar con las membranas celulares, desnaturalizar proteínas celulares esenciales o interaccionan con la enzima que cataliza la formación de los constituyentes celulares de los microorganismos a eliminar anulando su funcionalidad.

El quat entra a la membrana del microorganismo a través de la cadena carbonada que es hidrófoba, y por medio del nitrógeno catiónico que es hidrófilo interacciona con los fosfatos de los fosfolípidos resultando en la salida del citoplasma al exterior. A su vez los quats inhiben la cadena respiratoria e inactivan enzimas de crecimiento en los microorganismos. (Piovesan & Tagkopoulos, 2019)

I.1.5 USO DE AMONIO CUATERNARIO DURANTE LA PANDEMIA

Como se ha mencionado antes, en marzo del 2020 la EPA publicó una primera lista “N” de desinfectantes para usar contra el SARS-CoV-2, en la que se encuentra información como número de registro EPA, ingrediente activo, nombre del producto, compañía fabricante, patógeno a eliminar según las instrucciones, tiempo de contacto para efectividad, tipo de formulación, tipo de superficie sobre la que actúa y lugar de uso (salud, institucional, residencial). En la Tabla 2, se muestra una lista de los ingredientes activos presentes en los desinfectantes aprobados por la EPA, y en cuántos productos se encuentran. Cabe resaltar que los productos pueden contener uno o más de los ingredientes a mencionar.

Tabla 2.*Ingredientes activos presentes en productos desinfectantes de la Lista "N"*

Ingrediente activo	Cantidad de productos
1,2-Hexanodiol	1
Ácido cítrico	21
Ácido dodecilbencenosulfónico	6
Ácido glicólico	4
Ácido hidrocórico- ácido clorhídrico	5
Ácido hipocloroso	29
Ácido L-láctico	8
Ácido octanoico	5
Ácido peroxiacético	33
Ácido peroxioctanoico	2
Bicarbonato de amonio	3
Carbonato de amonio	3
Carbonato de sodio	4
Carbonato peroxihidrato de sodio	3
Clorito de sodio	12
Cloruro de hidrógeno	1
Cloruro de sodio	7
Dicloroisocianurato de sodio	9
Dicloroisocianurato dihidrato de sodio	1
Dióxido de cloro	11
Etanol	39
Fenol	29
Glutaraldehído	3
Hipoclorito de sodio	77
Ión plata	2

Ingrediente activo	Cantidad de productos
Isopropanol	25
Peróxido de hidrógeno	92
Peroximonosulfato de potasio	4
PHMB clorhidrato de poli - (hexametilbiguanida)	2
Plata	5
Quaternario de amonio	280
Tetracetil etilendiamina	2
Timol	7
Trietilen glicol	1
Yodo	1

Nota. Fuente: Lista “N”. Recuperado en abril 2022. EPA (2022)

Tal como se visualiza en la Tabla 2, los principales ingredientes activos usados en desinfectantes aprobados por la EPA, son cuaternarios de amonio, peróxido de hidrógeno e hipoclorito de sodio. Recalcando que aquellos con quats incluyen casi la mitad del total de la lista. La Tabla 3 expone algunos ejemplos de productos con quats como ingrediente activo.

Después de analizar la lista “N”, se concluyó que los quats con mayor presencia en los productos desinfectantes aprobados por la EPA, son: cloruro de alquil dimetil bencil amonio (BAC), cloruro de alquil dimetil etil bencil amonio (ADEBAC), cloruro de didecil dimetil amonio (DDAC), cloruro de octil decil dimetil amonio (ODDAC) y cloruro de dioctil dimetil amonio (Dio-DAC); siendo estos los compuestos a estudiar en esta investigación.

Para fortalecer este estudio y como evidencia, se realizó una investigación de campo que consistió en una recolección de datos (específicamente de los ingredientes) de los principales desinfectantes en el mercado mexicano, en la ciudad de Puebla, Pue. Cabe mencionar que algunos de estos productos especifican en sus etiquetas que son efectivos contra el virus Covid19. En la Tabla 4 se muestran los datos obtenidos.

Tabla 3.*Ejemplos de productos desinfectantes que contienen quats como ingrediente activo*

No. EPA	Nombre	Ingrediente(s) activo(s)	Tipo de Quat	
1839-167	BTC 885 Neutral Disinfectant Cleaner-256	-Cloruro de alquil dimetil bencil amonio (C12-C16) -Cloruro de octil decil dimetil amonio -Cloruro de didecil dimetil amonio -Cloruro de dioctil dimetil amonio	BAC+DDAC+ Dio-DAC +ODDAC (5ta gen)	
67619-38	CloroxPro™ Total Disinfecting Cleaner1	Clorox 360®	-Cloruro de alquil dimetil bencil amonio (60% C14, 30% C16, 5% C12, 5% C18) -Cloruro de alquil etil bencil amonio (68% C12, 32% C14%)	BAC+ADEBAC (3era generación)
11525-30	Disinfectant "G" Spray	HWS-	-Cloruro de n-alquil dimetil bencil amonio (60% C14, 30% C16, 5% C12, 5% C18) -Cloruro de n-alquil dimetil etil bencil amonio (68% C12, 32% C14)	BAC+ADEBAC (3era generación)
47371-130	Formulation 128	HWS-	-Cloruro de alquil dimetil bencil amonio (50% C14, 40% C12, 10% C16) -Cloruro de didecil dimetil amonio	BAC+DDAC (5ta generación)
63761-8	Sterilex Disinfectant Solution 1	Ultra Cleaner	-Cloruro de n-alquil dimetil etil bencil amonio (68% C12, 32% C14) -Cloruro de n-alquil dimetil bencil amonio (60% C14, 30% C16, 5% C12, 5% C18)	BAC+ADEBAC (3era generación)
9480-10	Sani-Prime Germicidal Spray		-Cloruro de didecil dimetil amonio	DDAC (4ta generación)
1839-248	Stepan Disinfectant Concentrate	Spray	-Cloruro de didecil dimetil amonio	DDAC (4ta generación)
777-89	Lysol® Brand Clean & Fresh Multi-surface Cleaner		-Cloruro de alquil dimetil bencil amonio (50% C14, 40% C12, 10% C16)	BAC (1era generación)

Nota. Fuente: Elaboración propia con información de la Lista N y hojas de registro de la EPA.

Tabla 4.

Recopilación de datos de productos desinfectantes encontrados en establecimientos de la ciudad de Puebla, Pue.

NOMBRE	COMPAÑÍA	INGREDIENTES
Desinfectante en spray.Great Value	Nueva Wal-Mart de México S. de R.L. de C.V.	Agua, etanol, isopropanol, tensioactivo no iónico, tensioactivo catiónico (cuaternarios de amonio), fragancia, EDTA tetrasódico y conservador.
Toallitas húmedas Escudo	Kimberly-Clark de México S.A.B. de C.V.	Agua, polisorbato 20, Capril glicol, Cuaternario de amonio , fenilpropanol, fragancia, benzoato de sodio, coco betaína, ácido málico, decilenglicol, cloruro de sodio, citrato de sodio, extracto de aloe barbadensis, acetato de tocoferilo, aceite de soya.
Cloralex toallitas desinfectantes	Industrias ALEN S.A. DE C.V.	Agua, alcohol isopropílico, laurilamina dipropilendiamina, propilenglicol, fragancia, glicerina, coco---oacetato de sodio, aceite de ricino hidrogenado, ácido cítrico, cloruro de benzalconio , EDTA tetrasódico, emulsificante.
Lysol spray multisuperficies	Reckitt Benckiser México S.A. de C.V	Agua. Propelente:butano, propano, amina orgánica, tensioactivo aniónico, tensioactivo catiónico , fragancia y base inorgánica.
Sapolio desinfectante spray	INTRADEVCO INDUSTRIAL (Perú)	2 fenil fenol 0.15%, perfume, agua, alcohol etílico. Propelentes: propano/butano.
Mr musculo desinfectante	SC Jonhson and Son S.A. de C.V.	Agua, diisopropanolamina al 85%(1,5%), lauril dimetil amina óxido al 30%(1,2%), agente limpiador, alquil dimetil bencil clouro de amonio al 80% (0,33%), agente quelante y fragancia.
Pledge limpador multisuperficies	SC Jonhson and Son S.A. de C.V.	Agua, alcohol etílico (0,4%), emulsificante, 2 -metil-4-isotiazolin-3-ona al 9,9%(0,25%), fragancia, estabilizador, ácido cítrico
Cloralex limpador desinfectante	Alen del norte S.A. de C.V.	Agua, alcohol etílico, tensoactivo iónico, compuestos de amonio cuaternario , colorante y fragancia
Fabuloso desinfectante	Mission Hills S.A. de C.V.	Agua, alquil benceno sulfato de sodio, alcohol, peróxido de hidrógeno, perfume, ácido láctico, goma xantana, estabilizante
Ajax aerosol desinfectante	Laboratorios Rety de Colombia S.A.S	Alcohol etílico, butano/propano/isobutano (gas propelente), agua, perfume, benzoato de sodio, cloruro de alquil dimetil bencil amonio

Nota. Fuente: Elaboración propia resultado de una investigación de campo en distintos establecimientos comerciales de la ciudad de Puebla, Pue.

I.1.5 BAC y ADEBAC

El nombre común es cloruro de benzalconio y las principales abreviaturas incluyen BAC, ADBAC, BKC y BZKEI o amonio cuaternario de primera generación. El cloruro de benzalconio comercial es una mezcla de cloruros de alquil bencil dimetil amonio de varias longitudes de cadena alquílica par (Kaj, Wallberg, & Brorström-Lundén, 2014). Tienden a agruparse en tres categorías:

- Dominados por C12: 50–70% C12 25–30% C14 5–10% C16
- Dominados por C14: 14–40% C12 50–60% C14 10–28% C16
- Casi solamente C14: 1–5% C12 >90% C14 1–5% C16

En 1947 se registró en Estados Unidos el primer pesticida que contenía un BAC como ingrediente activo. En la actualidad el producto más antiguo registrado con este ingrediente se registró en 1956. En 1988 la EPA describió la “Agrupación de compuestos de amonio cuaternario” en la que agrupa los quats que son estructuralmente similares en 4 grupos:

- Grupo I: Quats sustituidos por alquilo o hidroxialquilo (cadena recta).
- Grupo II: Quats sustituidos por bencilo no halogenado (incluye hidroxibencilo, etil bencil, hidroxietilbencil, naftilmetil, dodecilbencil y alquilbencil).
- Grupo III: Quats sustituidos por di y tri clorobencil.
- Grupo IV: Quats con sustituciones inusuales (compuestos heterocíclicos cargados).

El caso químico de BAC y ADEBAC se incluyó en el grupo II. Sin embargo, en los documentos oficiales de la EPA y en la literatura en general la información disponible sobre el ADEBAC es casi inexistente.

BAC

Los BAC o ADBAC son un grupo químico determinado por la EPA en los que incluye 19 compuestos que son estructuralmente similares (Tabla 5) y que se caracterizan por tener un nitrógeno cargado positivamente unido covalentemente a tres sustituyentes del grupo alquilo y a un sustituyente bencilico. En su forma acabada, estos quats son sales en las que el nitrógeno cargado positivamente (catión) se equilibra con una molécula con carga negativa (anión). El anión más común para los quats de este grupo es el cloruro. Sin embargo, también se utilizan otros aniones, como la sacarina y el bromuro. (EPA, 2006)

Tabla 5.

Compuestos del grupo químico BAC

CAS	NOMBRE
53516-76-0	Alquil (60%C ₁₄ , 30%C ₁₆ , 5%C ₁₈ , 5%C ₁₂) dimetil bencil cloruro de amonio
68424-85-1	Alquil (50%C ₁₄ , 40%C ₁₂ , 10%C ₁₆) dimetil bencil cloruro de amonio
8001-54-5	Alquil (50%C ₁₂ , 30%C ₁₄ , 17%C ₁₆ , 3%C ₁₈) dimetil bencil cloruro de amonio
139-08-2	Alquil (100%C ₁₄) dimetil bencil cloruro de amonio

CAS	NOMBRE
8045-21-4	Alquil (50%C ₁₂ , 30%C ₁₄ , 17%C ₁₆ , 3%C ₁₈) dimetil etil bencil cloruro de amonio
73049-75-9	Dialquil (60%C ₁₄ , 30%C ₁₆ , 5%C ₁₈ , 5%C ₁₂) metil bencil cloruro de amonio
121-54-0	Benzenometanamino, N,N-dimetil-N- (2-(2-(4-(1,1,3,3-tetrametilbutil)fenoxi)etoxi)etil)-, cloruro
1330-85-4	Dodecil bencil trimetil cloruro de amonio
68424-85-1	Alquil (60%C ₁₄ , 25%C ₁₂ , 15%C ₁₆) dimetil bencil cloruro de amonio
61798-71-7	Alquil (61%C ₁₂ , 23%C ₁₄ , 11%C ₁₆ , 2.5%C ₁₈ , 2.5%C ₁₀ , trazo C ₈) dimetil bencil cloruro de amonio
68424-85-1	Alquil (58%C ₁₄ , 28%C ₁₆ , 14%C ₁₂) dimetil bencil cloruro de amonio
85409-23-0	Alquil (68%C ₁₂ , 32%C ₁₄) dimetil etil bencil cloruro de amonio
68956-79-6	Alquil (60%C ₁₄ , 30%C ₁₆ , 5%C ₁₂ , 5%C ₁₈) dimetil etil bencil cloruro de amonio
68989-01-5	Alquil (50%C ₁₄ , 40%C ₁₂ , 10%C ₁₆) dimetil bencil sacarinato de amonio
68391-01-5	Alquil (67%C ₁₂ , 25%C ₁₄ , 7%C ₁₆ , 1%C ₁₈) dimetil bencil cloruro de amonio
68424-85-1	Alquil (95%C ₁₄ , 3%C ₁₂ , 2%C ₁₆) dimetil bencil cloruro de amonio
68391-01-5	Alquil (41%C ₁₄ , 28%C ₁₂ , 19%C ₁₈ , 12%C ₁₆) dimetil bencil cloruro de amonio
63449-41-2	Alquil (67%C ₁₂ , 25%C ₁₄ , 7%C ₁₆ , 1%C ₁₈) dimetil bencil cloruro de amonio
61789-18-2	Alquil (como en el ácido graso del aceite de coco) trimetil cloruro de amonio

Nota. Fuente: Plan de trabajo final del BAC. (EPA , 2017)

Cabe resaltar que la EPA usa el compuesto alquil (40%C₁₂, 50%C₁₄, 10%C₁₆) dimetil bencil cloruro de amonio (CAS 68424-85-1) como referencia porque este ingrediente activo tiene el mayor número de registros además de que se considera el más representativo en este grupo químico.

El BAC es un líquido transparente de color amarillo con olor a amina que es soluble en agua y alcoholes, en la Tabla 6 se describen más de sus propiedades físico químicas.

Tabla 6.

Propiedades físico químicas del BAC (CAS 68424-85-1)

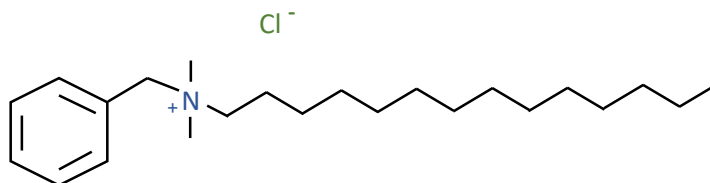
Notación SMILES	c1cccc1C[N+](CCCCCCCCCCCC)(C)(C).[Cl-]
Fórmula molecular	RC ₉ H ₁₃ NCl R=n-alquil (C ₁₂ 40%, C ₁₄ 50%, C ₁₆ 10%)

Peso molecular	377.83 g/mol
pH	7.59
Absorción UV/visible	Ninguna en el rango 290-800 nm
Densidad (g/cm³ a 25°C)	0.9429
Constante de disociación (pKa)	N/A
Coefficiente de partición octanol-agua a 25°C (LogKow)	3.91
Solubilidad en agua (mg/L)	10,000
Punto de ebullición (°C)	560.84
Punto de fusión (°C)	241.02
Presión de vapor (mmHg) a 25°C	3.53x10 ⁻¹²
Constante de ley de Henry a 25°C (atm·m³/mol)	1.34x10 ⁻¹¹

Nota. Fuente: Plan de trabajo final del BAC. (EPA , 2017)

Figura 3.

Estructura del BAC, CAS 68424-85-1



Nota. Fuente: (National Center for Biotechnology Information, 2022)

ADEBAC

El cloruro de alquil dimetil etil bencil amonio (ADEBAC), también llamado N-alquil etil bencil dimetil amonio, es un compuesto de amonio cuaternario con propiedades tensioactivas. Es empleado en una gran variedad de agentes limpiadores desinfectantes con una actividad antibacteriana relativamente amplia contra gram positivos como gram negativos. La información disponible sobre este compuesto es realmente escasa limitándose a la base de datos de la Agencia Europea de Sustancias y Mezclas Químicas (ECHA).

Tabla 7.

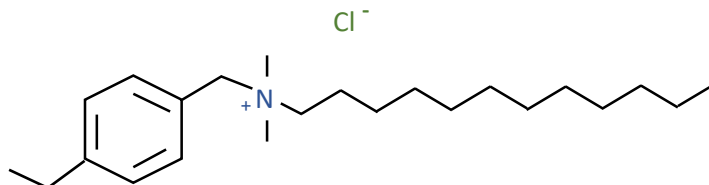
Propiedades físico químicas del ADEBAC (CAS 85409-23-0)

Notación SMILES	<chem>c1(CN(C)(C)(Cl)CCCCCCCCCCC)ccc(CC)cc1</chem>
Fórmula molecular	$RC_{23}H_{42}ClN$ R=C12 (68%) C14 (32%)
Peso molecular	368.039

Nota. Fuente: (National Center for Biotechnology Information, 2022)

Figura 4.

Estructura del ADEBAC, CAS 85409-23-0



Nota. Fuente: (National Center for Biotechnology Information, 2022)

I.1.6 DDAC, ODDAC, Dio-DAC

En los amonios cuaternarios de cuarta generación encontramos el Cloruro de didecil dimetil amonio (DDAC), Cloruro de dioctil dimetil amonio (Dio-DAC) o Cloruro de octil decil amonio (ODDAC). El grupo químico de los cuaternarios alifáticos incluye cinco compuestos que son estructuralmente similares (Tabla 8), caracterizados por tener un nitrógeno cargado positivamente unido covalentemente a dos sustituyentes del grupo alquilo (al menos un C8 o más) y dos sustituyentes metilo. En su forma acabada, estos quats son sales con un nitrógeno cargado positivamente (catión) balanceado por una molécula con carga negativa (anión). El anión para este grupo de quats es cloro o bromo. El cloruro de dimetil amonio fue el primer ingrediente activo registrado en este grupo en 1962. (EPA, 2006).

Tabla 8.

Grupo de cuaternarios alifáticos

CAS	NOMBRE
7173-51-5	Cloruro de didecil dimetil amonio

32426-11-2	Cloruro de octil decil dimetil amonio
5538-94-3	Cloruro de dimetil dioctil amonio
68607-28-3	Oxidietilenbis(alquil* dimetil cloruro de amonio) *(como en los ácidos grasos del aceite de coco)
61789-18-2	Cloruro de alquil* trimetil amonio *(como en los ácidos grasos del aceite de coco)

Nota. Fuente: Plan de trabajo final del DDAC. (EPA, 2017)

DDAC

El DDAC es un líquido color amarillo claro con olor etanólico que es completamente soluble en agua. En la Tabla 9 se describen más de sus características físico químicas.

Tabla 9.

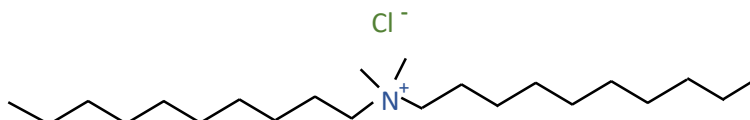
Propiedades físico químicas del DDAC (CAS 7173-51-5)

Notación SMILES	<chem>N(Cl)(C)(C)(CCCCCCCCC)CCCCCCCCC</chem>
Fórmula molecular	$R_2C_2H_6NCl$ (R=C ₁₀)
Peso molecular	362.08 g/mol
pH	6.31
Absorción UV/visible	Ninguna en el rango 290-800 nm
Densidad (g/cm³ a 25°C)	0.9216
Constante de disociación (pKa)	N/A
Coefficiente de partición octanol-agua a 25°C (LogKow)	4.66
Solubilidad en agua (mg/L)	Completamente soluble
Punto de ebullición (°C)	534.70
Punto de fusión (°C)	No disponible
Presión de vapor (mmHg) a 25°C	2.33×10^{-11}
Constante de ley de Henry a 25°C (atm-m³/mol)	6.85×10^{-10}

Nota. Fuente: Plan de trabajo final del DDAC. (EPA, 2017)

Figura 5.

Estructura del DDAC. (CAS 7173-51-5)



Nota. Fuente: (National Center of Biotechnology Information, 2022)

ODDAC

No se encontró información específica sobre el ODDAC más que la presentada en la Tabla 10:

Tabla 10.

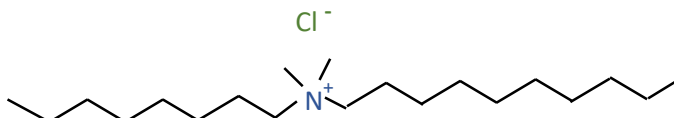
Propiedades físico químicas del ODDAC (CAS 32426-11-2)

Notación SMILES	<chem>N(Cl)(C)(C)(CCCCCCCC)CCCCCCCC</chem>
Fórmula molecular	$C_{20}H_{44}ClN$
Peso molecular	334.0 g/mol

Nota. Fuente: (National Center for Biotechnology, 2022)

Figura 6.

Estructura del ODDAC (CAS 32426-11-2)



Nota. Fuente: (National Center for Biotechnology, 2022)

Dio-DAC

Tabla 11.

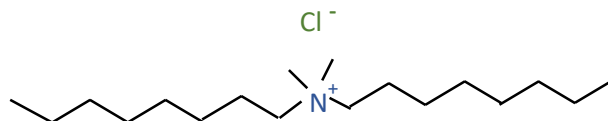
Propiedades físico químicas del Dio-DAC (CAS 5538-94-3)

Notación SMILES	<chem>[N+](C)(C)(CCCCCCCC)CCCCCCCC.[Cl-]</chem>
Fórmula molecular	$C_{18}H_{40}ClN$
Peso molecular	306.0 g/mol

Nota. Fuente: (National Center for Biotechnology Information, 2022)

Figura 7.

Estructura del Dio-DAC (CAS 5538-94-3)



Nota. Fuente: (National Center for Biotechnology Information, 2022)

I.1.7 RIESGO MEDIO AMBIENTAL DE LOS QUATS

Dado que los quats son tensioactivos, una afluencia de estos compuestos podría contribuir o exacerbar los problemas existentes de formación de espuma en las PTAR, lo que podría interrumpir o reducir temporalmente la eficacia del tratamiento. Lo más probable es que el aumento constante de las concentraciones de quats a lo largo del tiempo provoque cambios en las comunidades microbianas que pueden albergar más resistencia a los antibióticos tanto en los sistemas de tratamiento como en el medio ambiente, especialmente aguas abajo de las PTAR. (Hora, Pati, & McNamara, 2020)

En los registros y otros documentos de interés actualmente disponibles sobre el BAC y DDAC, se menciona que la EPA aún no ha realizado una evaluación de riesgos que apoye una determinación completa de las especies en peligro debido a estas sustancias. Sin embargo, como parte de los registros del 2017 se prevé que será necesaria una evaluación del riesgo ecológico para ambos compuestos basada en los usos en los sistemas de agua, su liberación al drenaje por parte de hospitales y piscinas, su uso como conservante de madera y en jardinería general. Esta evaluación prevista permitirá a la Agencia determinar los posibles riesgos agudos y crónicos para los organismos acuáticos expuestos a los residuos de estas sustancias.

Existe un potencial de exposición aguda a los organismos acuáticos debido a la alta solubilidad de los quats en agua, pero a su vez al ser un compuesto con carga positiva se absorbe fuertemente en el suelo y los sedimentos por lo que una bioconcentración en los organismos acuáticos es poco probable y por lo mismo se espera una exposición crónica en los organismos presentes en los sedimentos. (EPA , 2017)

I.1.8 TOXICIDAD ACUÁTICA DE LOS QUATS

Hora et al. (2020) categoriza a los quats como algistáticos y bacteriostáticos en concentraciones de 0,5 a 5 mg/L y microbicidas en concentraciones de 10 a 50 mg/L. Sin embargo, ya se han

detectado efectos tóxicos agudos sobre las bacterias marinas de la familia Vibrionaceae a altas concentraciones de $\mu\text{g/L}$ ($\text{EC}_{50} = 57\text{-}630 \mu\text{g/L}$). En general, la toxicidad de los quats hacia las algas aumentó con el tiempo de exposición y con las longitudes de cadena del BAC, pero no con las longitudes de cadena del DDAC. Los protozoos (*Tetrahymena thermophila* y *Spirostomum ambiguum*) parecen menos sensibles que las algas, con una $\text{EC}_{50}\text{-}24\text{h}$ de 1,5-10 mg/L y una $\text{LC}_{50}\text{-}24\text{h}$ de 0,2-0,9 mg/L, mientras que la *Daphnia magna* es especialmente sensible a los quats, con una $\text{EC}_{50}\text{-}24\text{h}$ media de 0,18 mg/L y una $\text{EC}_{50}\text{-}48\text{h}$ de 0,03 mg/L.

En unas pruebas de toxicidad se estudió el efecto de la presencia de sedimentos, arcillas y materia orgánica disuelta resultando en que la fracción libremente disuelta de los quats es prácticamente la responsable de causar efectos tóxicos probablemente porque los quats sorbidos no son biodisponibles. Por razones similares, los umbrales de toxicidad son sustancialmente más altos para los organismos bentónicos y las plantas terrestres y acuáticas. (Hora, Pati, & McNamara, 2020). Actualmente es difícil evaluar si los organismos acuáticos están en riesgo por los niveles de quats que se observan hoy en día o que se esperan en el futuro.

I.1.9 EVALUACIÓN DEL DESTINO AMBIENTAL DE LOS QUATS

Las concentraciones de quats detectadas en aguas superficiales de todo el mundo y en efluentes de aguas residuales van desde menos de 1 $\mu\text{g/L}$ hasta aproximadamente 60 $\mu\text{g/L}$, y se han encontrado quats de hasta 10 veces estos niveles en aguas residuales afluentes. En un estudio realizado en Alemania se detectaron concentraciones medias de C12-BAC totales de 4,7 y 7,7 $\mu\text{g/L}$ en muestras de aguas residuales recogidas directamente de dos alcantarillas sanitarias de un vecindario. (Hora, Pati, & McNamara, 2020)

Los procesos que influyen principalmente en el destino de los quats es la sorción y la biodegradación (biotransformación) para cada compartimento ambiental. Siendo la sorción el proceso más rápido. Los quats tienen afinidad por materiales como lodos, sedimentos, paredes celulares bacterianas, arcilla y materiales húmicos.

La capacidad de adsorción de los quats en el medio ambiente depende de su estructura y además de la naturaleza del sedimento y/o suelo y de los parámetros ambientales. En los sistemas de tratamiento de aguas residuales, el aumento de la longitud de cadena de los quats incrementa su tendencia a la adsorción en los lodos y aumenta la proporción a través del exceso de eliminación de lodos. (Chang, y otros, 2015)

Otro factor a considerar en el destino de los quats es la inhibición respiratoria en los lodos activados ya que los quats impiden la captación y utilización del oxígeno mediante la inhibición de las enzimas respiratorias provocado una utilización prolongado del sustrato de la DQO. (Chang, y otros, 2015)

I.1.10 RIESGO DE LOS QUATS A LA SALUD HUMANA

De acuerdo al Programa Nacional de Toxicología de E.E. U.U. (NTP) en su publicación nombrada “Biocidas y posibles consecuencias para la salud respiratoria” (2019), estudios han asociado la exposición a los biocidas con el asma y otras enfermedades respiratorias relacionadas con el trabajo, especialmente en los últimos años. Algunas de las profesiones en las que la exposición a biocidas es variada y prolongada son conserjes, amas de casa, enfermeras y técnicos sanitarios.

La Agencia de Protección Ambiental de los E.E.U.U. solicitó que el NTP llevara a cabo una investigación bibliográfica para buscar evidencia de enfermedades respiratorias causadas por exposición ocupacional a pesticidas antimicrobianos con un enfoque específico en desinfectantes en superficies duras.

El NTP seleccionó 10 ingredientes activos comunes usados en plaguicidas antimicrobianos que están regulados por la EPA bajo la Ley Federal de Insecticidas, Fungicidas y Rodenticidas, con la intención de identificar estudios humanos, animales y mecanísticos que involucran la inhalación de estas sustancias y un rango de efectos respiratorios potenciales como el asma, irritación y sensibilización. Dentro de esta investigación se incluyó el BAC (CAS 85424-85-1) y el DDAC (CAS 7173-51-5). (U.S. Department of Health and Human Services, 2019). Cabe recalcar que NTP tiene esta investigación en curso.

La mayoría de los agentes desinfectantes y antimicrobianos que se encuentran en la Lista N de la EPA, no tienen límites de exposición ocupacional (OEL), a pesar de ser reconocidos como riesgos ocupacionales potenciales. Esto incluye a los compuestos de amonio cuaternario que representan casi la mitad de los ingredientes activos presentes en dicha lista.

Dotson et al. (2020) obtuvieron tres valores de OEL potenciales para un producto de la Lista N que contiene quats como ingredientes activos. Basados en datos de toxicidad por irritación, datos toxicidad para el desarrollo y la reproducción (DART) y la modificación del dato existente del límite de exposición basado en la salud. El OEL final seleccionado fue de 0.1 mg/m^3 , que se obtuvo de la modificación del Nivel sin efecto derivado (DNEL) más bajo a largo plazo para trabajadores. Se estima que este OEL ofrece una protección adecuada y está destinado a

aplicarse como una concentración media ponderada en el tiempo para un tiempo laboral de 8 horas.

I.2 FUGACIDAD

En la termodinámica se define a la fugacidad como la medida de la tendencia de una sustancia a escapar de la fase que se encuentra a otra dependiendo de factores externos y suponiendo una presión y temperatura fijas. El término fue introducido por el químico Gilbert N. Lewis en su obra *The osmotic pressure of concentrated solutions and the laws of the perfect solution* de 1908.

El Dr. Donald Mackay retomó la definición para investigaciones de modelación de transferencia y destino de contaminantes orgánicos en el medio y desarrolló junto con sus colaboradores el modelo de fugacidad. Asentando que la fugacidad evalúa la distribución de equilibrio y la tendencia de las sustancias químicas a escapar entre fases.

I.3 TRATAMIENTO DE AGUA RESIDUAL

Se le conoce como aguas residuales a las aguas de uso cuya calidad ha sido afectada negativamente por actividades humanas. La comisión Nacional del Agua (CONAGUA) clasifica a las descargas de aguas residuales en municipales y no municipales. Las municipales son generadas en los núcleos de población y colectadas en los sistemas de alcantarillado urbanos y rurales, las no municipales son aquellas generadas por otros usos, como puede ser la industria autoabastecida y que se descargan directamente a cuerpos de agua nacionales sin ser colectadas por sistemas de alcantarillado. (CONAGUA, 2017)

El tratamiento de las aguas residuales busca mejorar la calidad del agua para su reincorporación a los mantos acuíferos o a los sistemas de agua potable. (Ceja, 2019). Para valorar la calidad del agua se toman en cuenta tres indicadores:

- Demanda bioquímica de oxígeno (DBO₅), indicador de la materia orgánica que disminuye el oxígeno en el agua.
- Demanda química de oxígeno (DQO), que se utiliza como indicador de contaminantes de descargas no municipales, es decir provenientes de descargas industriales.
- Sólidos suspendidos totales (SST), que provienen principalmente de las aguas residuales y la erosión del suelo.

El tratamiento de las aguas residuales es un proceso con el que es posible eliminar contaminantes del agua a nivel físico, biológico y químico. Consta de varias etapas (operaciones

unitarias) que pretenden eliminar sólidos, reducir materia orgánica y contaminantes del agua, así como restaurar la presencia de oxígeno en la misma.

Este proceso consta de una serie de etapas y no estrictamente de las mismas para todos los tipos de aguas residuales. Los tipos de tratamiento dependerá del tipo de residuo que se desea eliminar en el agua residual.

Las fases generales de un sistema de tratamiento son:

1. Pretratamiento: se llevan a cabo operaciones físicas y mecánicas para remover los componentes de mayor tamaño. Puede incluir equipos como los descritos en la Tabla 12:

Tabla 12

Equipos usados para el pretratamiento

EQUIPO	OBJETIVO
Rejas o tamices	Eliminación de sólidos gruesos
Trituradores	Desintegración de sólidos
Desarenadores	Eliminación de arenas y gravilla
Desengrasadores	Eliminación de aceites y grasas

Nota. Fuente: (Díaz Ruiz, 2013)

2. Tratamiento primario: Es de carácter fisicoquímico, busca reducir la materia suspendida mediante procesos como precipitación, sedimentación o algunos tipos de oxidación química. El propósito del tratamiento primario es generar un líquido homogéneo que pueda ser tratado biológicamente en la siguiente fase.

La mayoría de las plantas de tratamiento tienen una etapa de sedimentación donde el agua residual pasa por tanques circulares o rectangulares llamados clarificadores/sedimentadores primarios

3. Tratamiento secundario: Es un proceso de naturaleza biológica (aerobia o anaerobia) en la que se emplean microorganismos, principalmente bacterias, para eliminar cualquier contaminación orgánica disuelta. Los microorganismos emplean la materia orgánica como fuente de energía y de carbono para su crecimiento, así como de nutrientes como el nitrógeno y fósforo.

La digestión anaerobia se lleva a cabo en ausencia de oxígeno, la materia orgánica se transforma en biomasa y compuestos volátiles como una mezcla de metano y CO₂. Se puede hacer mediante un Reactor Anaerobio de Flujo Ascendente (RAFA).

El procedimiento aerobio se realiza en un Reactor aerobio de lodos activados. El lodo se desarrolla inicialmente por aireación prolongada bajo ciertas condiciones que favorecen el crecimiento de los microorganismos.

Elementos básicos de las instalaciones del proceso de lodos activados:

- a. Tanque de aireación. Es donde el desagüe y los microorganismos (incluyendo retorno de los lodos activados) son mezclados.
 - b. Tanque sedimentador. El desagüe mezclado procedente del tanque es sedimentado separando los sólidos suspendidos (lodos activados), obteniéndose un desagüe tratado clarificado.
 - c. Equipo de inyección de oxígeno. Para activar las bacterias heterotróficas.
 - d. Sistema de retorno de lodos. El propósito de este sistema es el de mantener una alta concentración de microorganismos en el tanque de aireación. Una gran parte de sólidos biológicos sedimentables son retornados al tanque de aireación.
 - e. Exceso de lodos y su disposición. El exceso de lodos, debido al crecimiento bacteriano en el tanque de aireación, es eliminado, tratado y dispuesto.
4. Manejo de biosólidos: los lodos excedentes se digieren (por incineración, oxidación o digestión aeróbica), deshidratan y almacenan para su posterior manejo.
 5. Desinfección: se inactivan bacterias, virus y cualquier patógeno para evitar daños a la salud en humanos. Los desinfectantes comúnmente usados son cloro-gas, hipoclorito de calcio, hipoclorito de sodio, ozono y luz ultravioleta.
 6. Producto final: el agua depurada se utiliza para fines agrícolas y ganaderos en su mayoría y el resto retorna al medio ambiente.

Ceja (2019) en su nota para la Oficina de Información Científica y Tecnológica para el Congreso de la Unión (INCYTU), menciona que México es el segundo país (después de China) que utiliza más “aguas crudas”, sin tratar, para riego. Éstas pueden acarrear grandes cantidades de organismos patógenos, metales pesados y residuos de productos de limpieza y aseo personal que provocan problemas de salud, como la resistencia bacteriana a los antibióticos por mencionar un ejemplo.

I.3.1 BIODEGRADABILIDAD EN EL MEDIO ACUÁTICO

La biodegradabilidad es parte de uno de los principales procesos de transformación de los compuestos xenobióticos en el medio acuático. Durante este proceso, los organismos ocupan estos compuestos como fuente de energía en procesos catabólicos o como sustrato en

procesos anabólicos. Las bacterias constantemente desarrollan nuevas rutas catabólicas de degradación para nuevos contaminantes con el propósito de usarlos como fuentes de carbono, energía, nutrientes o sólo para desintoxicarlos.

De acuerdo con (Ríos Ruiz, 2014), en la biodegradación de compuestos orgánicos intervienen numerosas variables, por ejemplo, las características físico-químicas del medio (oxígeno disuelto, temperatura, pH, luz, concentración de nutrientes, etc.) las características fisicoquímicas del compuesto (estructura, solubilidad, concentración, etc.) y/o los microorganismos presentes (tipos, concentración, etc.)

La primera transformación que ocurre en los tensioactivos (en este caso, los quats) en el medio ambiente, es la degradación mediante actividad microbiológica, contribuyendo a su eliminación y por tanto reduciendo su impacto en el medio. Es un proceso de gran importancia para el tratamiento de estos compuestos en las PTAR. Además, la biodegradabilidad de una sustancia se considera uno de los criterios más importantes para predecir su comportamiento en el medio ambiente. (Ríos Ruiz, 2014).

1.4 ESTIMACIÓN *IN SILICO*

Con la invención de la computadora en la década de los cuarenta y el continuo avance de la tecnología, ahora es posible recrear fenómenos naturales de alta complejidad o que tienen una gran cantidad de variables por medio de las computadoras. A este método de estudio se le nombra modelos *in silico*, haciendo referencia a la estructura interna de las computadoras que está hecha de un 90% de materiales de sílice. (Scior, Martínez, & Salinas, 2007)

En opinión de (Fina, Lombarte, & Rigalli, 2013), este tipo de modelos no tienen desventajas, no producen grandes gastos y permiten progresar intelectualmente sobre cierto fenómeno, considerando las variables que puedan influir sobre él. Estos modelos computacionales permiten simular situaciones reales, modificando las variables en un amplio rango de valores y compararlos con los valores reales.

1.5 MODELOS MULTIMEDIA

Los modelos multimedia se desarrollaron rápidamente en la década de los 80's, son modelos matemáticos usados para la descripción del comportamiento químico de las sustancias. Estos modelos se construyeron considerando que los factores ambientales y las propiedades fisicoquímicas determinaban el destino, transporte y transformación de las sustancias químicas. Se incluyen aquellos procesos más importantes de transporte y transformación dentro de los compartimentos y entre ellos.

Era de esperarse que los modelos multimedia para sustancias químicas fueran aplicados abundantemente en las investigaciones ecológicas y medioambientales, como los estudios biogeoquímicos de contaminantes, la evaluación de riesgos ecológicos y la gestión medioambiental. Se propusieron múltiples tipos de modelos multimedia, sin embargo, los modelos de fugacidad son uno de los tipos más exitosos debido a su simplicidad en la estructura y accesible parametrización. (Kong, et al., 2016)

I.5.1 MODELOS DE FUGACIDAD

En general, los modelos de fugacidad predicen la partición de un compuesto orgánico en un entorno evaluativo. De acuerdo con Kong, et al. (2016), existen cuatro niveles en el modelo de fugacidad en total (Niveles I-IV) con una complejidad creciente.

- El nivel I es para un sistema en equilibrio, estable y no fluido;
- El nivel II es un sistema en equilibrio, estable y fluido;
- El nivel III es un sistema en desequilibrio, estable y fluido;
- El Nivel IV es un sistema sin equilibrio, no estable y fluido.

En una simulación de Nivel III, la sustancia química se descarga de forma continua hasta alcanzar una condición de estado estacionario en la que las tasas de entrada y salida son las mismas. Los procesos de pérdida son reacciones de degradación y advección.

El balance de masas se aplica no sólo al sistema en su conjunto, sino a cada compartimento. Las tasas de transporte entre medios se calculan utilizando valores D que contienen información sobre los coeficientes de transferencia de masa, las áreas, las tasas de deposición y resuspensión, las tasas de difusión y las tasas de escorrentía del suelo.

Los balances de masas se calculan para los cuatro compartimentos a granel: aire (gas + aerosol), agua (solución + sedimento en suspensión + biota), suelo (sólidos + aire + agua) y sedimento (sólidos + agua de poros). El equilibrio existe en el sistema, pero no entre los compartimentos. (TRENT UNIVERSITY)

I.6 MODELOS QSAR.

Un SAR es una relación cualitativa que refiere una subestructura con la presencia o ausencia de una propiedad o actividad de interés (ECHA, 2016). El objetivo del desarrollo de los SAR es poder utilizarlos para predecir la actividad de una sustancia química de la que se carece de datos, comparando su estructura con una sustancia química con datos experimentales que se asocian a una actividad específica (EPA, 2020).

La ECHA (2016) menciona que una de las primeras aplicaciones de la química computacional fue la predicción de la actividad biológica basada en la estructura química, mediante los modelos QSAR por las siglas en inglés de Quantitative Structure-Activity Relationships.

La técnica de un QSAR consiste en la construcción de un modelo matemático relacionando por medio de herramientas estadísticas la estructura química de una serie de moléculas (caracterizadas previamente por una serie de descriptores moleculares numéricos) con una propiedad fisicoquímica o actividad biológica. Una vez se ha establecido dicha correlación, la misma puede usarse para predecir la propiedad/actividad en nuevas moléculas cuya estructura química sea conocida (Gonzalbes, de Julián-Ortiz, & Fito-Lopez, 2014).

El modelado QSAR se basa en la premisa de que compuestos estructuralmente similares exhiben efectos biológicos similares, a menudo denominados principio de propiedad de similitud (PPS). El PPS postula un vínculo conceptual entre la similitud molecular y la actividad biológica e implica que los cambios graduales en la estructura del compuesto van acompañados de cambios graduales en la potencia. (Muratov, y otros, 2020)

I.7 EPI Suite™

Es un conjunto de programas de estimación de propiedades fisicoquímicas y destino ambiental desarrollado por la oficina de prevención de la contaminación de la Agencia de Protección Ambiental de EEUU y Syracuse Research Corporation (SRC) para detectar nuevas sustancias químicas que carecen de datos experimentales basados en los cálculos. EPI Suite™ está vinculada a la base de datos PHYSPROP mantenida por la Corporación de Investigación de Syracuse, que contiene datos de medición en más de 40.000 productos químicos (EPA, 2022).

La Interfaz de EPI Suite™ incluye trece programas independientes que se mencionan a continuación:

- AOPWIN - estima las tasas de oxidación atmosférica
- BCFBAF - estima el factor de bioconcentración (BCF) y la tasa de biotransformación (kM)
- BioHCwin - estima la biodegradación de los hidrocarburos
- BIOWIN - estima la probabilidad de biodegradación
- ECOSAR - estima la toxicidad acuática (LD50, LC50)
- HENRYWIN - estima la constante de la ley de Henry
- HYDROWIN - estima las tasas de hidrólisis acuosa (catalizada por ácidos y bases)
- KOAWIN - estima el coeficiente de partición octanol-aire

- KOCWIN - estima el coeficiente de sorción del suelo (Koc)
- KOWWIN - estima el coeficiente de partición octanol-agua
- MPBPVP - estima el punto de fusión, el punto de ebullición y la presión de vapor (también denominado MPBPWIN)
- WSKOWWIN - estima la solubilidad en agua (a partir del coeficiente de partición octanol-agua)
- WATERNT: estima la solubilidad en agua (utilizando la metodología de los fragmentos de átomos)

Además, el programa cuenta con cuatro modelos totalmente dependientes de la interfaz, los cuales son:

- WVOLWIN - Modelo de tasa de volatilización del agua (archivo de ayuda WVOLWIN)
- STPWIN - Modelo de planta de tratamiento de aguas residuales
- AEROWIN - sorción a partículas atmosféricas (archivo de ayuda AEROWIN)
- LEVEL3NT - Modelo de fugacidad de nivel III

I.7.1. Características generales de EPI Suite™

Los valores disponibles en la base de datos de PHYSPROP que usa EPI Suite™, se cargan periódicamente desde la base de datos de Syracuse Research Corporation. Ésta comenzó como una base de datos de propiedades físicas de productos químicos evaluados para el Banco de Datos de sustancias Peligrosas

Los valores medidos en la base de datos de PHYSPROP (a la que se accede en EPI Suite™) se cargan periódicamente desde la base de datos mantenida en Syracuse Research Corporation, la cual ha sido construida activamente durante las últimas dos décadas. Comenzó como una base de datos de propiedades físicas de productos químicos evaluados por SRC para el Banco de Datos de Sustancias Peligrosas (HSDB, por las siglas en inglés de Hazardous Substances Data Bank) (EPI Suite™, 2022). Esta base de datos se centra en a toxicología de sustancias químicas potencialmente peligrosas y proporciona información sobre exposición humana, higiene industrial, procedimientos de manejo en emergencias, destino ambiental, requerimientos regulatorios, nanomateriales y áreas relacionadas; se encuentra disponible en la Biblioteca Nacional de Medicina (NLM) de Estados Unidos. (National Center of Biotechnology Information, 2021).

CAPÍTULO II. METODOLOGÍA

II.1 ESTIMACIÓN DEL DESTINO AMBIENTAL CON EPI Suite™

El software trabaja con tres datos de entrada principales:

- El registro del Servicio de Resúmenes Químicos, es decir el número CAS (Chemical Abstracts Service), este campo es obligatorio.
- La notación SMILES (Simplified Molecular Input Line Entry System), es una notación química que permite a un usuario representar una estructura química de una manera que puede ser utilizada por el ordenador, al igual que el CAS, este campo es obligatorio.
- Nombre químico: el programa cuenta con una base de datos de nombres y sinónimos de sustancias químicas, asociada a la base de datos SMILECAS, este campo no es necesario para realizar la estimación.

Este programa es una herramienta de predicción diseñada para examinar sustancias rápidamente en cuanto a su potencial de liberación y exposición; sin embargo, algunas de sus limitaciones incluyen que los datos predichos no deben utilizarse como datos experimentales reales. Además de que el dominio previsto de EPI Suite™ solo considera los productos químicos orgánicos, dejando fuera los inorgánicos y organometálicos.

VALORES DE ENTRADA

Para la estimación del destino ambiental de los quats en estudio, EPI Suite™ exportará los datos de sus propiedades físicas de la base de PHYSPROP, sin embargo, se requerirá también de algunos datos que pueden no estar contenidas en esta base, como lo son el punto de fusión, la presión de vapor, la constante de Ley de Henry, la solubilidad en agua y el coeficiente de partición octanol-agua; en el caso de que el usuario no introduzca estos valores manualmente, EPI Suite™ estimará estos valores mediante programas contenidos en la misma interfaz.

PROCESO DE SIMULACIÓN

Para iniciar el proceso de la simulación en el Programa de EPI Suite™, una vez instalado, se abre la pantalla de inicio del mismo y se introduce obligatoriamente el Número CAS y Notación SMILES de la sustancia a estudiar, y opcionalmente el Nombre químico.

El primer paso (Figura 8), es introducir el Número CAS de la sustancia (1), se busca la sustancia seleccionando el botón “Search CAS” (2). Y se selecciona la sustancia deseada, automáticamente aparecerán llenos los apartados de “Input Smiles” y “Input Chem Name”.

Otras opciones para iniciar la simulación son introducir el Nombre químico de la sustancia y seleccionar el botón “Name Lookup”, se abre una lista de químicos y se selecciona el deseado, corroborando que el Número CAS sea correcto, tal como se muestra en la Figura 9.

O mediante el botón “Draw”, en la que se abre otra pestaña para dibujar manualmente la sustancia deseada. (Figura 10).

Figura 8

Pasos 1, 2 del proceso de simulación

The screenshot shows the EPI Suite - Welcome Screen interface. At the top, there is a menu bar with options: File, Edit, Functions, Batch Mode, Show Structure, Output, Fugacity, STP, and Help. Below the menu bar is a blue header with the text "EPI Suite - Welcome Screen". The main interface has several buttons: PhysProp, Previous, Get User, Save User, Search CAS (highlighted with a red box and a '2'), and Calculate. There is also a "Clear Input Fields" button. Below these buttons are input fields: "Input CAS #" (containing "68424-85-1" and highlighted with a red box and a '1'), "Input Smiles:" (containing "c1ccccc1CN(CL)(CCCCCCCCCCCC)(C)(C)"), and "Input Chem Name:". There is also a "Name Lookup" button.

Nota. Fuente: EPI Suite – Welcome Screen (EPA, 2022)

Figura 9

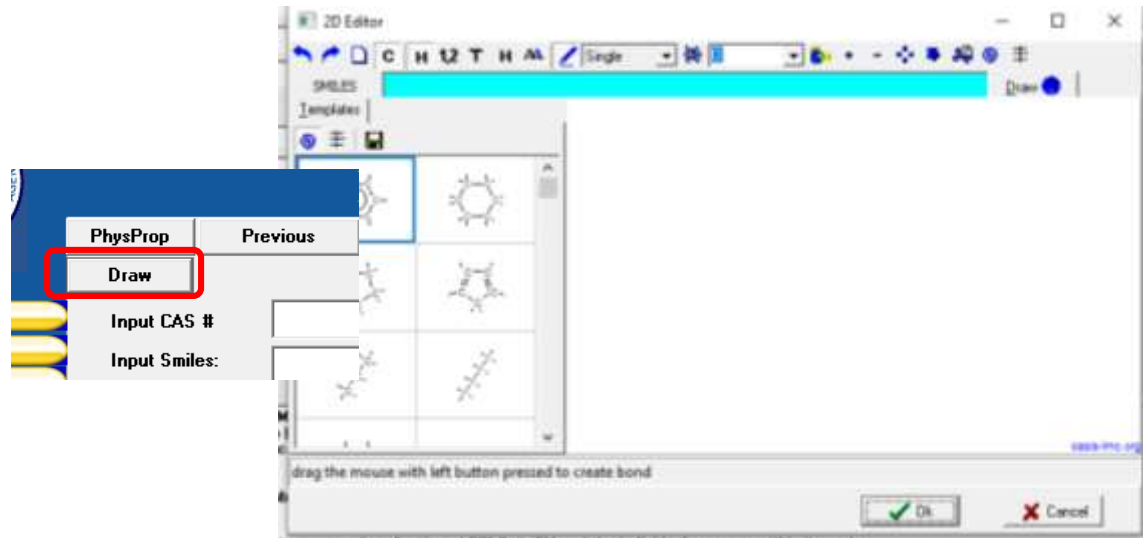
Opción “Name Lookup” para el inicio del proceso de simulación.

The screenshot shows the EPI Suite - Welcome Screen interface. At the top, there is a menu bar with options: PhysProp, Previous, Get User, Save User, Search CAS, and Calculate. Below the menu bar is a blue header with the text "EPI Suite - Welcome Screen". The main interface has several buttons: PhysProp, Previous, Get User, Save User, Search CAS, and Calculate. There is also a "Draw" button. Below these buttons are input fields: "Input CAS #", "Input Smiles:", and "Input Chem Name:" (containing "alkyl dimethyl ethyl ammonium chloride"). There is also a "Name Lookup" button (highlighted with a red box). Below the input fields are several output fields: "Henry LC:" (with a unit of "atm-m³ /mole"), "Melting Point:" (with a unit of "Celsius"), "Water Solubility:" (with a unit of "mg/L"), and "Vapor Pressure:" (with a unit of "mm Hg").

Nota. Fuente: EPI Suite – Welcome Screen (EPA, 2022)

Figura 10

Opción "Draw" para el inicio del proceso de simulación.



Nota. Fuente: EPI Suite – Draw Screen (EPA, 2022)

El siguiente paso después de tener los tres primeros valores, según sea el caso, es introducir manualmente los valores que se muestran encerrados en un cuadro rojo, en la Figura 11.

Figura 11

Paso 3 del proceso de simulación

EPI Suite - Welcome Screen			
PhysProp	Previous	Get User	Save User
Draw		Search CAS	Calculate
Clear Input Fields	Output <input type="radio"/> Full <input checked="" type="radio"/> Summary		
Input CAS #	68424-85-1		
Input Smiles:	c1cccc1C[N+](CCCCCCCCCCCC)(C)(C).[Cl-]		
Input Chem Name:	Quaternary ammonium compounds, benzyl-C12-16-alkyldimethylchlorides		
Name Lookup			
Henry LC:	<input type="text"/>	atm-m ³ /mole	Water Solubility: <input type="text"/> mg/L
Melting Point:	<input type="text"/>	Celsius	Vapor Pressure: <input type="text"/> mm Hg
Boiling Point:	<input type="text"/>	Celsius	Log Kow: <input type="text"/>
	River	Lake	
Water Depth:	<input type="text"/> 1	<input type="text"/> 1	meters
Wind Velocity:	<input type="text"/> 5	<input type="text"/> 0.5	meters/sec
Current Velocity:	<input type="text"/> 1	<input type="text"/> 0.05	meters/sec

Nota. Fuente: EPI Suite – Welcome Screen (EPA, 2022)

En el caso de que no se introduzcan por el usuario, EPI Suite™ los exportará de la base de datos, o los estimará con otros programas de la interfaz.

El siguiente paso para la simulación será configurar los programas de LEVEL3NT y STPWIN. Véase los apartados II.2 y II.3 para visualizar los siguientes pasos de la simulación.

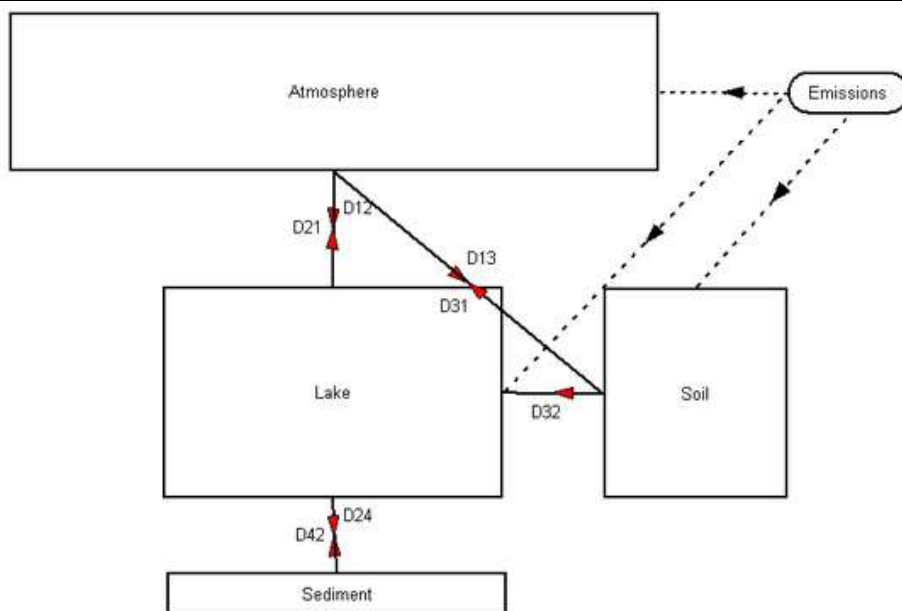
II.2 MODELO DE FUGACIDAD NIVEL III DE EPI Suite™ (LEVEL3NT)

El modelo de fugacidad contenido en la interfaz de EPI Suite™ es una adaptación del modelo original desarrollado por el Dr. Donald Mackay y sus colaboradores (1992), ésta versión usa los mismos valores por defecto y ecuaciones del modelo original.

El entorno del modelo consta de 4 compartimentos principales (aire, agua, sedimentos y suelo), pero también se consideran sub-compartimentos específicos como una fase de aerosol, sólidos suspendidos y fase de biota. El modelo asume una temperatura fija de 25°C y predice el transporte de masas entre los compartimentos a través de la volatilización, la difusión, la deposición y la escurrentía.

Figura 12

Diagrama del modelo de Fugacidad nivel III de EPI Suite™



Nota. Fuente: EPA, (2022) "Level III Fugacity Model"

Un modelo de nivel III hace referencia a condiciones de estado estacionario, pero no de equilibrio, lo que significa que el cambio en la concentración de una sustancia química en cada

compartimento con respecto al tiempo se aproxima a cero. No se considera que exista un equilibrio común entre las fases por lo que si una sustancia es emitida en un compartimento ésta puede transferirse a los otros.

La pérdida de sustancia se debe a dos procesos, la reacción y la advección. La reacción es la degradación biótica o abiótica de la sustancia que se calcula mediante las vidas medias, para cada compartimento principal. La advección es la eliminación de la sustancia de un compartimento a través de otras pérdidas diferentes de a reacción, esta sólo se considera para los compartimentos de aire, agua y sedimentos.

La Tabla 13 resume las dimensiones por defecto de los compartimentos para el modelo.

Tabla 13

Dimensiones definidas para cada compartimento

	Aire	Agua	Suelo	Sedimentos
Volumen (m ³)	1x10 ¹⁴	2x10 ¹¹	1.8x10 ¹⁰	5x10 ⁸
Profundidad (m)	1000	20	0.2	0.05
Área (m ²)	1x10 ¹¹	1x10 ¹⁰	9x10 ¹⁰	1x10 ¹⁰

Nota. Fuente: EPA, (2022) "Level III Fugacity Model"

La Tabla 14 muestra otras propiedades del modelo que no pueden ser modificadas por el usuario.

Tabla 14

Propiedades definidas para cada compartimento

	Aire	Agua	Suelo	Sedimentos
Fracción volumétrica de aerosol	2.00 x10 ⁻¹¹			
Partículas suspendidas		5.00 x10 ⁻⁶		
Peces		1.00 x10 ⁻⁶		
Aire			0.2	
Agua			0.3	0.8
Sólidos			0.5	0.2
Densidad (kg/m ³)				

	Aire	Agua	Suelo	Sedimentos
Granel	1.19	1000	1500	1280
Aire puro	1.19			
Aerosol	2000			
Líquido		100		
Partículas suspendidas		1500		
Peces		1000		
Aire			1.19	
Agua			1000	1000
Sólidos			2400	2400

Nota. Fuente: EPA, (2022) "Level III Fugacity Model"

Además de las propiedades previamente citadas, el modelo en la interfaz usa valores de concentración predeterminados para carbono orgánico y lípidos siendo 0.2, 0.05, 0.02, y 0.04 g/g para partículas suspendidas, peces, sólidos en suelo y sólidos en sedimento respectivamente.

A. Proceso de transporte en el modelo

Transporte de aire a agua (D_{12})

El modelo asume que el transporte de aire a agua se rige por cuatro procesos: difusión, disolución en lluvia (en fase gaseosa), deposición húmeda y deposición seca para compuestos en fase de partículas.

Para la difusión se sigue un enfoque de dos películas que está dado por la Ecuación 1:

$$D_{VW} = \frac{A_W}{(1/U_1 * Z_1) + (1/U_2 * Z_2)} \quad \text{Ec. 1}$$

Donde:

A_W = área del cuerpo de agua

U_1 = coeficiente de transferencia de masa (MTC) en el lado aire-agua

U_2 = coeficiente de transferencia de masa en el lado agua-aire

Z_1 y Z_2 = capacidades de fugacidad en aire (excepto aerosoles) y fugacidad en agua (excepto sólidos suspendidos y biota), respectivamente.

Estas y otras capacidades de fugacidad son definidas en la Tabla 15. Las capacidades de fugacidad de los sub-compartimentos son usadas para desarrollar la capacidad de fugacidad a granel para cada uno de los compartimentos principales.

Tabla 15

Definición de capacidades de fugacidad

$$Z_1 = 1/RT$$

$$Z_2 = 1/H$$

$$Z_3 = [(Z_2)(\rho_3)(f_3)(Koc)]/1000$$

$$Z_4 = [(Z_2)(\rho_4)(f_4)(Koc)]/1000$$

$$Z_5 = [(Z_2)(\rho_5)(f_5)(Koc)]/1000$$

$$Z_6 = [(Z_2)(\rho_6)(L)(Kow)]/1000$$

$$Z_7 = [(Z_1)(6x10^6)]/P_{sl}$$

$$Z_{aire} = [Z_1 + (2x10^{-11})(Z_7)]$$

$$Z_{agua} = [Z_2 + (5x10^{-6})(Z_5) + 1x10^{-6}(Z_6)]$$

$$Z_{suelo} = [0.2(Z_1) + 0.3(Z_2) + 0.5(Z_3)]$$

$$Z_{sedimento} = [0.8(Z_2) + 0.24(Z_4)]$$

Nota. Fuente: EPA, (2022) "Level III Fugacity Model"

Donde:

R = constante de los gases

T = temperatura

H = constante de la Ley de Henry

ρ_i = densidad de la fase i

f_i = fracción de carbono orgánico en la fase i

Koc = coeficiente de adsorción del suelo

Kow = coeficiente de partición octanol-agua

P_{sl} = presión de vapor refrigerada por líquido

La disolución de la lluvia de la sustancia en fase de vapor se calcula a partir de la tasa de precipitación (U_3), con unidades de metros/año; el proceso de transporte se describe en la Ecuación 2:

$$D_{RW} = [(U_3)(A_W)(Z_2)] \quad \text{Ec. 2}$$

Las deposiciones húmedas y secas dependen de la velocidad de deposición de aerosoles y están dadas por:

$$D_{QW} = [(U_4)(A_W)(Z_7)] \quad \text{Ec. 3}$$

El transporte global del aire al agua resulta de la suma de las ecuaciones:

$$D_{12} = [D_{VW} + D_{RW} + D_{QW}] \quad \text{Ec. 4}$$

Para el transporte del agua al aire, sólo se considera el proceso de volatilización y equivale a la inversa de la difusión por la absorción

$$D_{21} = D_{VW} \quad \text{Ec. 5}$$

Transporte de aire a suelo (D_{13})

Los procesos de transporte involucrados en el flujo de la sustancia química hacia y desde el suelo al compartimento de aire son similares a los del aire al agua. El transporte por difusión hacia y desde el suelo viene dado por:

$$D_{VS} = \frac{1}{\left(\frac{1}{D_S+1}\right)/(D_W+D_A)} \quad \text{Ec. 6}$$

$$D_S = (U_7)(A_S)(Z_1) \quad \text{Ec. 7}$$

$$D_S = (U_6)(A_S)(Z_2) \quad \text{Ec. 8}$$

$$D_S = (U_5)(A_S)(Z_1) \quad \text{Ec. 9}$$

Donde:

A_S = área horizontal de la capa de suelo

U_5, U_6, U_7 = son los coeficientes de transferencia de masa para la difusión suelo-aire, suelo-agua y suelo-aire, respectivamente.

El transporte de una sustancia química a través de la disolución por lluvia de los compuestos en fase de vapor se describe por:

$$D_{RS} = (U_3)(A_S)(Z_7) \quad \text{Ec. 10}$$

La deposición húmeda y seca de compuestos en fase de partículas al compartimento del suelo viene dada por:

$$D_{QS} = (U_4)(A_S)(Z_7) \quad \text{Ec. 11}$$

El transporte global es el resultado de la suma de dichos procesos individuales

$$D_{13} = D_{VS} + D_{RS} + D_{QS} \quad \text{Ec. 12}$$

Para el transporte de suelo al aire, sólo se considera la volatilización y es equivalente a la inversa de la difusión por absorción:

$$D_{31} = D_{VS} \quad \text{Ec. 13}$$

Transporte de agua a sedimento (D_{24})

Para la modelación de la transferencia del agua al sedimento se consideran dos procesos, la difusión y la deposición. La deposición de una sustancia química desde la columna de agua hasta el sedimento se caracteriza por un MTC (U_8) equivalente a la difusividad molecular dividida por una longitud de trayectoria. La tasa de flujo de deposición volumétrica en el modelo original de Mackay et al. (1992) supone que ocurre a 5000 m³/h, que se utiliza para calcular el MTC (U_9). La transferencia global viene dada por:

$$D_{24} = (U_8)(A_W)(Z_2) + (U_9)(A_W)(Z_5) \quad \text{Ec. 14}$$

Transporte de sedimento a agua (D_{42})

El movimiento del sedimento al agua considera la tasa de resuspensión del sedimento con el MTC apropiado (U_{10})

$$D_{42} = (U_8)(A_W)(Z_2) + (U_{10})(A_W)(Z_4) \quad \text{Ec. 15}$$

Transporte del suelo al agua (D_{32})

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

$$D_{32} = (U_{11})(A_S)(Z_2) + (U_{12})(A_S)(Z_3) \quad \text{Ec. 16}$$

Donde U_{11} y U_{12} son los MTC para el escurrimiento suelo-agua y suelo-sólido, respectivamente.

Los valores de cada MTC usados en el modelo se proporcionan a continuación, son valores por defecto.

Tabla 16*Valores de MTC para procesos de transporte intermedio en el modelo*

MTC	DESCRIPCIÓN	VALOR (m/h)
U_1	Lado del aire, aire-agua	5
U_2	Lado de agua, aire-agua	0.05
U_3	Tasa de precipitación	1×10^{-4}
U_4	Deposición de aerosol	6×10^{-10}
U_5	Difusión de la fase aire-suelo	0.02
U_6	Transporte fase agua-suelo	1×10^{-5}
U_7	Capa límite suelo-aire	5
U_8	Sedimento-agua	1×10^{-4}
U_9	Deposición de sedimentos	5×10^{-7}
U_{10}	Resuspensión de sedimentos	2×10^{-7}
U_{11}	Escorrentía de agua del suelo	5×10^{-5}
U_{12}	Escorrentía de sólidos del suelo	1×10^{-8}

Nota. Fuente: EPA, (2022) "Level III Fugacity Model"

B. Procesos de degradación y advección en el modelo.

La degradación normalmente se contabiliza en cada compartimento considerando una única tasa de degradación para la reacción correspondiente (por ejemplo, biodegradación, hidrólisis, etc.). Matemáticamente éstas pérdidas se representan mediante las siguientes ecuaciones:

$$DR_1 = (V_1)(Z_{aire})(k_{aire}) \quad \text{Ec. 17}$$

$$DR_2 = (V_2)(Z_{agua})(k_{agua}) \quad \text{Ec. 18}$$

$$DR_3 = (V_3)(Z_{suelo})(k_{suelo}) \quad \text{Ec. 19}$$

$$DR_4 = (V_4)(Z_{sedimento})(k_{sedimento}) \quad \text{Ec. 20}$$

Donde cada k es una constante de tasa de primer orden. V_1 , V_2 , V_3 y V_4 representan los volúmenes del compartimento de aire, agua, suelo y sedimento respectivamente. Las pérdidas por advección sólo se consideran en el aire, el agua y el sedimento. Se calculan multiplicando

un caudal volumétrico apropiado para un medio en específico, por la correspondiente capacidad de fugacidad de ese medio.

C. Ecuaciones de balance de masa

Se asume que no hay emisiones directas al compartimento de los sedimentos y que el compartimento del suelo no tiene pérdidas por advección. El desarrollo del conjunto de ecuaciones diferenciales para el cambio de concentración con respecto al tiempo en cada uno de los cuatro compartimentos ambientales da como resultado el siguiente sistema de ecuaciones de balance de masas:

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

$$\frac{dC_2}{dT} = V_2 Z_2 \frac{df_2}{dT} = E_2 + f_1 D_{12} + f_3 D_{32} - f_4 D_{42} - f_2 D_{21} - f_2 D_{24} - f_2 DR_2 - f_2 DA_2 \quad \text{Ec. 22}$$

$$\frac{dC_3}{dT} = V_3 Z_3 \frac{df_3}{dT} = E_3 + f_1 D_{13} + f_2 D_{23} - f_3 D_{32} - f_3 DR_3 \quad \text{Ec. 23}$$

$$\frac{dC_4}{dT} = V_4 Z_4 \frac{df_4}{dT} = f_2 D_{24} - f_4 D_{42} - f_4 DR_4 - f_4 DA_4 \quad \text{Ec. 24}$$

Donde:

E_i = tasa de emisión al i -ésimo compartimento ($i = 1, 2, 3, 4$ para aire, agua, suelo y sedimento, respectivamente).

f_i = fugacidad en el i -ésimo compartimento

DA_i = representan pérdidas advectivas en el i -ésimo compartimento.

Asumiendo 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 aproxima a cero (el lado izquierdo de las ecuaciones 21-24 se acerca a cero), es posible resolver la fugacidad en cada compartimento. Estas soluciones son:

$$f_1 = \frac{(J_1 + f_2 J_2)}{J_3} \quad \text{Ec. 25}$$

$$f_2 = \frac{[E_2 + (J_1 J_4 / J_3) + (E_3 D_{32} / DT_3)]}{[DT_2 - (J_2 J_4 / J_3) - (D_{24} D_{42} / DT_4)]} \quad \text{Ec. 26}$$

$$f_3 = \frac{(E_3 + f_1 D_{13})}{DT_3} \quad \text{Ec. 27}$$

$$f_4 = \frac{f_1 D_{24}}{DT_4} \quad \text{Ec. 28}$$

En este set de ecuaciones los valores de DT_i están dados por:

$$DT_1 = DR_1 + DA_1 + D_{12} + D_{13} \quad \text{Ec. 29}$$

$$DT_2 = DR_2 + DA_2 + D_{21} + D_{23} + D_{24} \quad \text{Ec. 30}$$

$$DT_3 = DR_3 + D_{31} + D_{32} \quad \text{Ec. 31}$$

$$DT_4 = DR_4 + DA_4 + D_{42} \quad \text{Ec. 32}$$

Y los valores de J_i están representados por:

$$J_1 = \frac{E_1}{DT_1} + \frac{E_3 D_{31}}{DT_3 DT_1} \quad \text{Ec. 33}$$

$$J_2 = \frac{D_{21}}{DT_1} \quad \text{Ec. 34}$$

$$J_3 = 1 - \frac{D_{31} D_{13}}{DT_1 DT_3} \quad \text{Ec. 35}$$

$$J_4 = D_{12} + \frac{D_{32} D_{13}}{DT_3} \quad \text{Ec. 36}$$

Se calcula la concentración de la sustancia química en estado estacionario en cada medio ambiental (aire, agua, suelo, sedimento), mediante la relación de que la concentración en un compartimento particular es equivalente a la fugacidad multiplicada por la capacidad de fugacidad apropiada $C_i = f_i Z_i$

PARÁMETROS DE ENTRADA PARA EL MODELO LEVEL3NT

El modelo usa una combinación de parámetros por defecto y otros datos de entrada que pueden ser definidos por el usuario o estimados con otros programas de la interfaz; dichos parámetros de entrada son los valores de vida media de la sustancia química, valores de emisiones, valores de advección y valores de coeficiente de adsorción de carbono orgánico (Koc) del suelo.

Valores de vida media: Estos datos son necesarios para el modelo. En caso de requerir estimarlos con otros programas de la interface, se usan los programas BIOWIN (para agua, suelo y sedimentos), AOPWIN (para aire), y en ocasiones el HYDROWIN dependiendo del compuesto químico a evaluar.

Valores de emisión: Las tasas de emisión ambiental se consideran de 1000 kg/hora al aire, agua y suelo (el sedimento tiene un valor de cero); estos son los parámetros por defecto utilizados en el modelo de Mackay y adaptados en EPI Suite™. El usuario puede cambiar los valores de emisión en aire, agua y suelo en el menú del programa. Se puede ejecutar modelo una vez por corrida o múltiples veces (7 veces) por corrida de la interfaz, usando permutaciones de tasas de emisión como 0 o 1000, a excepción de cuando todas las tasas son 0.

Valores de advección: Los tiempos de advección se aplican al aire, al agua y al sedimento con valores establecidos de 100, 1000 y 50.000 horas respectivamente. Estos tiempos de vida se usan para determinar la tasa de flujo advectivo ($m^3/hora$), se calcula dividiendo el volumen del compartimento entre el tiempo de advección. En el modelo de la interfaz estos valores pueden ser modificados por el usuario, en el caso de que no se desee advección en uno o todos los compartimentos, se debe establecer valores grandes como 1×10^{20} para llevar el flujo advectivo a cero.

Coefficiente de carbono orgánico del suelo (Koc): La interfaz tiene tres opciones para la entrada de este valor:

- La estimación mediante el Índice de Conectividad Molecular de primer orden (ICM) y mediante el log Kow (coeficiente de partición octanol-agua). (Con el programa KOCWIN)
- Por defecto, el programa de fugacidad selecciona el valor de Koc estimado mediante la conectividad (ICM), ya que se ha demostrado que es ligeramente más preciso que los demás métodos de estimación. (Con el programa KOCWIN)
- Ingreso manual por el usuario

Otros parámetros de entrada: Las propiedades químicas que requiere el modelo son el punto de fusión, la presión de vapor, la constante de la Ley de Henry y el log Kow.

En el modelo original del Mackay y en el adaptado en EPI Suite™, los parámetros de la tasa de lluvia, la deposición de aerosoles, la escorrentía del agua del suelo y los coeficientes de transferencia de masa de difusión son valores por defecto, lo cual simplifica la aplicación de un modelo nivel III como lo es LEVEL3NT.

PROCESO DE SIMULACIÓN (LEVEL3NT)

Una vez que se lleva a cabo la primera parte de la simulación, se selecciona la pestaña de “Fugacity” (4), y en seguida la opción “Half Life Values” (5), de la ventana emergente se selecciona la opción “Use BIOWIN (Ultimate) and AOPWIN estimates” (6), y el botón “EPA Defaults” de la sección “Set Biowin Half-Life Values” (7), después se guardan los cambios con el botón “Accept”.

Figura 13

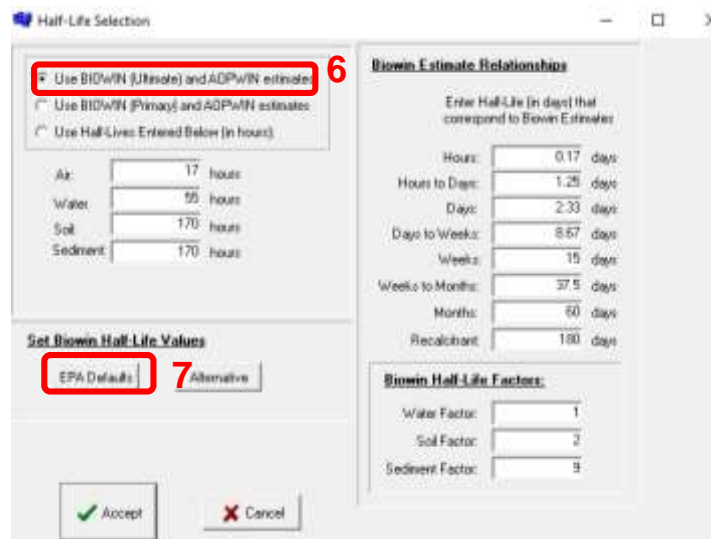
Pasos 4 y 5 del proceso de simulación



Nota. Fuente: EPI Suite – Welcome Screen, Fugacity (EPA, 2022)

Figura 14

Pasos 6 y 7 del proceso de simulación

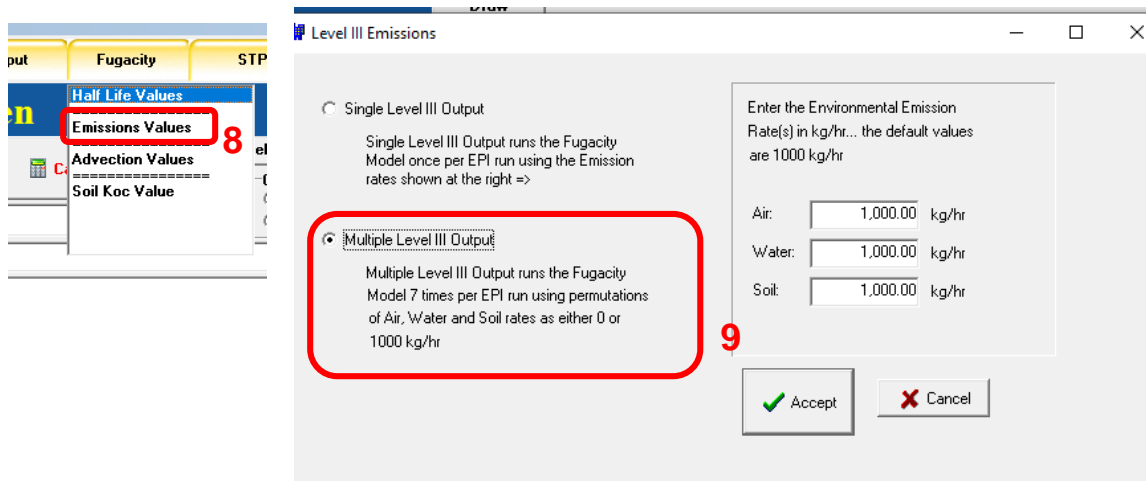


Nota. Fuente: EPI Suite – Half life Selection Screen (EPA, 2022)

De nuevo de la pestaña “Fugacity”, se selecciona “Emissions Values” (8), y se elige la opción “Multiple Level III Output” (9), para observar el comportamiento de las sustancias a diferentes emisiones para cada compartimento y se guarda con “Accept”.

Figura 15

Pasos 8 y 9 del proceso de simulación

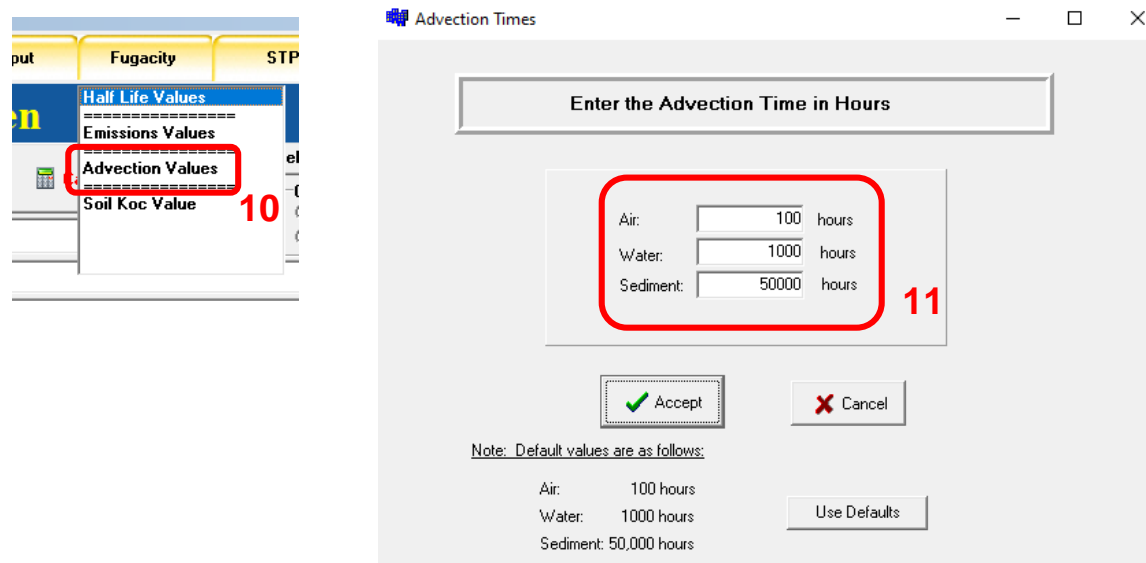


Nota. Fuente: EPI Suite – Level III Emissions Screen (EPA, 2022)

De nuevo de la pestaña “Fugacity”, se selecciona “Advection Values” (10), se dejan los valores por defecto (11), se guarda con el botón “Accept”.

Figura 16

Pasos 10 y 11 del proceso de simulación

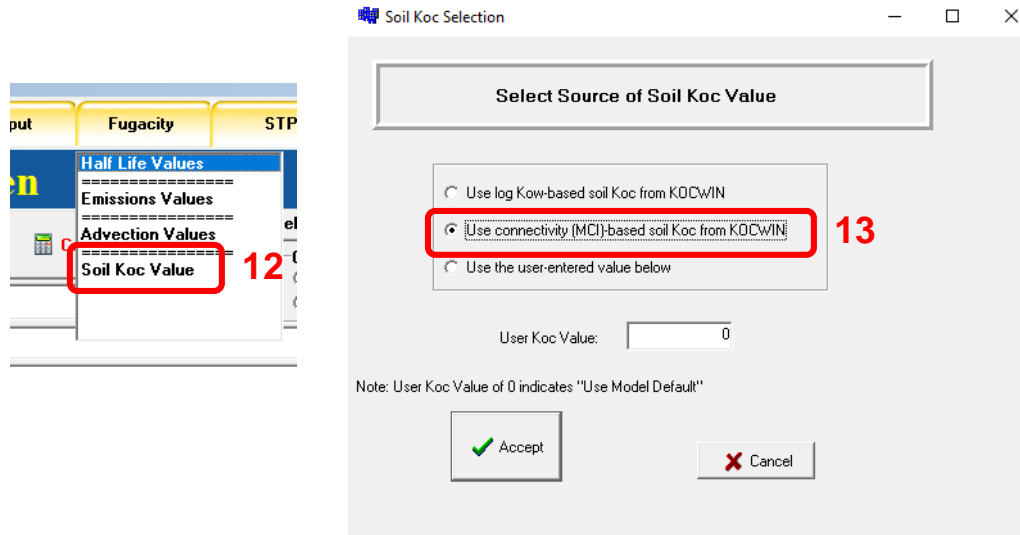


Nota. Fuente: EPI Suite – Advection Times Screen (EPA, 2022)

Finalmente, de la última opción “Soil Koc Value” (12), de la pestaña “Fugacity”, se selecciona la opción “Use connectivity (MCI)-based soil Koc from KOCWIN” (13), y se guardan los cambios “Accept”.

Figura 17

Pasos 12 y 13 del proceso de simulación



Nota. Fuente: EPI Suite – Soil Koc Selection Screen (EPA, 2022)

Véase el apartado II.3 para continuar con el proceso de simulación.

II. 3 MODELO DE REMOCIÓN EN PLANTAS DE TRATAMIENTO DE AGUA RESIDUAL DE LODOS ACTIVADOS DE EPI Suite™ (STPWIN)

STPWIN es una versión del modelo originalmente desarrollado por Mackay y sus colaboradores, es también conocido como Modelo Toronto. Éste se basa en los principios de fugacidad y su intención es predecir el destino de una sustancia química orgánica en un medio de evaluación que en este caso es una planta de tratamiento de agua residual que usa un sistema de lodos activados como tratamiento secundario y que funciona a 25°C. Se evalúa su destino mientras se somete a los diferentes procesos de degradación, eliminación por evaporación, biodegradación, sorción a lodos y su pérdida en el efluente final. Siendo la tasa de biodegradación la variable más crítica e incierta junto con su dependencia a la concentración de biomasa.

Este modelo no proporciona una simulación precisa del comportamiento de una sustancia química en una planta específica, es más un modelo a nivel de cribado que pretende generar estimaciones aproximadas de las proporciones de la sustancia en los procesos de degradación, en los lodos, por evaporación y en el efluente. Al igual que el programa de fugacidad, STPWIN ocupa parámetros de entrada por defecto y otros que pueden ser definidos por el usuario y otros programas de la misma interfaz.

Parámetros de vida media:

Bio P: la vida media de biodegradación (en horas) en el clarificador primario de la PTAR

Bio A: la vida media de biodegradación (en horas) en el tanque de aireación de la PTAR

Bio S: la vida media de biodegradación (en horas) en el tanque de sedimentación final de la PTAR

El modelo contiene tres opciones para seleccionar las vidas medias, siendo la opción 1 la predeterminada. Se puede seleccionar 1, 2 o las 3 simultáneamente.

1. 10.000 horas para Bio P, para Bio A y para Bio S. Estos valores denotan que no hay biodegradación, siendo éste “el peor escenario”.
2. Estimaciones basadas en valores calculados por el programa BIOWIN
3. Valores introducidos por el usuario para Bio P, para Bio A y para Bio S. (En caso de que se cuente con esta información).

Propiedades químicas requeridas por STPWIN

Los valores requeridos son la presión de vapor, la solubilidad en agua y el log Kow. Si estos datos no son introducidos por el usuario, el programa usa bases de datos de valores medidos por los programas KOWWIN (para el log Kow) y HENRYWIN (para la constante de la Ley de Henry), o hace la estimación directa con otros programas por ejemplo MPBPWIN (para la presión de vapor).

Propiedades predeterminadas del sistema de tratamiento de STPWIN

Muchos de los parámetros del modelo son limitados, por ejemplo, las propiedades de la PTAR, las cuales se enlistan a continuación:

- Número de tanques
- Caudal afluente y concentración de sólidos suspendidos volátiles (VSS)
- Coeficientes de transferencia de masa en fase líquida y gaseosa para cada tanque
- Área y profundidad del tanque
- Fracción de biomasa de VSS
- Concentración de VSS en los lodos
- Concentración de VSS en el flujo de salida (ML)
- Tasa de aireación (si aplica)
- Fracción reciclada (si aplica)

La Tabla 17 resume las especificaciones de la planta de tratamiento que se usa para la simulación con STPWIN:

Tabla 17

Propiedades predeterminadas del sistema de tratamiento de STPWIN

PARÁMETRO	TANQUE 1 (Primario)	TANQUE 2 (Aireación)	TANQUE 3 (Sedimentación)
Área del tanque (m ²)	266.7	800	727.3
Profundidad del tanque (m)	3.8	10	3.8
Concentración de VSS (g/m ³)	50,000	--	5,500
Biomasa de VSS (fracción)	0.05	0.0025	0.00055
Concentración de VSS en el flujo de salida (g/m ³)	80.2	2500	15
Tasa de aireación de VSS (m ³ /hr)	--	8960	--
Fracción de flujo afluyente reciclado	--	--	0.8
Fracción de flujo afluyente eliminado	0.0024	--	0.015

Nota. Fuente: EPA (2022). EPI Suite™ “STPWIN model”

Otras propiedades del sistema:

- Flujo afluyente total=1000 m³/hr
- Concentración de sólidos suspendidos volátiles (VSS)=200 g/m³
- Coeficiente de transferencia de masa en fase gaseosa= 5 m/hr
- Coeficiente de transferencia de masa en fase líquida= 0.05 m/hr

Método de la EPA para vidas medias de biodegradación de STP

En el caso de que se conozcan las vidas medias de Bio P, Bio A y Bio S, pueden ser introducidos por el usuario en los campos correspondientes. Por el contrario, si esta información no está disponible se pueden estimar mediante el programa BIOWIN de la misma interfaz.

BIOWIN estima las vidas medias de biodegradación mediante el modelo de encuesta de expertos en biodegradación final usado en el programa BIOWIN3 por Boethling y sus colaboradores (1994), en combinación con el modelo lineal MITI (Ministerio de Industria y Comercio Internacional) de BIOWIN5 por Tunkel y sus colaboradores (2000). BIOWIN3 indica la tasa de biodegradación ambiental de una sustancia química en términos relativos como horas, horas a días, días, días a semanas, etc. Los valores representan la cantidad aproximada de

tiempo necesario para una degradación “completa”. BLOWIN5 indica la probabilidad estimada de que una sustancia supere la prueba de fácil biodegradación para el MITI.

Estas salidas no pueden ser usadas directamente por el modelo STPWIN. Sin embargo, las vidas medias de Bio P, A y S se asignan a la salida del modelo según se muestra en la Tabla 18.

Tabla 18

Vidas medias de biodegradación de BLOWIN

	Bio P	Bio A	Bio S
Biowin3 ≤ semanas y Biowin5 >0.5	10	1	1
Biowin3 ≤ semanas	30	3	3
Biowin5 > 0.5	100	10	10
Biowin3 = semanas-meses	300	30	30
Biowin3 = meses	1000	100	100
Biowin3 = recalcitrante	10000	10000	10000

Nota. Fuente: EPA (2022). EPI Suite™ “STPWIN model”

La proporción por defecto recomendada por Clark et al. (1995), es 10:1:1, sin embargo, el usuario puede introducir cualquier valor de vida media deseado.

El método preliminar de la EPA fue desarrollado mediante un ejercicio de calibración en la que se ejecutó repetidamente EPI Suite™ para un conjunto de 33 sustancias químicas, elegidas de datos de eliminación de PTARs que tratan principalmente aguas residuales domésticas, estas 33 sustancias eran representativas de un grupo diverso de estructuras químicas con una amplia gama de propiedades.

El objetivo era asignar vidas medias basadas en los resultados de BLOWIN, para que coincidieran lo mejor posible con el porcentaje total de eliminación medido. Los valores de propiedad medidos de la base PHYSPROP se recuperan y se utilizan en los cálculos; Además, se establece la relación de Bio P: Bio A: Bio S con el valor predeterminado de 10:1:1, excepto para la clase de vida media más lenta.

El modelo preliminar de la EPA añade dos clases de vida media de Bio A:

- 100 horas para la “biodegradación muy lenta” y el valor por defecto para sustancias “recalcitrantes” que ya estaba fijado en 10,000 horas para Bio P, Bio A y Bio S.
- 1 hora, “biodegradación muy rápida”, se asigna basándose en los resultados de BIOWIN3 y BIOWIN5

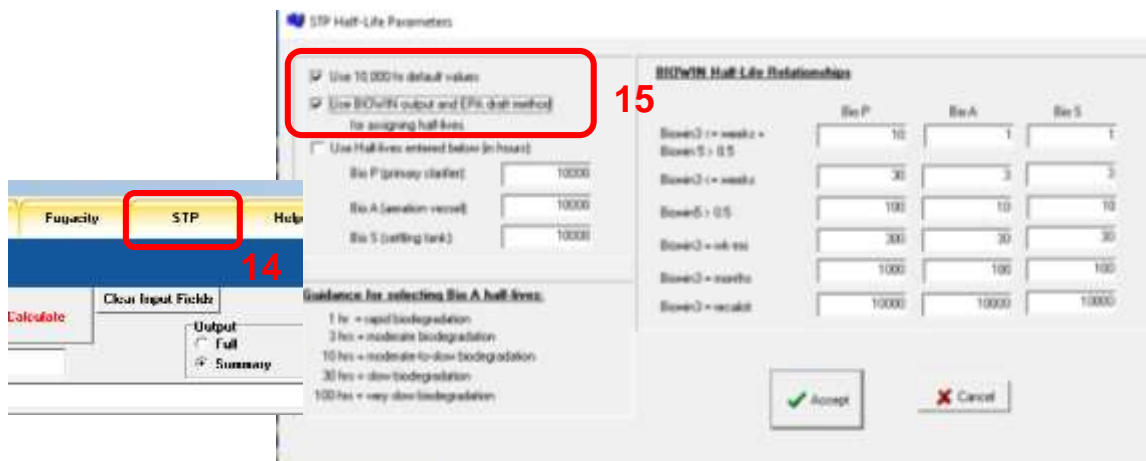
Por lo tanto, las sustancias que se prevé que pasen una prueba de biodegradación rápida, también se predice que se biodegradarán rápidamente en el tratamiento. El porcentaje de eliminación previsto para una determinada sustancia, depende no solo del índice de la biodegradación, sino también de las propiedades químicas de la misma, y puede llegar al 100%. Sin embargo, dadas las numerosas incertidumbres de este tipo de modelización, la EPA recomienda fijar el 95% como valor máximo derivado del modelo.

PROCESO DE SIMULACIÓN (STPWIN)

Una vez que se lleva a cabo la primera parte de la simulación, se selecciona la pestaña de “STP” (14), se abre una ventana en la que se encuentran las 3 opciones que tiene el programa para la estimación de resultados. Se seleccionarán las primeras dos opciones (15), la opción A para observar el comportamiento de las sustancias en el peor escenario, y la opción B que corresponde al método preliminar de la EPA, y el cual es el recomendado por la literatura. Y se selecciona el botón “Accept” para guardar los cambios.

Figura 18

Pasos 14 y 15 del proceso de simulación



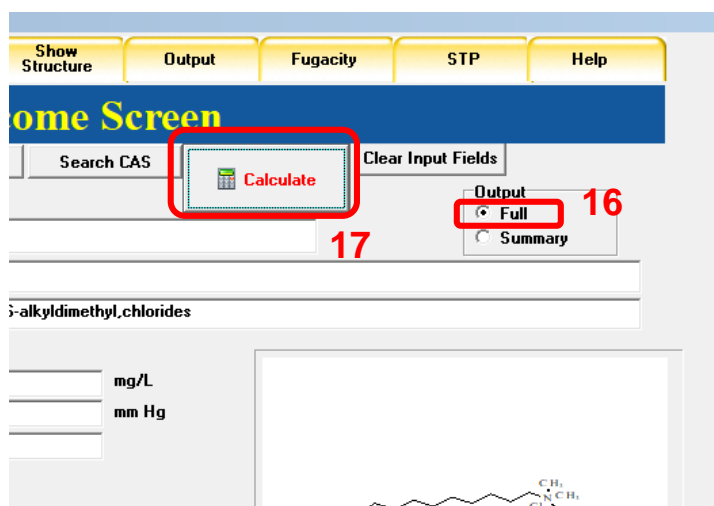
Nota. Fuente: EPI Suite – STP Half Life Parameters (EPA, 2022)

Una vez que se completado el ingreso de los datos y la configuración a los respectivos programas, se procede a seleccionar la opción “Full” del apartado “Output” localizado en la parte

superior derecha de la pantalla principal de EPI Suite™ (16), y finalmente se selecciona el botón “Calculate” (17). Se abrirá una ventana con todos los datos estimados por la interfaz de EPI Suite™, así como la estructura de la sustancia, esta información puede ser guardada como un archivo DOC, o PDF.

Figura 19

Pasos 16 y 17 del proceso de simulación



Nota. Fuente: EPI Suite – Welcome Screen (EPA, 2022)

II. 4 CRITERIOS PARA INTERPRETACIÓN DE RESULTADOS, LEVEL3NT Y STPWIN

Coeficiente de partición octanol – agua (log Kow):

El coeficiente de partición octanol – agua (log Kow), es una medida de la hidrofobicidad del soluto, es la relación entre la concentración del soluto en el octanol y la concentración del soluto en el agua. (Delgado Ortega, 2016)

$$K_{OW} = \frac{C_{octanol}}{C_{agua}} \quad \text{Ec. 37}$$

En EPI Suite™, el log Kow proporciona información sobre cómo una sustancia química se repartirá entre el octanol (que representa los lípidos o grasas de la biota) y el agua. Los valores del Kow varían significativamente para varias sustancias y es por eso que se reporta logarítmicamente. Los rangos de Log Kow se muestran en la Tabla 19:

Tabla 19

Rangos de valores de Log Kow

Valor	Interpretación
<1	Muy soluble en agua (Hidrófilo)
>4	Poco soluble en agua (Hidrofóbico)
>8	No fácilmente biodisponible
>10	No biodisponible – difícil de medir experimentalmente

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

En otras palabras, el log Kow indica la probabilidad de que una sustancia sea absorbida a través de las membranas biológicas. Las tendencias generales son:

Tabla 20

Tendencias de los valores de Log Kow

Valor	Interpretación
2-4	Tienden a absorberse bien a través de la piel
>4	Tienden a no absorberse bien
5-6	Tienden a bioconcentrarse en la parte lipídica de la membrana

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

Constante de la Ley de Henry (HLC):

La constante de la Ley de Henry es la relación entre una concentración química en la fase gaseosa y la fase acuosa en el equilibrio. Proporciona una estimación de la volatilidad de una sustancia química en el agua y provee una estimación de la posible partición de la misma en el medio ambiente, su posible eliminación en una planta de tratamiento de agua residual biológica y las posibles vías de exposición al medio ambiente. La Tabla 21 describe los rangos de valores de HLC y la información que proporciona.

Tabla 21

Rangos para HLC

Valor de HLC (atm-m ³ /mol)	Clasificación
>10 ⁻¹	Muy volátil en el agua
10 ⁻¹ – 10 ⁻³	Volátil en el agua
10 ⁻³ – 10 ⁻⁵	Moderadamente volátil en el agua
10 ⁻⁵ – 10 ⁻⁷	Ligeramente volátil en el agua
<10 ⁻⁷	No volátil

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

Coeficiente de adsorción del suelo (Koc):

El coeficiente de adsorción del suelo (Koc) proporciona una medida de la capacidad de una sustancia química para adherirse a la parte orgánica del suelo, los sedimentos y los lodos. Se expresa en forma de logaritmo debido a su amplia gama de valores posibles. El Koc indica el potencial de lixiviación del producto químico a través del suelo y su incorporación en las aguas subterráneas y su partición entre el agua y los sólidos suspendidos y los sedimentos en la columna de agua. Una fuerte adsorción en el suelo, afecta otras propiedades del destino ambiental de la sustancia.

Koc bajo (no está fuertemente ligado al suelo):

- Se infiltra en el suelo
- Reduce la concentración en el nivel de la superficie
- Posible contaminación de las aguas subterráneas
- Contaminación de las aguas superficiales con escorrentía de las tormentas

Koc alto (fuertemente ligado al suelo):

- Eliminación de la columna de agua mediante sorción a los sedimentos y a las partículas
- Puede reducir la tasa de degradación porque el producto químico está menos disponible para microorganismos.

Tabla 22

Clasificaciones de valores del Koc

Log Koc	Clasificación de adsorción
>4.5	Muy fuerte adsorción en el suelo/sedimento, migración insignificante a las aguas subterráneas
3.5 – 4.4	Fuerte adsorción en el suelo/sedimento, migración insignificante o lenta a las aguas subterráneas
2.2 – 3.4	Adsorción moderada en el suelo/sedimento, migración lenta a las aguas subterráneas
1.5 – 2.4	Baja adsorción en el suelo/sedimento, migración moderada a las aguas subterráneas
<1.5	Adsorción insignificante en el suelo/sedimento, migración rápida a las aguas subterráneas

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

Solubilidad en agua (WS):

La solubilidad en agua proporciona información sobre el grado de dilución de una sustancia química en 1 litro de agua. Indica como es probable que la sustancia se distribuya entre los diferentes compartimentos ambientales. También indica el potencial de exposición humana a través de su liberación en el compartimento acuático. Las sustancias químicas que no son solubles en agua no entrarán en la columna de agua y no es probable que sea un problema de exposición para los seres humanos a través de la ingestión de agua potable.

Tabla 24

Clasificaciones de valores de la solubilidad en agua

WS (mg/L)	Clasificación de la solubilidad
>10,000	Muy soluble
>1,000 – 10,000	Soluble
>100 – 1,000	Moderadamente soluble
>0.1 – 100	Ligeramente soluble
<0.1	Solubilidad insignificante

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

CAPÍTULO III. RESULTADOS Y DISCUSIÓN

Para la estimación de la fugacidad de los quats, así como para el cálculo de su remoción en una planta de tratamiento biológica, EPI Suite™ estimó los siguientes valores para cada una de las sustancias:

Tabla 25

Valores usados por EPI Suite™ para el BAC

Nombre químico	Quaternary ammonium compounds, benzyl-C12-16 alkyldimethyl, chlorides
Peso molecular	368.05
Solubilidad en agua (WSKOWWIN)	2.203 mg/L
Constante de Ley de Henry (HENRYWIN)	1.34×10^{-11} atm-m ³ /mol
Presión de vapor (MPBPWIN)	3.53×10^{-12} mmHg a 25°C
Log Kow (KOWWIN)	3.9104
Koc del suelo (KOCWIN método MCI)	9.03×10^5 L/kg
Coefficiente de partición aire-agua	5.4802×10^{-10}
Coefficiente de partición biomasa-agua	1626.46

Nota. Fuente: EPA (2022). "Level III Fugacity Model (Full-Output)". "STP Fugacity Model: Predicted Fate in a Wastewater Treatment Facility"

Tabla 26

Valores usados por EPI Suite™ para el ADEBAC

Nombre químico	1-Decanaminium, chloride	N-decyl-N,N-dimethyl-,
Peso molecular	368.05	
Solubilidad en agua (WSKOWWIN)	1.973 mg/L	
Constante de Ley de Henry (HENRYWIN)	1.11×10^{-11} Atm-m ³ /mol	
Presión de vapor (MPBPWIN)	3.53×10^{-12} mm Hg	
Log Kow (KOWWIN)	3.97	
Koc del suelo (KOCWIN método MCI)	8.32×10^5 L/kg	
Coefficiente de partición aire-agua	4.53957×10^{-10}	
Coefficiente de reparto biomasa-agua	1867.31	

Nota. Fuente: EPA (2022). "Level III Fugacity Model (Full-Output)". "STP Fugacity Model: Predicted Fate in a Wastewater Treatment Facility"

Tabla 27

Valores usados por EPI Suite™ para el DDAC

Nombre químico	1-Decanaminium, chloride	N-decyl-N,N-dimethyl-,
Peso molecular	362.09	
Solubilidad en agua (WSKOWWIN)	0.5505 mg/L	
Constante de Ley de Henry (HENRYWIN)	6.85 x10 ⁻¹⁰	
Presión de vapor (MPBPWIN)	2.33 x10 ⁻¹¹ mm Hg	
Log Kow (KOWWIN)	4.66	
Koc del suelo (KOCWIN método MCI)	4.85 x10 ⁵	
Coeficiente de partición aire-agua	2.80145 x10 ⁻⁸	
Coeficiente de reparto biomasa-agua	9142.56	

Nota. Fuente: EPA (2022). “Level III Fugacity Model (Full-Output)”. “STP Fugacity Model: Predicted Fate in a Wastewater Treatment Facility”

Tabla 28

Valores usados por EPI Suite™ para el ODDAC

Nombre químico	1-Decanaminium, chloride	N,N-dimethyl-N-octyl-,
Peso molecular	334.03	
Solubilidad en agua(WSKOWWIN)	5.608 mg/L	
Constante de Ley de Henry (HENRYWIN)	3.89 x10 ⁻¹⁰	
Presión de vapor (MPBPWIN)	1.23 x10 ⁻¹⁰ mm Hg	
Log Kow (KOWWIN)	3.68	
Koc del suelo (KOCWIN método MCI)	1.46 x10 ⁵	
Coeficiente de partición aire-agua	1.59089 x10 ⁻⁸	
Coeficiente de reparto biomasa-agua	958.06	

Nota. Fuente: EPA (2022). “Level III Fugacity Model (Full-Output)”. “STP Fugacity Model: Predicted Fate in a Wastewater Treatment Facility”

Tabla 29

Valores usados por EPI Suite™ para el Dio-DAC

Nombre químico	1-Octanaminium, chloride	N,N-dimethyl-N-octyl-,
Peso molecular	305.98	
Solubilidad en agua (WSKOWWIN)	56.72 mg/L	
Constante de Ley de Henry (HENRYWIN)	2.2 x10 ⁻¹⁰	
Presión de vapor (MPBPWIN)	6.71 x10 ⁻¹⁰ mm Hg	
Log Kow (KOWWIN)	2.69	
Koc del suelo (KOCWIN método MCI)	4.4 x10 ⁴	
Coefficiente de partición aire-agua	8.99735 x10 ⁻⁹	
Coefficiente de reparto biomasa-agua	98.7558	

Nota. Fuente: EPA (2022). “Level III Fugacity Model (Full-Output)”. “STP Fugacity Model: Predicted Fate in a Wastewater Treatment Facility”

III.1 ESTIMACIÓN DE LA FUGACIDAD DEL BAC, ADEBAC, DDAC, ODDAC Y Dio-DAC

Se estimó la fugacidad de los cinco compuestos de amonio cuaternario mediante el programa LEVEL3NT de EPI Suite™, usando el Índice de Conectividad Molecular de primer orden (MCI).

El LEVEL3NT utilizó los tiempos de advección: 100 hrs para el compartimento aire, 1,000 hrs para agua y 50,000 hrs para sedimentos, y los valores de vidas medias para cada quat presentados en la Tabla 30:

Tabla 30

Vidas medias por compartimento para cada quat.

Compartimento	VIDAS MEDIAS [hr]				
	BAC	ADEBAC	DDAC	ODDAC	Dio-DAC
Aire	5.887	5.978	5.544	5.904	6.314
Agua	900	900	360	360	360
Suelo	1800	1800	720	720	720
Sedimento	8100	8100	3240	3240	3240

Estimación	2.706	2.609	2.996	3.058	3.120
Biowin	semanas- meses	semanas- meses	semanas	semanas	semanas

Nota. Fuente: EPA (2022). "Level III Fugacity Model (Full-Output)".

Las tablas 31 a la 65 presentan los resultados de la estimación de la fugacidad obtenidos en la simulación para los cinco quats. La salida se realizó mediante el método múltiple, por lo que el programa se ejecutó siete veces, usando todas las permutaciones de tasas de emisión de aire, agua y suelo como 0 o como 1000 (a excepción de que todos los valores sean 0).

III.1.1 BAC

Tabla 31

Resultados de fugacidad, permutación 1. Modelo LEVEL3NT, método MCI, BAC.

Emisiones (kg/hr)	Cantidad de masa (%)	Fugacidad (atm)	Reacción (kg/hr)	Advección (kg/hr)	Reacción (%)	Advección (%)
Aire (1000)	0.0401	1.39×10^{-15}	461	39.1	15.4	1.3
Agua (1000)	2.57	1.94×10^{-17}	193	251	6.44	8.36
Suelo (1000)	38.6	3.52×10^{-19}	1.45×10^3	0	48.3	0
Sedimento (0)	58.8	2.41×10^{-17}	491	115	16.4	3.83

Otros datos:

Tiempo de persistencia: 3.26×10^3 hr

Tiempo de reacción: 3.76×10^3 hr

Tiempo de advección: 2.41×10^4 hr

Porcentaje de reacción: 86.5

Porcentaje de advección: 13.5

Nota. Fuente: EPA (2022). "Level III Fugacity Model (Full-Output)".

Tabla 32

Resultados de fugacidad, permutación 2. Modelo LEVEL3NT, método MCI, BAC.

Emisiones (kg/hr)	Cantidad de masa (%)	Fugacidad (atm)	Reacción (kg/hr)	Advección (kg/hr)	Reacción (%)	Advección (%)
Aire (1000)	0.268	1.39×10^{-15}	461	39.1	46.1	3.91
Agua (0)	0.821	9.26×10^{-19}	9.22	12	0.922	1.2
Suelo (0)	80.1	1.09×10^{-19}	450	0	45	0
Sedimento (0)	18.8	1.15×10^{-18}	23.5	5.49	2.35	0.549

Otros datos:

Tiempo de persistencia: 1.46×10^3 hrTiempo de reacción: 1.55×10^3 hrTiempo de advección: 2.58×10^4 hr

Porcentaje de reacción: 94.3

Porcentaje de advección: 5.66

Nota. Fuente: EPA (2022). "Level III Fugacity Model (Full-Output)".**Tabla 33**

Resultados de fugacidad, permutación 3. Modelo LEVEL3NT, método MCI, BAC.

Emisiones (kg/hr)	Cantidad de masa (%)	Fugacidad (atm)	Reacción (kg/hr)	Advección (kg/hr)	Reacción (%)	Advección (%)
Aire (0)	9.54×10^{-10}	1.94×10^{-23}	6.41×10^{-6}	5.44×10^{-7}	6.41×10^{-7}	5.44×10^{-8}
Agua (1000)	4.18	1.85×10^{-17}	184	239	18.4	23.9
Suelo (0)	2.85×10^{-7}	1.52×10^{-27}	6.26×10^{-6}	0	6.26×10^{-7}	0
Sedimento (0)	95.8	2.3×10^{-17}	468	109	46.8	10.9

Otros datos:

Tiempo de persistencia: 5.71×10^3 hrTiempo de reacción: 8.76×10^3 hrTiempo de advección: 1.64×10^4 hr

Porcentaje de reacción: 65.2

Porcentaje de advección: 34.8

Nota. Fuente: EPA (2022). "Level III Fugacity Model (Full-Output)".

Tabla 34

Resultados de fugacidad, permutación 4. Modelo LEVEL3NT, método MCI, BAC.

Emisiones (kg/hr)	Cantidad de masa (%)	Fugacidad (atm)	Reacción (kg/hr)	Advección (kg/hr)	Reacción (%)	Advección (%)
Aire (0)	2.48×10^{-10}	2.3×10^{-24}	7.59×10^{-7}	6.4×10^{-8}	7.59×10^{-8}	6.4×10^{-9}
Agua (0)	0.00266	5.35×10^{-21}	0.0533	0.0692	0.00533	0.00692
Suelo (1000)	99.9	2.42×10^{-19}	1000	0	100	0
Sedimento (0)	0.061	6.66×10^{-21}	0.136	0.0317	0.0136	0.00317

Otros datos:
Tiempo de persistencia: 2.6×10^3 hr
Tiempo de reacción: 2.6×10^3 hr
Tiempo de advección: 2.58×10^7 hr
Porcentaje de reacción: 100
Porcentaje de advección: 0.0101

Nota. Fuente: EPA (2022). "Level III Fugacity Model (Full-Output)".

Tabla 35

Resultados de fugacidad, permutación 5. Modelo LEVEL3NT, método MCI, BAC.

Emisiones (kg/hr)	Cantidad de masa (%)	Fugacidad (atm)	Reacción (kg/hr)	Advección (kg/hr)	Reacción (%)	Advección (%)
Aire (1000)	0.0546	1.39×10^{-15}	461	39.1	23	1.96
Agua (1000)	3.5	1.94×10^{-17}	193	251	9.66	12.5
Suelo (0)	16.3	1.09×10^{-19}	450	0	22.5	0
Sedimento (0)	80.1	2.41×10^{-17}	491	115	24.6	5.74

Otros datos:
Tiempo de persistencia: 3.58×10^3 hr
Tiempo de reacción: 4.49×10^3 hr
Tiempo de advección: 1.77×10^4 hr
Porcentaje de reacción: 79.8
Porcentaje de advección: 20.2

Nota. Fuente: EPA (2022). "Level III Fugacity Model (Full-Output)".

Tabla 36

Resultados de fugacidad, permutación 6. Modelo LEVEL3NT, método MCI, BAC.

Emisiones (kg/hr)	Cantidad de masa (%)	Fugacidad (atm)	Reacción (kg/hr)	Advección (kg/hr)	Reacción (%)	Advección (%)
Aire (1000)	0.0964	1.39×10^{-15}	461	39.1	23	1.96
Agua (0)	0.297	9.32×10^{-19}	9.28	12	0.464	0.602
Suelo (1000)	92.8	3.52×10^{-19}	1.45×10^3	0	72.5	0
Sedimento (0)	6.8	1.16×10^{-18}	23.6	5.52	1.18	0.276

Otros datos:
Tiempo de persistencia: 2.03×10^3 hr
Tiempo de reacción: 2.09×10^3 hr
Tiempo de advección: 7.16×10^4 hr
Porcentaje de reacción: 97.2
Porcentaje de advección: 2.83

Nota. Fuente: EPA (2022). "Level III Fugacity Model (Full-Output)".

Tabla 37

Resultados de fugacidad, permutación 7. Modelo LEVEL3NT, método MCI, BAC.

Emisiones (kg/hr)	Cantidad de masa (%)	Fugacidad (atm)	Reacción (kg/hr)	Advección (kg/hr)	Reacción (%)	Advección (%)
Aire (0)	7.33×10^{-10}	2.17×10^{-23}	7.17×10^6	6.09×10^{-7}	3.58×10^{-7}	3.04×10^{-8}
Agua (1000)	2.88	1.85×10^{-17}	184	239	9.2	11.9
Suelo (1000)	31.3	2.42×10^{-19}	1000	0	50	0
Sedimento (0)	65.9	2.3×10^{-17}	468	109	23.4	5.47

Otros datos:
Tiempo de persistencia: 4.15×10^3 hr
Tiempo de reacción: 5.03×10^3 hr
Tiempo de advección: 2.38×10^4 hr
Porcentaje de reacción: 82.6
Porcentaje de advección: 17.4

Nota. Fuente: EPA (2022). "Level III Fugacity Model (Full-Output)".

III.1.2 ADEBAC

Tabla 38

Resultados de fugacidad, permutación 1. Modelo LEVEL3NT, método MCI, ADEBAC.

Emisiones (kg/hr)	Cantidad de masa (%)	Fugacidad (atm)	Reacción (kg/hr)	Advección (kg/hr)	Reacción (%)	Advección (%)
Aire (1000)	0.0372	1.3×10^{-15}	423	36.5	14.1	1.22
Agua (1000)	2.62	1.72×10^{-17}	198	257	6.6	8.57
Suelo (1000)	39.4	3.24×10^{-19}	1.49×10^3	0	49.5	0
Sedimento (0)	58	2.15×10^{-17}	486	114	16.2	3.79

Otros datos:

Tiempo de persistencia: 3.27×10^3 hr

Tiempo de reacción: 3.78×10^3 hr

Tiempo de advección: 2.41×10^3 hr

Porcentaje de reacción: 86.4

Porcentaje de advección: 13.6

Nota. Fuente: EPA (2022). "Level III Fugacity Model (Full-Output)".

Tabla 39

Resultados de fugacidad, permutación 2. Modelo LEVEL3NT, método MCI, ADEBAC.

Emisiones (kg/hr)	Cantidad de masa (%)	Fugacidad (atm)	Reacción (kg/hr)	Advección (kg/hr)	Reacción (%)	Advección (%)
Aire (1000)	0.232	1.3×10^{-15}	423	36.5	42.3	3.65
Agua (0)	0.84	8.8×10^{-19}	10.2	13.2	1.02	1.32
Suelo (0)	80.4	1.06×10^{-19}	486	0	48.6	0
Sedimento (0)	18.6	1.1×10^{-18}	25	5.84	2.5	0.584

Otros datos:

Tiempo de persistencia: 1.57×10^3 hr

Tiempo de reacción: 1.66×10^3 hr

Tiempo de advección: 2.83×10^4 hr

Porcentaje de reacción: 94.4

Porcentaje de advección: 5.55

Nota. Fuente: EPA (2022). "Level III Fugacity Model (Full-Output)".

Tabla 40

Resultados de fugacidad, permutación 3. Modelo LEVEL3NT, método MCI, ADEBAC.

Emisiones (kg/hr)	Cantidad de masa (%)	Fugacidad (atm)	Reacción (kg/hr)	Advección (kg/hr)	Reacción (%)	Advección (%)
Aire (0)	7.98×10^{-10}	1.6×10^{-23}	5.21×10^{-6}	4.5×10^{-7}	5.21×10^{-7}	4.5×10^{-8}
Agua (1000)	4.33	1.64×10^{-17}	188	244	18.8	24.4
Suelo (0)	2.76×10^{-7}	1.31×10^{-27}	5.99×10^{-6}	0	5.99×10^{-7}	0
Sedimento (0)	95.7	2.03×10^{-17}	461	108	46.1	10.8

Otros datos:
Tiempo de persistencia: 5.63×10^3 hr
Tiempo de reacción: 8.68×10^3 hr
Tiempo de advección: 1.6×10^4 hr
Porcentaje de reacción: 64.9
Porcentaje de advección: 35.1

Nota. Fuente: EPA (2022). "Level III Fugacity Model (Full-Output)".

Tabla 41

Resultados de fugacidad, permutación 4. Modelo LEVEL3NT, método MCI, ADEBAC.

Emisiones (kg/hr)	Cantidad de masa (%)	Fugacidad (atm)	Reacción (kg/hr)	Advección (kg/hr)	Reacción (%)	Advección (%)
Aire (0)	2.08×10^{-10}	1.93×10^{-24}	6.27×10^{-7}	5.4×10^{-8}	6.27×10^{-8}	5.4×10^{-9}
Agua (0)	0.00274	4.78×10^{-21}	0.0548	0.0712	0.00548	0.00712
Suelo (1000)	99.9	2.18×10^{-19}	1000	0	100	0
Sedimento (0)	0.0606	5.94×10^{-21}	0.135	0.0315	0.0135	0.00315

Otros datos:
Tiempo de persistencia: 2.6×10^3 hr
Tiempo de reacción: 2.6×10^3 hr
Tiempo de advección: 10^7 hr
Porcentaje de reacción: 100
Porcentaje de advección: 0.0103

Nota. Fuente: EPA (2022). "Level III Fugacity Model (Full-Output)".

Tabla 42

Resultados de fugacidad, permutación 5. Modelo LEVEL3NT, método MCI, ADEBAC.

Emisiones (kg/hr)	Cantidad de masa (%)	Fugacidad (atm)	Reacción (kg/hr)	Advección (kg/hr)	Reacción (%)	Advección (%)
Aire (1000)	0.0507	1.3×10^{-15}	423	36.5	21.2	1.82
Agua (1000)	3.57	1.72×10^{-17}	198	257	9.89	12.8
Suelo (0)	17.5	1.06×10^{-19}	486	0	24.3	0
Sedimento (0)	78.8	2.14×10^{-17}	486	114	24.3	5.68

Otros datos:
Tiempo de persistencia: 3.6×10^3 hr
Tiempo de reacción: 4.52×10^3 hr
Tiempo de advección: 1.77×10^4 hr
Porcentaje de reacción: 79.6
Porcentaje de advección: 20.4

Nota. Fuente: EPA (2022). "Level III Fugacity Model (Full-Output)".

Tabla 43

Resultados de fugacidad, permutación 6. Modelo LEVEL3NT, método MCI, ADBEAC.

Emisiones (kg/hr)	Cantidad de masa (%)	Fugacidad (atm)	Reacción (kg/hr)	Advección (kg/hr)	Reacción (%)	Advección (%)
Aire (1000)	0.0875	1.3×10^{-15}	423	36.5	21.2	1.82
Agua (0)	0.318	8.91×10^{-19}	10.2	13.3	0.511	0.664
Suelo (1000)	92.6	3.24×10^{-19}	1.49×10^3	0	74.3	0
Sedimento (0)	7.04	1.11×10^{-18}	25.1	5.87	1.26	0.293

Otros datos:
Tiempo de persistencia: 2.09×10^3 hr
Tiempo de reacción: 2.14×10^3 hr
Tiempo de advección: 7.49×10^4 hr
Porcentaje de reacción: 97.2
Porcentaje de advección: 2.78

Nota. Fuente: EPA (2022). "Level III Fugacity Model (Full-Output)".

Tabla 44

Resultados de fugacidad, permutación 7. Modelo LEVEL3NT, método MCI, ADEBAC.

Emisiones (kg/hr)	Cantidad de masa (%)	Fugacidad (atm)	Reacción (kg/hr)	Advección (kg/hr)	Reacción (%)	Advección (%)
Aire (0)	6.12×10^{-10}	1.79×10^{-23}	5.84×10^{-6}	5.04×10^{-7}	2.92×10^{-7}	2.52×10^{-8}
Agua (1000)	2.96	1.64×10^{-17}	188	244	9.39	12.2
Suelo (1000)	31.6	2.18×10^{-19}	1000	0	50	0
Sedimento (0)	65.5	2.04×10^{-17}	461	108	23	5.39

Otros datos:

Tiempo de persistencia: 4.11×10^3 hrTiempo de reacción: 4.99×10^3 hrTiempo de advección: 2.34×10^4 hr

Porcentaje de reacción: 82.4

Porcentaje de advección: 17.6

Nota. Fuente: EPA (2022). "Level III Fugacity Model (Full-Output)".

III. 1.3 DDAC

Tabla 45

Resultados de fugacidad, permutación 1. Modelo LEVEL3NT, método MCI, DDAC.

Emisiones (kg/hr)	Cantidad de masa (%)	Fugacidad (atm)	Reacción (kg/hr)	Advección (kg/hr)	Reacción (%)	Advección (%)
Aire (1000)	0.179	1.04×10^{-14}	716	57.3	23.9	1.91
Agua (1000)	6.55	1.15×10^{-15}	405	210	13.5	7.01
Suelo (1000)	39	1.13×10^{-17}	1.2×10^3	0	40.1	0
Sedimento (0)	54.3	7.08×10^{-16}	373	34.9	12.4	1.16

Otros datos:

Tiempo de persistencia: 1.07×10^3 hrTiempo de reacción: 1.19×10^3 hrTiempo de advección: 1.06×10^3 hr

Porcentaje de reacción: 89.9

Porcentaje de advección: 10.1

Nota. Fuente: EPA (2022). "Level III Fugacity Model (Full-Output)".

Tabla 46

Resultados de fugacidad, permutación 2. Modelo LEVEL3NT, método MCI, DDAC.

Emisiones (kg/hr)	Cantidad de masa (%)	Fugacidad (atm)	Reacción (kg/hr)	Advección (kg/hr)	Reacción (%)	Advección (%)
Aire (1000)	2.2	1.04×10^{-14}	716	57.3	71.6	5.73
Agua (0)	1.79	2.55×10^{-17}	8.97	4.66	0.897	0.466
Suelo (0)	81.2	1.91×10^{-18}	204	0	20.4	0
Sedimento (0)	14.8	1.57×10^{-17}	8.26	0.772	0.826	0.0772

Otros datos:

Tiempo de persistencia: 261 hr

Tiempo de reacción: 278 hr

Tiempo de advección: 4.15×10^3 hr

Porcentaje de reacción: 93.7

Porcentaje de advección: 6.27

Nota. Fuente: EPA (2022). "Level III Fugacity Model (Full-Output)".**Tabla 47**

Resultados de fugacidad, permutación 3. Modelo LEVEL3NT, método MCI, DDAC.

Emisiones (kg/hr)	Cantidad de masa (%)	Fugacidad (atm)	Reacción (kg/hr)	Advección (kg/hr)	Reacción (%)	Advección (%)
Aire (0)	2.5×10^{-7}	8.63×10^{-21}	0.000597	4.78×10^{-5}	5.97×10^{-5}	4.78×10^{-6}
Agua (1000)	10.8	1.12×10^{-15}	396	206	39.6	20.6
Suelo (0)	9.23×10^{-6}	1.59×10^{-24}	0.00017	0	1.7×10^{-5}	0
Sedimento (0)	89.2	6.92×10^{-16}	364	34.1	36.4	3.41

Otros datos:

Tiempo de persistencia: 5.71×10^3 hrTiempo de reacción: 8.76×10^3 hrTiempo de advección: 1.64×10^4 hr

Porcentaje de reacción: 65.2

Porcentaje de advección: 34.8

Nota. Fuente: EPA (2022). "Level III Fugacity Model (Full-Output)".

Tabla 48

Resultados de fugacidad, permutación 4. Modelo LEVEL3NT, método MCI, DDAC.

Emisiones (kg/hr)	Cantidad de masa (%)	Fugacidad (atm)	Reacción (kg/hr)	Advección (kg/hr)	Reacción (%)	Advección (%)
Aire (0)	3.41×10^{-8}	5.54	4.43×10^{-5}	3.54×10^{-6}	4.43×10^{-6}	3.54×10^{-7}
Agua (0)	0.0025	360	0.05	0.026	0.005	0.0026
Suelo (1000)	100	720	1000	0	100	0
Sedimento (0)	0.0207	3.24×10^3	0.046	0.0043	0.0046	0.00043

Otros datos:
Tiempo de persistencia: 1.04×10^3 hr
Tiempo de reacción: 1.04×10^3 hr
Tiempo de advección: 3.43×10^7 hr
Porcentaje de reacción: 100
Porcentaje de advección: 0.0303

Nota. Fuente: EPA (2022). "Level III Fugacity Model (Full-Output)".

Tabla 49

Resultados de fugacidad, permutación 5. Modelo LEVEL3NT, método MCI, DDAC.

Emisiones (kg/hr)	Cantidad de masa (%)	Fugacidad (atm)	Reacción (kg/hr)	Advección (kg/hr)	Reacción (%)	Advección (%)
Aire (1000)	0.264	1.04×10^{-14}	716	57.3	35.8	2.87
Agua (1000)	9.69	1.15×10^{-15}	405	210	20.2	10.5
Suelo (0)	9.75	1.91×10^{-18}	204	0	10.2	0
Sedimento (0)	80.3	7.08×10^{-16}	373	34.8	18.6	1.74

Otros datos:
Tiempo de persistencia: 1.08×10^3 hr
Tiempo de reacción: 1.28×10^3 hr
Tiempo de advección: 7.17×10^4 hr
Porcentaje de reacción: 84.9
Porcentaje de advección: 15.1

Nota. Fuente: EPA (2022). "Level III Fugacity Model (Full-Output)".

Tabla 50

Resultados de fugacidad, permutación 6. Modelo LEVEL3NT, método MCI, DDAC.

Emisiones (kg/hr)	Cantidad de masa (%)	Fugacidad (atm)	Reacción (kg/hr)	Advección (kg/hr)	Reacción (%)	Advección (%)
Aire (1000)	0.441	1.04×10^{-14}	716	57.3	35.8	2.87
Agua (0)	0.36	2.56×10^{-17}	9.02	4.68	0.451	0.234
Suelo (1000)	96.2	1.13×10^{-17}	1.2×10^3	0	60.2	0
Sedimento (0)	2.99	1.58×10^{-17}	8.3	0.776	0.415	0.0388

Otros datos:
Tiempo de persistencia: 650 hr
Tiempo de reacción: 671 hr
Tiempo de advección: 2.07×10^4 hr
Porcentaje de reacción: 96.9
Porcentaje de advección: 3.14

Nota. Fuente: EPA (2022). "Level III Fugacity Model (Full-Output)".

Tabla 51

Resultados de fugacidad, permutación 7. Modelo LEVEL3NT, método MCI, DDAC.

Emisiones (kg/hr)	Cantidad de masa (%)	Fugacidad (atm)	Reacción (kg/hr)	Advección (kg/hr)	Reacción (%)	Advección (%)
Aire (0)	1.74×10^{-7}	9.27×10^{-21}	0.000641	5.13×10^{-5}	3.21×10^{-5}	2.57×10^{-6}
Agua (1000)	6.98	1.12×10^{-15}	396	206	19.8	10.3
Suelo (1000)	35.2	9.38×10^{-18}	1000	0	50	0
Sedimento (0)	57.8	6.93×10^{-16}	364	34.1	18.2	1.7

Otros datos:
Tiempo de persistencia: 1.47×10^3 hr
Tiempo de reacción: 1.68×10^3 hr
Tiempo de advección: 1.23×10^4 hr
Porcentaje de reacción: 88
Porcentaje de advección: 12

Nota. Fuente: EPA (2022). "Level III Fugacity Model (Full-Output)".

III.1.4 ODDAC

Tabla 52

Resultados de fugacidad, permutación 1. Modelo LEVEL3NT, método MCI, ODDAC.

Emisiones (kg/hr)	Cantidad de masa (%)	Fugacidad (atm)	Reacción (kg/hr)	Advección (kg/hr)	Reacción (%)	Advección (%)
Aire (1000)	0.163	3.55×10^{-14}	520	44.3	17.3	1.48
Agua (1000)	10.2	1.33×10^{-15}	535	278	17.8	9.27
Suelo (1000)	53.3	2.67×10^{-17}	1.39×10^3	0	46.4	2
Sedimento (0)	36.3	8.19×10^{-16}	211	19.7	7.03	0.657

Otros datos:

Tiempo de persistencia: 905 hr

Tiempo de reacción: 1.02×10^3 hr

Tiempo de advección: 7.94×10^3 hr

Porcentaje de reacción: 88.6

Porcentaje de advección: 11.4

Nota. Fuente: EPA (2022). "Level III Fugacity Model (Full-Output)".

Tabla 53

Resultados de fugacidad, permutación 2. Modelo LEVEL3NT, método MCI, ODDAC.

Emisiones (kg/hr)	Cantidad de masa (%)	Fugacidad (atm)	Reacción (kg/hr)	Advección (kg/hr)	Reacción (%)	Advección (%)
Aire (1000)	0.952	5.9	520	44.3	52	4.43
Agua (0)	2.5	360	22.4	11.6	2.24	1.16
Suelo (0)	87.7	720	392	0	39.2	0
Sedimento (0)	8.87	3.24×10^3	8.82	0.825	0.882	0.0825

Otros datos:

Tiempo de persistencia: 465 hr

Tiempo de reacción: 493 hr

Tiempo de advección: 8.2×10^3 hr

Porcentaje de reacción: 94.3

Porcentaje de advección: 5.67

Nota. Fuente: EPA (2022). "Level III Fugacity Model (Full-Output)".

Tabla 54

Resultados de fugacidad, permutación 3. Modelo LEVEL3NT, método MCI, ODDAC

Emisiones (kg/hr)	Cantidad de masa (%)	Fugacidad (atm)	Reacción (kg/hr)	Advección (kg/hr)	Reacción (%)	Advección (%)
Aire (0)	3.18×10^{-7}	3.08×10^{-20}	0.000452	3.85×10^{-5}	4.52×10^{-5}	3.85×10^{-6}
Agua (1000)	22	1.27×10^{-15}	513	266	51.3	26.6
Suelo (0)	2.93×10^{-5}	6.55×10^{-24}	0.000341	0	3.41×10^{-5}	0
Sedimento (0)	78	7.84×10^{-16}	202	18.9	20.2	1.89

Otros datos:
Tiempo de persistencia: 1.21×10^3 hr
Tiempo de reacción: 1.69×10^3 hr
Tiempo de advección: 4.24×10^3 hr
Porcentaje de reacción: 71.5
Porcentaje de advección: 28.5

Nota. Fuente: EPA (2022). "Level III Fugacity Model (Full-Output)".

Tabla 55

Resultados de fugacidad, permutación 4. Modelo LEVEL3NT, método MCI, ODDAC

Emisiones (kg/hr)	Cantidad de masa (%)	Fugacidad (atm)	Reacción (kg/hr)	Advección (kg/hr)	Reacción (%)	Advección (%)
Aire (0)	4.99×10^{-8}	4.16×10^{-21}	6.09×10^{-5}	5.19×10^{-6}	6.09×10^{-6}	5.19×10^{-7}
Agua (0)	0.00456	2.26×10^{-19}	0.0913	0.0474	0.00913	0.00474
Suelo (1000)	100	1.92×10^{-17}	1000	0	100	0
Sedimento (0)	0.0162	1.4×10^{-19}	0.0359	0.00336	0.00359	0.000336

Otros datos:
Tiempo de persistencia: 1.04×10^3 hr
Tiempo de reacción: 1.04×10^3 hr
Tiempo de advección: 2.05×10^7 hr
Porcentaje de reacción: 100
Porcentaje de advección: 0.00508

Nota. Fuente: EPA (2022). "Level III Fugacity Model (Full-Output)".

Tabla 56

Resultados de fugacidad, permutación 5. Modelo LEVEL3NT, método MCI, ODDAC.

Emisiones (kg/hr)	Cantidad de masa (%)	Fugacidad (atm)	Reacción (kg/hr)	Advección (kg/hr)	Reacción (%)	Advección (%)
Aire (1000)	0.264	3.55×10^{-14}	520	44.3	26	2.21
Agua (1000)	16.6	1.33×10^{-15}	535	278	26.8	13.9
Suelo (0)	24.3	7.53×10^{-18}	392	0	19.6	0
Sedimento (0)	58.8	8.18×10^{-16}	211	19.7	10.5	0.985

Otros datos:
Tiempo de persistencia: 838 hr
Tiempo de reacción: 1.01×10^3 hr
Tiempo de advección: 4.9×10^3 hr
Porcentaje de reacción: 82.9
Porcentaje de advección: 17.1

Nota. Fuente: EPA (2022). "Level III Fugacity Model (Full-Output)".

Tabla 57

Resultados de fugacidad, permutación 6. Modelo LEVEL3NT, método MCI, ODDAC.

Emisiones (kg/hr)	Cantidad de masa (%)	Fugacidad (atm)	Reacción (kg/hr)	Advección (kg/hr)	Reacción (%)	Advección (%)
Aire (1000)	0.294	5.9	520	44.3	26	2.21
Agua (0)	0.777	360	22.5	11.7	1.12	0.584
Suelo (1000)	96.2	720	1.39×10^3	0	69.6	0
Sedimento (0)	2.75	3.24×10^3	8.85	0.828	0.443	0.0414

Otros datos:
Tiempo de persistencia: 752 hr
Tiempo de reacción: 774 hr
Tiempo de advección: 2.65×10^4 hr
Porcentaje de reacción: 97.2
Porcentaje de advección: 2.84

Nota. Fuente: EPA (2022). "Level III Fugacity Model (Full-Output)".

Tabla 58

Resultados de fugacidad, permutación 7. Modelo LEVEL3NT, método MCI, ODDAC.

Emisiones (kg/hr)	Cantidad de masa (%)	Fugacidad (atm)	Reacción (kg/hr)	Advección (kg/hr)	Reacción (%)	Advección (%)
Aire (0)	1.94×10^{-7}	3.5×10^{-20}	0.000513	4.37×10^{-5}	2.56×10^{-5}	2.18×10^{-6}
Agua (1000)	11.8	1.27×10^{-15}	513	266	25.6	13.3
Suelo (1000)	46.2	1.92×10^{-17}	1000	0	50	0
Sedimento (0)	42	7.84×10^{-16}	202	18.9	10.1	0.944

Otros datos:
Tiempo de persistencia: 1.12×10^3 hr
Tiempo de reacción: 1.31×10^3 hr
Tiempo de advección: 7.88×10^3 hr
Porcentaje de reacción: 85.7
Porcentaje de advección: 14.3

Nota. Fuente: EPA (2022). "Level III Fugacity Model (Full-Output)".

III.1.5 Dio-DAC

Tabla 59

Resultados de fugacidad, permutación 1. Modelo LEVEL3NT, método MCI, Dio-DAC.

Emisiones (kg/hr)	Cantidad de masa (%)	Fugacidad (atm)	Reacción (kg/hr)	Advección (kg/hr)	Reacción (%)	Advección (%)
Aire (1000)	0.0625	5.49×10^{-14}	175	15.9	5.82	0.53
Agua (1000)	13.2	1.14×10^{-15}	648	337	21.6	11.2
Suelo (1000)	70.5	6.8×10^{-17}	1.73×10^3	0	57.6	0
Sedimento (0)	16.2	7.02×10^{-16}	88.2	8.25	2.94	0.275

Otros datos:
Tiempo de persistencia: 849 hr
Tiempo de reacción: 965 hr
Tiempo de advección: 7.05×10^3 hr
Porcentaje de reacción: 88
Porcentaje de advección: 12

Nota. Fuente: EPA (2022). "Level III Fugacity Model (Full-Output)".

Tabla 60

Resultados de fugacidad, permutación 2. Modelo LEVEL3NT, método MCI, Dio-DAC.

Emisiones (kg/hr)	Cantidad de masa (%)	Fugacidad (atm)	Reacción (kg/hr)	Advección (kg/hr)	Reacción (%)	Advección (%)
Aire (1000)	0.195	5.49×10^{-14}	175	15.9	17.5	1.59
Agua (0)	3.1	8.53×10^{-17}	48.7	25.3	4.87	2.53
Suelo (0)	92.9	2.86×10^{-17}	728	0	72.8	0
Sedimento (0)	3.8	5.27×10^{-17}	6.63	0.62	0.663	0.062

Otros datos:

Tiempo de persistencia: 1.46×10^3 hrTiempo de reacción: 1.55×10^3 hrTiempo de advección: 2.58×10^4 hr

Porcentaje de reacción: 94.3

Porcentaje de advección: 5.66

Nota. Fuente: EPA (2022). "Level III Fugacity Model (Full-Output)".**Tabla 61**

Resultados de fugacidad, permutación 3. Modelo LEVEL3NT, método MCI, Dio-DAC.

Emisiones (kg/hr)	Cantidad de masa (%)	Fugacidad (atm)	Reacción (kg/hr)	Advección (kg/hr)	Reacción (%)	Advección (%)
Aire (0)	1.51×10^{-7}	3.61×10^{-20}	0.000115	1.05×10^{-5}	1.15×10^{-5}	1.05×10^{-6}
Agua (1000)	44.9	1.05×10^{-15}	599	311	59.9	31.1
Suelo (0)	7.18×10^{-5}	1.88×10^{-23}	0.000479	0	4.79×10^{-5}	0
Sedimento (0)	55.1	6.49×10^{-16}	81.6	7.63	8.16	0.763

Otros datos:

Tiempo de persistencia: 693 hr

Tiempo de reacción: 1.02×10^3 hrTiempo de advección: 2.17×10^3 hr

Porcentaje de reacción: 68.1

Porcentaje de advección: 31.9

Nota. Fuente: EPA (2022). "Level III Fugacity Model (Full-Output)".

Tabla 62

Resultados de fugacidad, permutación 4. Modelo LEVEL3NT, método MCI, Dio-DAC.

Emisiones (kg/hr)	Cantidad de masa (%)	Fugacidad (atm)	Reacción (kg/hr)	Advección (kg/hr)	Reacción (%)	Advección (%)
Aire (0)	3.38×10^{-8}	1.21×10^{-20}	3.86×10^{-5}	3.51×10^{-6}	3.86×10^{-6}	3.51×10^{-7}
Agua (0)	0.0105	3.67×10^{-19}	0.21	0.109	0.021	0.0109
Suelo (1000)	100	3.93×10^{-17}	1000	0	100	0
Sedimento (0)	0.0129	2.27×10^{-19}	0.0286	0.00267	0.00286	0.000267

Otros datos:
Tiempo de persistencia: 1.04×10^3 hr
Tiempo de reacción: 1.04×10^3 hr
Tiempo de advección: 9.31×10^6 hr
Porcentaje de reacción: 100
Porcentaje de advección: 0.0112

Nota. Fuente: EPA (2022). "Level III Fugacity Model (Full-Output)".**Tabla 63**

Resultados de fugacidad, permutación 5. Modelo LEVEL3NT, método MCI, Dio-DAC.

Emisiones (kg/hr)	Cantidad de masa (%)	Fugacidad (atm)	Reacción (kg/hr)	Advección (kg/hr)	Reacción (%)	Advección (%)
Aire (1000)	0.106	5.49×10^{-14}	175	15.9	8.73	0.796
Agua (1000)	22.3	1.14×10^{-15}	648	337	32.4	16.8
Suelo (0)	50.2	2.86×10^{-17}	728	0	36.4	0
Sedimento (0)	27.4	7.02×10^{-16}	88.2	8.25	4.41	0.412

Otros datos:
Tiempo de persistencia: 754 hr
Tiempo de reacción: 920 hr
Tiempo de advección: 4.18×10^3 hr
Porcentaje de reacción: 82
Porcentaje de advección: 18

Nota. Fuente: EPA (2022). "Level III Fugacity Model (Full-Output)".

Tabla 64

Resultados de fugacidad, permutación 6. Modelo LEVEL3NT, método MCI, Dio-DAC.

Emisiones (kg/hr)	Cantidad de masa (%)	Fugacidad (atm)	Reacción (kg/hr)	Advección (kg/hr)	Reacción (%)	Advección (%)
Aire (1000)	0.0858	5.49×10^{-14}	175	15.9	8.73	0.796
Agua (0)	1.37	8.56×10^{-17}	48.9	25.4	2.44	1.27
Suelo (1000)	96.9	6.8×10^{-17}	1.73×10^3	0	86.4	0
Sedimento (0)	1.68	5.3×10^{-17}	6.65	0.622	0.333	0.0311

Otros datos:
Tiempo de persistencia: 927 hr
Tiempo de reacción: 947 hr
Tiempo de advección: 4.42×10^4 hr
Porcentaje de reacción: 97.9
Porcentaje de advección: 2.1

Nota. Fuente: EPA (2022). "Level III Fugacity Model (Full-Output)".

Tabla 65

Resultados de fugacidad, permutación 7. Modelo LEVEL3NT, método MCI, Dio-DAC.

Emisiones (kg/hr)	Cantidad de masa (%)	Fugacidad (atm)	Reacción (kg/hr)	Advección (kg/hr)	Reacción (%)	Advección (%)
Aire (0)	8.07×10^{-8}	4.82×10^{-20}	0.000153	1.4×10^{-5}	7.67×10^{-6}	6.99×10^{-7}
Agua (1000)	18	1.05×10^{-15}	600	311	30	15.6
Suelo (1000)	60	3.93×10^{-17}	1000	0	50	0
Sedimento (0)	22	6.5×10^{-16}	81.6	7.63	4.08	0.382

Otros datos:
Tiempo de persistencia: 866 hr
Tiempo de reacción: 1.03×10^3 hr
Tiempo de advección: 5.43×10^3 hr
Porcentaje de reacción: 84
Porcentaje de advección: 16

Nota. Fuente: EPA (2022). "Level III Fugacity Model (Full-Output)".

III.1.6 DISCUSIÓN DE RESULTADOS, LEVEL3NT.

Los valores de vidas medias (hr) usados por LEVEL3NT para el cálculo de la fugacidad (Tabla 30), son muy parecidos para el compartimento de Aire para cada quat, y resulta ser el mismo valor para el BAC y ADEBAC en los compartimentos de Agua, Suelo y Sedimento; así como también es el mismo valor para el DDAC, ODDAC y Dio-DAC en los compartimentos mencionados, lo cual es coherente ya que esos grupos de quats pertenecen a la misma clasificación mencionada en el marco teórico. Y como se observa en la misma tabla, el quat que presenta mayor tiempo de permanencia en el ambiente es el Dio-DAC, siendo de 3.120 semanas.

De acuerdo con los resultados obtenidos mediante el programa LEVEL3NT, los cinco quats evaluados presentan la mayor fugacidad para el compartimento de suelo siendo del 99.9% para el BAC y ADEBAC en el caso de que la emisión es directamente en el mismo (Tabla 34, Tabla 41) o incluso del 100% para el DDAC, ODDAC y el Dio-DAC también para la emisión total en el mismo (Tabla 48, Tabla 55, Tabla 62); por lo que la transferencia de estas sustancias a otro compartimento es prácticamente inexistente.

En las permutaciones en las que la simulación de la emisión del contaminante se hizo al compartimento de agua, la fugacidad a este varía desde el 4.18% del BAC (Tabla 33), incrementando hasta el de mayor porcentaje del 44.9% del Dio-DAC (Tabla 61); por lo que se puede inferir que la tendencia de los quats por el medio acuático, ha ido aumentando conforme evolucionan en sus diferentes generaciones mencionadas previamente en el marco teórico.

De igual forma en el escenario de la emisión solo al compartimento de agua, los tiempos de persistencia de los quats varían desde las 5710 hrs del BAC (Tabla 33), disminuyendo hasta las 693 hrs del Dio-DAC (Tabla 61); por lo que, en este caso de emisión, a pesar de que el Dio-DAC tiene mayor tendencia por el compartimento de agua en relación a los otros quats, su tiempo de persistencia es menor. También en la emisión a este medio, puede observarse la tendencia de estos quats por el compartimento de sedimentos, toda vez que es del 95.8% para el BAC (Tabla 33) 95.7% para el ADEBAC (Tabla 40), 89.2% del DDAC (Tabla 47), 78 % del ODDAC (Tabla 54) y del 55.1% del Dio-DAC (Tabla 61).

Cuando la emisión de estos quats se realiza por igual a los compartimentos aire, agua y suelo (1000 kg/hr), se observa también la tendencia de la fugacidad por el compartimento de sedimentos para el BAC, ADEBAC, DDAC, tal como se expone en la Tabla 31, Tabla 38, Tabla 45 respectivamente.

En el supuesto de que la emisión es exclusivamente al compartimento de aire, resulta que en general, menos del 2.2% de estos quats tienden a permanecer en el mismo (Tabla 32, Tabla 39, Tabla 46, Tabla 53 y Tabla 60). Esto debido a que estas sustancias no son nada volátiles, en concordancia con los datos del marco teórico y los resultados del programa STPWIN.

En general en todas las permutaciones de los escenarios posibles de emisiones de los cinco compuestos al ambiente, la fugacidad se centra hacia los compartimentos de suelo y sedimentos, aun cuando la emisión se realiza solo en el compartimento de aire o sólo en el compartimento de agua.

III.2 CÁLCULO DEL PORCENTAJE DE REMOCIÓN DEL BAC, ADEBAC, DDAC, ODDAC Y Dio-DAC, EN UNA PLANTA DE TRATAMIENTO BIOLÓGICA.

Para la estimación del porcentaje de remoción se consideró primero el escenario sin biodegradación denominado “el peor de los casos”, y en segundo lugar se empleó el método de la EPA para vidas medias (usando BLOWIN); ambos considerando una temperatura de 25°C.

El programa STPWIN estima la remoción para tiempos de 10,000 horas para el clarificador primario, para el tanque de aireación y para el tanque de sedimentación secundaria.

III.2.1 Escenario sin biodegradación

Condiciones del sistema de tratamiento:

Tabla 66

Condiciones del sistema de tratamiento para el BAC, ADEBAC, DDAC, ODDAC y Dio-DAC

	Constantes de tasa de biodegradación	2000 mg/L MLSS (h)
Tanque primario	0.00	10000
Tanque de aireación	0.00	10000
Tanque de sedimentación secundaria	0.00	10000

Nota. Fuente: “STP Fugacity Model: Predicted Fate in a Wastewater Treatment Facility”

^a Constantes de tasa de biodegradación

Tabla 67

Condiciones del sistema de tratamiento, vida media en biomasa

Vida media en biomasa (hr)					
	BAC	ADEBAC	DDAC	ODDAC	Dio-Dac
Tanque primario	7648.68	7887.90	9481.47	6570.79	1649.35
Tanque de aireación	7648.68	7887.90	9481.47	6570.79	1649.35
Tanque de sedimentación secundaria	7648.68	7887.90	9481.47	6570.79	1649.35

Nota. Fuente: "STP Fugacity Model: Predicted Fate in a Wastewater Treatment Facility"

Resultados:

III.2.1.1 BAC

Tabla 68

Balance químico de masa total en la PTAR, del BAC

	g/h	mol/h	%
Influyente	10	2.7×10^{-2}	100.00
Lodos primarios	1.49	1.4×10^{-3}	14.90
Lodos residuales	1.09	3.0×10^{-3}	10.94
Volatilización primaria	5.51×10^{-9}	1.5×10^{-11}	0.00
Volatilización de sedimentación	1.46×10^{-8}	4.0×10^{-11}	0.00
Aireación de gas	3.60×10^{-8}	9.8×10^{-11}	0.00
Biodegradación primaria	5.63×10^{-3}	1.5×10^{-5}	0.06
Biodegradación por sedimentación	1.64×10^{-3}	4.5×10^{-6}	0.02
Biodegradación por aireación	2.16×10^{-2}	5.9×10^{-5}	0.22
Efluente de agua final	7.39	2.0×10^{-2}	73.87

	g/h	mol/h	%
Remoción total	2.61	7.1 x10 ⁻³	26.13
Biodegradación total	2.89 x10 ⁻²	7.9 x10 ⁻⁵	0.29

Nota. Fuente: "STP Fugacity Model: Predicted Fate in a Wastewater Treatment Facility"

III.2.1.2 ADEBAC

Tabla 69

Balance químico de masa total, del ADEBAC

	g/h	mol/h	%
Influente	10	2.7 x10 ⁻²	100.00
Lodos primarios	1.65	4.5 x10 ⁻³	16.48
Lodos residuales	1.19	3.2 x10 ⁻³	11.92
Volatilización primaria	4.40 x10 ⁻⁹	1.2 x10 ⁻¹¹	0.00
Volatilización de sedimentación	1.16 x10 ⁻⁸	3.2 x10 ⁻¹¹	0.00
Aireación de gas	2.87 x10 ⁻⁸	7.8 x10 ⁻¹¹	0.00
Biodegradación primaria	6.05 x10 ⁻³	1.6 x10 ⁻⁵	0.06
Biodegradación por sedimentación	1.76 x10 ⁻³	4.8 x10 ⁻⁶	0.02
Biodegradación por aireación	2.32 x10 ⁻²	6.3 x10 ⁻⁵	0.23
Efluente de agua final	7.13	1.9 x10 ⁻²	71.29
Remoción total	2.87	7.8 x10 ⁻³	28.71
Biodegradación total	3.10 x10 ⁻²	8.4 x10 ⁻⁵	0.31

Nota. Fuente: "STP Fugacity Model: Predicted Fate in a Wastewater Treatment Facility"

III.2.1.3 DDAC

Tabla 70

Balance químico de masa total, del DDAC

	g/h	mol/h	%
Influente	10	2.8×10^{-2}	100.00
Lodos primarios	3.88	1.1×10^{-2}	38.83
Lodos residuales	2.47	6.8×10^{-3}	24.70
Volatilización primaria	1.32×10^{-7}	3.6×10^{-10}	0.00
Volatilización de sedimentación	3.27×10^{-7}	9.0×10^{-10}	0.00
Aireación de gas	8.06×10^{-7}	2.2×10^{-9}	0.00
Biodegradación primaria	1.20×10^{-2}	3.3×10^{-5}	0.12
Biodegradación por sedimentación	3.26×10^{-3}	9.0×10^{-6}	0.03
Biodegradación por aireación	4.29×10^{-2}	1.2×10^{-4}	0.43
Efluente de agua final	3.59	9.9×10^{-3}	35.90
Remoción total	6.41	1.8×10^{-2}	64.10
Biodegradación total	5.82×10^{-2}	1.6×10^{-4}	0.58

Nota. Fuente: "STP Fugacity Model: Predicted Fate in a Wastewater Treatment Facility"

III.2.1.4 ODDC

Tabla 71

Balance químico de masa total, del ODDAC

	g/h	mol/h	%
Influente	10	3.0×10^{-2}	100.00

	g/h	mol/h	%
Lodos primarios	9.85×10^{-1}	2.9×10^{-3}	9.85
Lodos residuales	7.75×10^{-1}	2.3×10^{-3}	7.75
Volatilización primaria	1.78×10^{-7}	5.3×10^{-10}	0.00
Volatilización de sedimentación	4.77×10^{-7}	1.4×10^{-9}	0.00
Aireación de gas	1.18×10^{-6}	3.5×10^{-9}	0.00
Biodegradación primaria	4.29×10^{-3}	1.3×10^{-5}	0.04
Biodegradación por sedimentación	1.27×10^{-3}	3.8×10^{-6}	0.01
Biodegradación por aireación	1.67×10^{-2}	5.0×10^{-5}	0.17
Efluente de agua final	8.22	2.5×10^{-2}	82.18
Remoción total	1.78	5.3×10^{-3}	17.82
Biodegradación total	2.22×10^{-2}	6.7×10^{-5}	0.22

Nota. Fuente: "STP Fugacity Model: Predicted Fate in a Wastewater Treatment Facility"

III.2.1.5 Dio-DAC

Tabla 72

Balance químico de masa total, del Dio-DAC

	g/h	mol/h	%
Influente	10	3.3×10^{-2}	100.00
Lodos primarios	1.40×10^{-1}	4.6×10^{-4}	1.40
Lodos residuales	2.26×10^{-1}	7.4×10^{-4}	2.26
Volatilización primaria	1.18×10^{-7}	3.8×10^{-10}	0.00
Volatilización de sedimentación	3.20×10^{-7}	1.0×10^{-9}	0.00
Aireación de gas	7.88×10^{-7}	2.6×10^{-9}	0.00

	g/h	mol/h	%
Biodegradación primaria	2.06×10^{-3}	6.7×10^{-6}	0.02
Biodegradación por sedimentación	6.16×10^{-4}	2.0×10^{-6}	0.01
Biodegradación por aireación	8.12×10^{-3}	2.7×10^{-6}	0.08
Efluente de agua final	9.62	3.1×10^{-2}	96.23
Remoción total	3.77×10^{-1}	1.2×10^{-3}	3.77
Biodegradación total	1.08×10^{-2}	3.5×10^{-5}	0.11

Nota. Fuente: "STP Fugacity Model: Predicted Fate in a Wastewater Treatment Facility"

Resumen de resultados:

Tabla 73

Porcentaje de remoción usando 10000 horas de BioP, BioA y BioS

	BAC	ADEBAC	DDAC	ODDAC	Dio-DAC
Remoción total	26.13	23.33	64.10	17.82	3.77
Biodegradación total	0.29	0.27	0.58	0.22	0.11
Adsorción total de lodos	25.84	23.06	63.52	17.59	3.66
Total al aire	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

Nota. Elaboración propia. Fuente: "STP Fugacity Model: Predicted Fate in a Wastewater Treatment Facility"

III.2.2 Método de la EPA para vidas medias de biodegradación (usando BLOWIN)

Condiciones del sistema de tratamiento para cada quat:

Tabla 74

Condiciones del sistema de tratamiento para el BAC

	Constantes de tasa de biodegradación	Vida media de biomasa (h)	en 2000 mg/L MLSS (h)
Tanque primario	0.00	229.46	300.00
Tanque de aireación	0.03	22.95	30.00
Tanque de sedimentación secundaria	0.03	22.95	30.00

Nota. Fuente: "STP Fugacity Model: Predicted Fate in a Wastewater Treatment Facility"

^a Constantes de tasa de biodegradación

Tabla 75

Condiciones del sistema de tratamiento para el ADEBAC

	Constantes de tasa de biodegradación	Vida media de biomasa (h)	en 2000 mg/L MLSS (h)
Tanque primario	0.00	236.64	300.00
Tanque de aireación	0.03	23.66	30.00
Tanque de sedimentación secundaria	0.03	23.66	30.00

Nota. Fuente: "STP Fugacity Model: Predicted Fate in a Wastewater Treatment Facility"

^a Constantes de tasa de biodegradación

Tabla 76

Condiciones del sistema de tratamiento para el DDAC

	Constantes de tasa de biodegradación	Vida media de biomasa (h)	en 2000 mg/L MLSS (h)
Tanque primario	0.07	9.48	10.00
Tanque de aireación	0.73	0.95	1.00
Tanque de sedimentación secundaria	0.73	0.95	1.00

Nota. Fuente: "STP Fugacity Model: Predicted Fate in a Wastewater Treatment Facility"

^a Constantes de tasa de biodegradación

Tabla 77

Condiciones del sistema de tratamiento para el ODDAC

	Constantes de tasa de biodegradación	Vida media de biomasa (h)	en 2000 mg/L MLSS (h)
Tanque primario	0.11	6.57	10.00
Tanque de aireación	1.05	0.66	1.00
Tanque de sedimentación secundaria	1.05	0.66	1.00

Nota. Fuente: "STP Fugacity Model: Predicted Fate in a Wastewater Treatment Facility"^a Constantes de tasa de biodegradación**Tabla 78**

Condiciones del sistema de tratamiento para el Dio-DAC

	Constantes de tasa de biodegradación	Vida media de biomasa (h)	en 2000 mg/L MLSS (h)
Tanque primario	0.14	4.95	30.00
Tanque de aireación	1.40	0.49	3.00
Tanque de sedimentación secundaria	1.40	0.49	3.00

Nota. Fuente: "STP Fugacity Model: Predicted Fate in a Wastewater Treatment Facility"^a Constantes de tasa de biodegradación*Resultados:*

III.2.2.1 BAC

Tabla 79

Balance químico de masa total en la PTAR, del BAC

	g/h	mol/h	%
Influyente	10	2.7×10^{-2}	100.00
Lodos primarios	1.46	4.0×10^{-3}	14.63

	g/h	mol/h	%
Lodos residuales	5.61×10^{-1}	1.5×10^{-3}	5.61
Volatilización primaria	5.41×10^{-9}	1.5×10^{-11}	0.00
Volatilización de sedimentación	7.50×10^{-9}	2.0×10^{-11}	0.00
Aireación de gas	1.86×10^{-8}	5.1×10^{-11}	0.00
Biodegradación primaria	1.84×10^{-1}	5.0×10^{-4}	1.84
Biodegradación por sedimentación	2.81×10^{-1}	7.6×10^{-4}	2.81
Biodegradación por aireación	3.73	1.0×10^{-4}	37.5
Efluente de agua final	3.79	1.0×10^{-2}	37.86
Remoción total	6.21	1.7×10^{-2}	62.14
Biodegradación total	4.19	1.1×10^{-2}	41.90

Nota. Fuente: "STP Fugacity Model: Predicted Fate in a Wastewater Treatment Facility", (using Biowin/EPA draft method)

III.2.2.2 ADEBAC

Tabla 80

Balance químico de masa total, del ADEBAC

	g/h	mol/h	%
Influente	10	2.7×10^{-2}	100.00
Lodos primarios	1.62	4.4×10^{-3}	16.16
Lodos residuales	5.85×10^{-1}	1.6×10^{-3}	5.85
Volatilización primaria	4.32×10^{-9}	1.2×10^{-11}	0.00
Volatilización de sedimentación	5.71×10^{-9}	1.6×10^{-11}	0.00
Aireación de gas	1.42×10^{-8}	3.9×10^{-11}	0.00

	g/h	mol/h	%
Biodegradación primaria	1.98 x10 ⁻¹	5.4 x10 ⁻⁴	1.98
Biodegradación por sedimentación	2.88 x10 ⁻¹	7.8 x10 ⁻⁴	2.88
Biodegradación por aireación	3.82	1.0 x10 ⁻²	38.17
Efluente de agua final	3.50	9.5 x10 ⁻³	34.97
Remoción total	6.50	1.8 x10 ⁻²	65.03
Biodegradación total	4.30	1.2 x10 ⁻²	43.02

Nota. Fuente: "STP Fugacity Model: Predicted Fate in a Wastewater Treatment Facility", (using Biowin/EPA draft method)

III.2.2.3 DDAC

Tabla 81

Balance químico de masa total, del DDAC

	g/h	mol/h	%
Influyente	1.00	2.8 x10 ⁻²	100.00
Lodos primarios	1.21 x10 ⁻²	4.9 x10 ⁻³	17.69
Lodos residuales	6.01 x10 ⁻⁸	3.3 x10 ⁻⁵	0.12
Volatilización primaria	1.60 x10 ⁻⁹	1.7 x10 ⁻¹⁰	0.00
Volatilización de sedimentación	4.87 x10 ⁻⁹	4.4 x10 ⁻¹²	0.00
Aireación de gas	5.45	1.3 x10 ⁻¹¹	0.00
Biodegradación primaria	5.45	1.5 x10 ⁻²	54.48
Biodegradación por sedimentación	1.59 x10 ⁻¹	4.4 x10 ⁻⁴	1.59
Biodegradación por aireación	2.59	7.2 x10 ⁻³	25.93

	g/h	mol/h	%
Efluente de agua final	1.75×10^{-2}	4.8×10^{-5}	0.18
Remoción total	9.98	2.8×10^{-2}	99.82
Biodegradación total	8.20	2.3×10^{-2}	82.01

Nota. Fuente: "STP Fugacity Model: Predicted Fate in a Wastewater Treatment Facility", (using Biowin/EPA draft method)

III.2.2.4 ODDAC

Tabla 82

Balance químico de masa total, del ODDAC

	g/h	mol/h	%
Influente	10	3.0×10^{-2}	100.00
Lodos primarios	6.89×10^{-1}	2.1×10^{-3}	6.89
Lodos residuales	2.12×10^{-2}	6.4×10^{-5}	0.21
Volatilización primaria	1.25×10^{-7}	3.7×10^{-10}	0.00
Volatilización de sedimentación	1.31×10^{-8}	3.9×10^{-11}	0.00
Aireación de gas	4.03×10^{-8}	1.2×10^{-10}	0.00
Biodegradación primaria	3.01	9.0×10^{-3}	30.05
Biodegradación por sedimentación	3.47×10^{-1}	1.0×10^{-3}	3.47
Biodegradación por aireación	5.71	1.7×10^{-2}	57.13
Efluente de agua final	2.25×10^{-1}	6.7×10^{-4}	2.25
Remoción total	9.77	2.9×10^{-2}	97.75
Biodegradación total	9.06	2.7×10^{-2}	90.65

Nota. Fuente: "STP Fugacity Model: Predicted Fate in a Wastewater Treatment Facility", (using Biowin/EPA draft method)

III.2.2.5 Dio-DAC

Tabla 83

Balance químico de masa total, del Dio-DAC

	g/h	mol/h	%
Influyente	10	3.3×10^{-2}	100.00
Lodos primarios	1.31×10^{-1}	4.3×10^{-4}	1.31
Lodos residuales	5.03×10^{-2}	1.6×10^{-4}	0.50
Volatilización primaria	1.10×10^{-7}	3.6×10^{-10}	0.00
Volatilización de sedimentación	7.11×10^{-8}	2.3×10^{-10}	0.00
Aireación de gas	1.92×10^{-7}	6.3×10^{-10}	0.00
Biodegradación primaria	6.43×10^{-1}	2.1×10^{-3}	6.43
Biodegradación por sedimentación	4.57×10^{-1}	1.5×10^{-3}	4.57
Biodegradación por aireación	6.58	2.2×10^{-2}	65.79
Efluente de agua final	2.14	7.0×10^{-3}	21.40
Remoción total	2.14	2.6×10^{-2}	78.60
Biodegradación total	7.68	2.5×10^{-2}	76.79

Nota. Fuente: "STP Fugacity Model: Predicted Fate in a Wastewater Treatment Facility", (using Biowin/EPA draft method)

Resumen de resultados:

Tabla 84

Porcentaje de remoción. STPWIN, (BIOWIN/EPA draft method)

	BAC	ADEBAC	DDAC	ODDAC	Dio-DAC
Remoción total	64.14	58.78	99.82	97.75	78.60
Biodegradación total	41.90	40.49	82.01	90.65	76.79
Adsorción total de lodos	20.24	18.28	17.81	7.10	1.81
Total al aire:	0.00	0.0	0.00	0.00	0.00

Nota. Elaboración propia. Fuente: "STP Fugacity Model: Predicted Fate in a Wastewater Treatment Facility"

III.2.1 DISCUSIÓN DE RESULTADOS, STPWIN.

Para el escenario de simulación en la que no existe biodegradación, en la que se estima la remoción de la sustancia para tiempos de 10,000 hrs para el tanque primario, tanque de aireación y tanque secundario, la vida media en biomasa es idéntica para cada quat, para cada uno de los tanques mencionados (Tabla 67), por lo que se asume que el tiempo de permanencia de cada quat es el mismo para cada uno de los tanques.

El mayor porcentaje de remoción total (Figura 20) en el "peor de los escenarios", es del DDAC con el 64.10% (Tabla 70) y el menor es el del Dio-DAC con el 3.77% (Tabla 72); en los cinco quats, no existe porcentaje de volatilización al aire (Tabla 73).

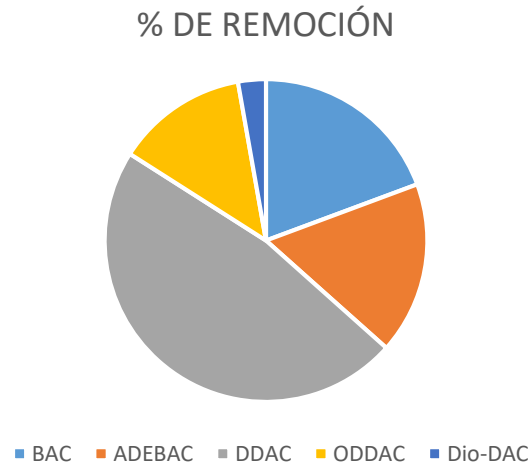
En cuanto a la Biodegradación total de cada quat para este escenario, se observa que el mayor porcentaje es del DDAC con el 0.58% y el de menor es del 0.11% del Dio-DAC (Tabla 73). De igual forma, la Adsorción total a lodos se presenta en mayor porcentaje para el DDAC con el 63.52% y el de menor porcentaje es el Dio-DAC con el 3.66% (Tabla 73). Derivado de esto, se tiene que el principal proceso que interviene en la remoción de los quats en una PTAR biológica, es la adsorción en lodos, ya que su biodegradación es mínima, este comportamiento de los quats en la simulación concuerda con la literatura, la cual menciona que estos compuestos al tener una carga positiva, se absorben fuertemente en el suelo y los sedimentos (EPA, 2017).

Chang et.al (2015) mencionan que la tendencia a la adsorción en los lodos, aumenta conforme incrementa el longitud de cadena del quat, en los quats evaluados se obtuvo que el BAC, tiene un porcentaje de adsorción en lodos del 25.84% (Tabla 73) y una cadena de 14 carbonos, el DDAC tiene un porcentaje de adsorción del 63.52% (Tabla 73), este compuesto tiene dos

cadenas de 10 carbonos; mientras que el de menor porcentaje de adsorción en lodos es el Dio-DAC con 3.66%, y el cual está compuesto de dos cadenas de 8 carbonos.

Figura 20

Porcentaje de remoción, escenario sin biodegradación.



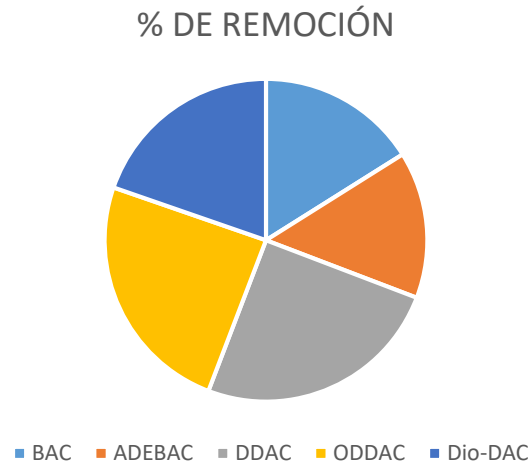
Nota. Fuente: Elaboración propia. "STP Fugacity Model: Predicted Fate in a Wastewater Treatment Facility"

Por otro lado, para la estimación de la remoción de la sustancia mediante el método de la EPA (usando BIOWIN), El programa STPWIN ocupó diferentes condiciones del sistema de tratamiento para cada quat (valores de Constantes de tasa de biodegradación, vida media en biomasa (hr) y 2000 mg/L MLSS (hr), para cada uno de los tanques del proceso). Lo que respecta a los valores de la vida media en biomasa, la de mayor duración fue de 229.46 hrs en el tanque primario, para el BAC, y fueron disminuyendo hasta el valor de 4.95 hrs en el tanque primario para el Dio-DAC. (Tabla 74 – Tabla 78).

En cuanto a los porcentajes de remoción total estimados mediante BIOWIN (Figura 21), se obtuvo que el de mayor porcentaje de remoción es el DDAC con el 99.82% (Tabla 81) y el de menor es el BAC con el 62.14% (Tabla 79). A pesar de que se estimó que el DDAC es el de mayor porcentaje de remoción, su porcentaje de biodegradación total es del 82.01% (Tabla 81), mientras que el ODDAC es aquel que cuenta con un porcentaje de biodegradación del 90.65% (Tabla 82). Al igual que en el escenario sin biodegradación, en este caso se estimó que no existe porcentaje de liberación al aire.

Figura 21

Porcentaje de remoción, escenario sin biodegradación.



Nota. Fuente: Elaboración propia. Fuente: "STP Fugacity Model: Predicted Fate in a Wastewater Treatment Facility"

En ambos escenarios de estimación, la sustancia que tiene mejor porcentaje de remoción es el DDAC, mientras que el de menor porcentaje de remoción varía de un método al otro.

CONCLUSIONES

Derivado de las estimaciones realizadas para el análisis del destino ambiental de los quats BAC, ADEBAC, DDAC, ODDAC y Dio-DAC, mediante los programas in silico LEVEL3NT y STPWIN de la interfaz de EPI Suite, este estudio concluye que:

1. De acuerdo con los valores de la Constante de la Ley de Henry (HCL), también estimados por la interfaz, los cinco quats evaluados son no volátiles por lo que una vez en el ambiente, su concentración permanece distribuida en los compartimentos ambientales de agua, suelo y sedimento.
2. Los datos estimados del coeficiente de adsorción del suelo (K_{oc}), muestran que los cinco compuestos presentan una fuerte adsorción en el suelo, por lo que son eliminados de la columna de agua mediante sorción a los sedimentos y a las partículas.
3. Los cinco compuestos evaluados presentan un Coeficiente de partición octanol-agua en el rango de 2-4 que es interpretado como que son sustancias que tienden a absorberse

bien a través de las membranas biológicas a excepción del DDAC que presenta un Log $K_{ow} > 4$ por lo que se define como que no tiende a absorberse bien.

4. Mediante los resultados de fugacidad obtenidos, se concluye que, para todos los escenarios diferentes de la emisión a los compartimentos ambientales, los cinco compuestos tienden a transportarse principalmente a los compartimentos de suelo y sedimentos, descartando completamente su permanencia en la atmósfera. Toda vez que son compuestos que tienen una fuerte adsorción en suelo y sedimentos debido a que tienen un comportamiento catiónico, en las que el catión puede ser absorbido en superficies cargadas negativamente presentes en las arcillas del suelo y/o en materia orgánica.
5. El BAC y el ADEBAC son los compuestos que presentan mayor tiempo de persistencia en el medio, permaneciendo por periodos de tiempo de semanas a meses de acuerdo con lo estimado por el programa de BIOWIN, mientras que el DDAC, ODDAC y el Dio-DAC tienen un tiempo de permanencia de semanas.
6. Los cinco quats no presentan mucho porcentaje de eliminación cuando no existe biodegradación, siendo el máximo de 64.10% presentado por el DDAC, y el mínimo fue de 3.77% del Dio-DAC. Por el otro lado, mediante la estimación de las vidas medias de biodegradación por el método de la EPA, se obtiene que los quats son eliminados principalmente por procesos de degradación y en menor parte por el proceso de adsorción en lodos.
7. A pesar de que mediante el método de la EPA para la estimación del porcentaje de remoción de los quats en una PTAR biológica, se obtuvo una remoción considerablemente buena, hay que considerar que la cantidad de estas sustancias liberadas al ambiente han sido excesivas desde el inicio de la pandemia por SARS-CoV-2 y, que no necesariamente el cien por ciento de las emisiones de estos compuestos pasarán por una planta de tratamiento de agua residual antes de llegar a cualquiera de los compartimentos ambientales. Sin mencionar que previas investigaciones han encontrado estos compuestos en altas concentraciones en cuerpos de agua de países como E.E.U.U y China.
8. Mediante este estudio in silico se pudieron obtener y recopilar datos sobre los cinco principales compuestos de amonio cuaternario usados en desinfectantes durante la pandemia por SARS-CoV-2, de una forma teórica mediante modelos matemáticos bien establecidos y aceptados por la comunidad científica, todo esto en un periodo corto de tiempo y con recursos gratuitos disponibles para cualquier usuario. Cabe recalcar que los resultados obtenidos mediante las simulaciones presentan concordancia con la información y datos presentes en la bibliografía.

Es importante recalcar que el uso excesivo de estos compuestos al medio ambiente conlleva serias consecuencias negativas para la salud humana y para el medio acuático. Por lo que se recomienda fomentar el uso responsable de las mismas, con información precisa sobre su método de aplicación y en su caso, sobre su procedimiento de disposición final.

REFERENCIAS:

- Arnold, W. A., & Hora, P. I. (2020). Photochemical fate of quaternary ammonium compounds in river water. *Environmental Science: Processes & Impacts*, 1368-1381.
- Bures, F. (2019). Quaternary Ammonium Compounds: Simple in Structure, Complex in Application. *Topics in Current Chemistry*, 377,14. Obtenido de About List N: Disinfectants for Coronavirus (COVID-19): <https://www.epa.gov/coronavirus/about-list-n-disinfectants-coronavirus-covid-19-0>
- Ceja, Z. (Enero de 2019). *Oficina de Información Científica y Tecnológica para el Congreso de la Unión*. Obtenido de Tratamiento de aguas residuales : https://foroconsultivo.org.mx/INCYTU/documentos/Completa/INCYTU_19-028.pdf
- Chang, Z., Fang, C., Guang-ming, Z., Min, J., Zhong-zhu, Y., Zhi-gang, Y., . . . Liu-qing, S. (2015). Quaternary ammonium compounds (QACs): A review on occurrence, fate and toxicity in the environment. *Science of the Total Environment*, 518-519, 352-362.
- Cody, C. (1996). *New Jersey Patente nº EP 0 726 246 A1*. Obtenido de <https://patentimages.storage.googleapis.com/aa/72/fb/279cf72f9941b9/EP0726246A1.pdf>
- CONAGUA. (Noviembre de 2017). *Comisión Nacional del Agua*. Obtenido de Estadísticas del agua en México : http://sina.conagua.gob.mx/publicaciones/EAM_2017.pdf
- Dai, X., Wang, C., C.W. Lam, J., Yamashita, N., Yamazaki, E., Horii, Y., . . . Li, X. (2018). Accumulation of quaternary ammonium compounds as emerging contaminants in sediments collected from the Pearl River Estuary, China and Tokyo Bay, Japan. *Marine Pollution Bulletin*, 276-281.
- Delgado Ortega, H. S. (2016). *Análisis de la exposición de compuestos emergentes en varios escenarios de usos del agua [Tesis de Maestría, Universidad Politécnica de Cataluña]*. Repositorio institucional . Obtenido de <https://upcommons.upc.edu/handle/2117/84968?locale-attribute=en>
- Díaz Ruiz, R. (2013). *Causas y soluciones del problema de olores en plantas de tratamiento de aguas residuales [Tesis de Licenciatura, UNAM]*. Repositorio Institucional. Obtenido de Universidad Nacional Autónoma: https://repositorio.unam.mx/contenidos/causas-y-soluciones-del-problema-de-olores-en-plantas-de-tratamiento-de-aguas-residuales-350507?c=pnOoQb&d=false&q=*&i=1&v=1&t=search_0&as=0
- Dotson, G. S., Lotter, J. T., Zisook, R. E., Gaffney, S. H., Maier, A., & Colvin, J. (2020). Setting occupational exposure limits for antimicrobial agents: A case study based on a

quaternary ammonium compound-based disinfectant. *Toxicology and Industrial Health*, 319-633.

ECHA. (Julio de 2016). *European Chemicals Agency*. Obtenido de Guía práctica. Cómo utilizar y comunicar los análisis (Q)SAR:

https://echa.europa.eu/documents/10162/13655/pg_report_qsars_es.pdf/f0b8a10a-fa73-43a7-8e53-b2a8990f4fb5

EPA . (Marzo de 2017). *United States Environmental Protection Agency*. Obtenido de Alkyl Dimethyl Benzyl Ammonium Chloride (ADBAC) Final Work Plan :
https://www.turi.org/content/download/13430/205412/file/ADBAC_EPA_final_workplan_2017_EPA-HQ-OPP-2015-0737-0004.pdf

EPA. (2006). *United States Environmental Protection Agency*. Obtenido de Reregistration Eligibility Decision for Alkyl Dimethyl Benzyl Ammonium Chloride (ADBAC):
https://www3.epa.gov/pesticides/chem_search/reg_actions/reregistration/red_G-2_3-Aug-06.pdf

EPA. (Agosto de 2006). *United States Environmental Protection Agency* . Obtenido de Reregistration Eligibility Decision for Aliphatic Alkyl Quaternaries (DDAC):
https://www3.epa.gov/pesticides/chem_search/reg_actions/reregistration/red_G-6_3-Aug-06.pdf

EPA. (2012). *Sustainable Futures / P2 Framework Manual*. Obtenido de 5. Estimating Physical / Chemical and Environmental Fate Properties with EPI Suite™:
<https://www.epa.gov/sites/default/files/2015-05/documents/05.pdf>

EPA. (Marzo de 2017). *United States Environmental Protection Agency*. Obtenido de Didecyl Dimethyl Ammonium Chloride (DDAC) Final work plan:
https://www.turi.org/content/download/13431/205422/file/DDAC_Final%20Work%20Plan%20Registration%20Review_2017.pdf

EPA. (2 de Julio de 2020). *Sustainable Futures / P2 Framework Manual 2012 EPA-748-B12-001*. Obtenido de Introduction to predictive models and methods :
<https://www.epa.gov/sites/default/files/2015-05/documents/04.pdf>

EPA. (2020). *United States Environmental Protection Agency*. Obtenido de List N Tool: COVID-19 Disinfectants: <https://cfpub.epa.gov/wizards/disinfectants/>

EPA de EE. UU. (2022). Programas de estimación Interface Suite™ para Microsoft® Windows, v 4.11. Agencia de Protección Ambiental de los Estados Unidos, Washington, DC, EE. UU.

EPA. (18 de Enero de 2022). *EPI Suite™-Estimation Program Interface*. Obtenido de <https://www.epa.gov/tsca-screening-tools/epi-suitetm-estimation-program-interface>

Fina, B. L., Lombarte, M., & Rigalli, A. (2013). INVESTIGACIÓN DE UN FENÓMENO NATURAL: ¿ESTUDIOS IN VIVO, IN VITRO O IN SILICO? *Actualizaciones en Osteología*, 283-288. Obtenido de https://ri.conicet.gov.ar/bitstream/handle/11336/21655/CONICET_Digital_Nro.25729.pdf?sequence=1&isAllowed=y

- Gonzalbes, R., de Julián-Ortiz, J., & Fito-Lopez, C. (2014). Métodos computacionales en toxicología predictiva: aplicación a la reducción de ensayos con animales en el contexto de la legislación comunitaria REACH. *Revista de Toxicología*, 157-167.
- Hora, P. I., Pati, S. G., & McNamara, P. J. (2020). Increased Use of Quaternary Ammonium Compounds during the SARS-CoV-2 Pandemic and Beyond: Consideration of Environmental Implications. *Environmental Science & Technology Letters*, 622-631.
- Kaj, L., Wallberg, P., & Brorström-Lundén, E. (2014). Quaternary ammonium compounds. *Analyses in a Nordic cooperation on screening*. Dinamarca: Rosendahls-Schultz Grafisk.
- Kong, X. -Z., Xu, F. -L., He, W., Liu, W. -X., & Yang, B. (2016). Fugacity Models . En S. E. Jorgensen, *Ecological Model Types* (págs. 181-210). Beijing: Sven Erik Jørgensen.
- Mendoza, A., & Ize, I. (2017). LAS SUSTANCIAS QUÍMICAS EN MÉXICO. PERSPECTIVAS PARA UN MANEJO ADECUADO. *Revista internacional de contaminación ambiental*, 719-745.
- Muratov, E. N., Bajorath, J., Sheridan, R. P., Tetko, I. V., Filimonov, D., Poroikov, V., . . . Cohen, Y. (2020). QSAR without borders. *Chemical Society Reviews*, 3525-3564.
- National Center for Biotechnology. (2022). *PubChem Compound Summary for CID 61906*. Obtenido de Decyldimethyloctylammonium chloride: <https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/compound/Decyldimethyloctylammonium-chloride>
- National Center for Biotechnology Information. (2022). *PubChem Compound Summary for CID 62581*. Obtenido de Dimethyldioctylammonium chloride: <https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/compound/Dimethyldioctylammonium-chloride>
- National Center for Biotechnology Information. (2022). *PubChem Substance Record for SID 387103751, 85409-23-0*. Obtenido de <https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/substance/387103751>
- National Center for Biotechnology Information. (2022). *PubChem Summary for CID 8755*. Obtenido de Benzyldimethyltetradecylammonium chloride: <https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/compound/Benzyldimethyltetradecylammonium-chloride>
- National Center of Biotechnology Information. (25 de Junio de 2021). *National Library of Medicine*. Obtenido de Hazardous Substances Data Bank (HSDB): <https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/source/11933>
- National Center of Biotechnology Information. (2022). *PubChem Substance Record for CID 23558* . Obtenido de Didecyldimethylammonium choride: <https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/compound/Didecyldimethylammonium-chloride>
- Pati, S. G., & Arnold, W. A. (2020). Comprehensive screening of quaternary ammonium surfactants and ionic liquids in wastewater effluents and lake sediments. *Environmental Science: Processes & Impacts*, 430-441.
- Piovesan, B., & Tagkopoulos, I. (2019). Benzalkonium Chlorides: Uses, Regulatory Status and Microbial Resistance. *Applied and environmental microbiology*, 85(13).

- Ríos Ruiz, F. (2014). *COMPORTAMIENTO AMBIENTAL DE TENSIOACTIVOS COMERCIALES: BIODEGRADABILIDAD, TOXICIDAD Y OZONIZACIÓN* [Tesis Doctoral, Universidad de Granada]. Repositorio Institucional. Obtenido de <https://digibug.ugr.es/handle/10481/42048>
- Ruiz, A., & Jiménez, M. (2020). SARS-CoV-2 y pandemia de síndrome respiratorio agudo (COVID-19). *Ars Pharmaceutica (Internet)*, 63-79.
- Scior, T., Martínez, E., & Salinas, E. (2007). Los modelos in silico, una herramienta para el conocimiento farmacológico. *Elementos: Ciencia y cultura*, 45-48. Obtenido de <https://www.redalyc.org/pdf/294/29406806.pdf>
- TRENT UNIVERSITY. (s.f.). *TRENT UNIVERSITY*. Obtenido de Level III Model: <https://www.trentu.ca/cemc/resources-and-models/level-iii-model>
- U.S. Department of Health and Human Services. (3 de Octubre de 2019). *National Toxicology Program*. Obtenido de Biocides & Potential Respiratory Health Outcomes: <https://ntp.niehs.nih.gov/whatwestudy/assessments/noncancer/ongoing/biocides/index.html>