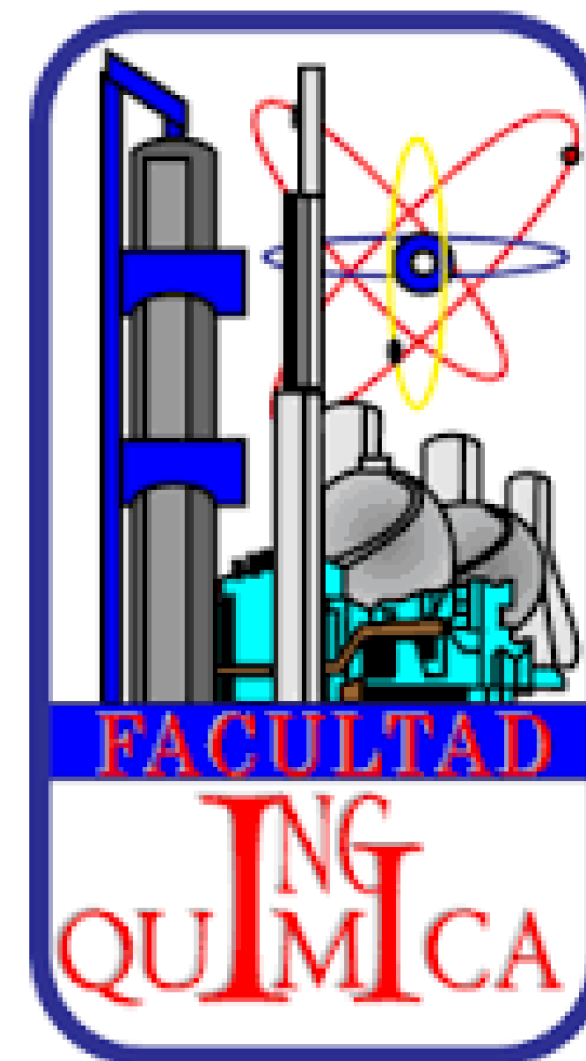




**BENEMÉRITA
UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE PUEBLA**

**FACULTAD DE INGENIERÍA QUÍMICA
COLEGIO DE INGENIERÍA AMBIENTAL**

COLOQUIO DE TESIS
Para obtener el título de la
Licenciatura en Ingeniería
Ambiental





ESTUDIO IN SILICO DE LA REMOCIÓN DE HIDROXITOLUENO BUTILADO (BHT), TERBUTILHIDROQUINONA (TBHQ), ACETATO DE BENCILO Y N,N-DIETIL-M-TOLUAMIDA EN UN SISTEMA DE TRATAMIENTO SECUNDARIO DE AGUAS RESIDUALES.

POR: ORIANA DOLORES HERRERA CORTÉS

Director de tesis
M.I. Ángel Silveti Loeza



INTRODUCCIÓN



SUSTANCIAS QUÍMICAS

Generación excesiva y distribución descontrolada de productos de uso personal.

“CONTAMINANTES EMERGENTE”



MODELOS QSAR

Herramienta para la identificación de las propiedades físicas, químicas, potencial toxico y destino ambiental de estas sustancias.

EPI WEB



EVALUACIÓN

Se analiza la tendencia a la **biodegradación** de cuatro sustancias que se encuentran en la lista Norman de contaminantes emergente, sustancias que están clasificadas como productos para el uso personal: **BHT**, la **TBHQ**, el **Acetato de bencilo** y el **N,N-Dietil-m-toluamida**



PLANTEAMIENTO DEL PROBLEMA





- ✓ Uso masivo y descontrolado
- ✓ Variación de concentración
- ✓ Aguas residuales como destino
- ✓ Sin regulación

CONTAMINANTES EMERGENTES



Persistencia, impacto y/o posibles efectos a largo plazo en la salud humana y los distintos compartimientos ambientales



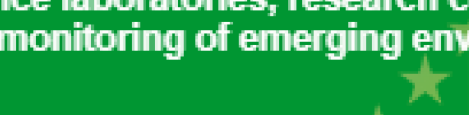
Estudios limitados, insuficientes a comparación del creciente número de sustancias Limitantes técnicas, económicas y de tiempo.



Las PTARs no cuentan con tratamientos físico-químicos y biológicos eficaces para la remoción de estas sustancias

Norman Network

700 sustancias divididas en 30 clases



NORMAN
Network of reference laboratories, research centres and related organisations for monitoring of emerging environmental substances



[Home](#) | [NORMAN Network](#) | [Working Groups](#) | [Membership](#) | [NORMAN Bulletin](#) | [Success Stories](#) | [Publications](#) | [Job opportunities](#) | [Contact](#) | [Gallery](#) | [Members' Area](#) | [NORMAN GA meetings](#)

Menu

- » Emerging Substances
- » DATABASES
- » Topics and Activities
- » Workshops and Events
- » QA/QC Issues
- » Glossary
- » Useful links
- » Members' Area

Home » Emerging Substances

NORMAN List of Emerging Substances

Algal toxins Biocide transformation products Biocides Bio-terrorism / Sabotage agents Disinfection by-products (drinking water) Disinfection by-products (drinking water) / biocides Disinfection by-products (drinking water) / Flame retardants Drugs of abuse Flame retardants Food additives	Gasoline additives Industrial chemicals Industrial chemicals / Biocides Industrial chemicals / Flame retardants Lubricants / Flame retardants Moth repellent / Antimicrobial agent Other Perfluoroalkylated substances and their transformation products Personal care products Personal care products	Personal care products / Biocides Personal care products / Food additives Pharmaceuticals Plant protection products Plant protection products / Biocides Plant protection products/Biocides Plasticisers Plasticisers / Flame retardants Surfactants Trace metals and their compounds
---	---	--

Search



Class/category I	Individual substances	CAS#
	Technical polychlorinated alkanes products (Alkanes, chloro)	61788-76-9
Algal toxins	Microcystin-LA / Cyanoginosin-LA	96180-79-9
	Microcystin-LR	101043-37-2
	Microcystin-RR	111755-37-4
	Microcystin-YR	101064-48-6
Biocide transformation products	Methyl triclosan	4640-01-1
Biocides	Chlorodimethylphenol (Chloroxylenol)	88-04-0
	o-Benzyl-p-chlorophenol (Chlorophene)	120-32-1
	Triclocarban	101-20-2
	Trichloronitromethane (Chloropicrin)	76-06-2
Bio-terrorism / Sabotage agents	1,1,1,3,3-Pentachloropropanone	1768-31-6
Disinfection by-products (drinking water)	1,1,1,3-Tetrachloropropanone	16995-35-0
	1,1,3,3-Tetrachloropropanone	632-21-3
	1,1,3-Trichloropropanone	921-03-9
	1,1-Dibromopropanone	867-54-9
	1,3-Dichloroketone	534-07-6



Justificación

Herramientas digitales

Información disponible

OBJETIVO

GENERAL .

Estimar la tasa de remoción total de Hidroxitolueno butilado (BHT), Terbutilhidroquinona (TBHQ), Acetato de bencilo y N,N-Dietil-m-toluamida en un sistema de tratamiento secundario de aguas residuales mediante el programa STPWin.



Específicos.



1. Predecir el porcentaje de remoción de Hidroxitolueno butilado (BHT), Terbutilhidroquinona (TBHQ), Acetato de bencilo y N,N-Dietil-m-toluamida en las diversas etapas de una planta de tratamiento de aguas residuales de lodos activados mediante el software STPWin.



2. Determinar la capacidad de biodegradabilidad de Hidroxitolueno butilado (BHT), Terbutilhidroquinona (TBHQ), Acetato de bencilo y N,N-Dietil-m-toluamida mediante el programa BioWin.



3. Comparar la eficiencia de eliminación del Hidroxitolueno butilado (BHT), Terbutilhidroquinona (TBHQ), Acetato de bencilo y N,N-Dietil-m-toluamida en un sistema de tratamiento secundario.



HIPOTESIS

La estimación de la remoción biológica mediante el modelo de relación cuantitativa estructura-actividad biológica del Hidroxitolueno butilado (BHT), la Terbutilhidroquinona (TBHQ), el Acetato de bencilo y el N,N-Dietil-m-toluamida alcanza valores superiores al 80% en un entorno evaluativo de tratamiento secundario de aguas residuales.

MARCO TEORICO

HASTA EL 2015, EL CAS
RECOPILO, ORGANIZÓ Y
PUBLICÓ 101 MILLONES
DE SQ.



Solo el 0.32%
cuentan con
regulación

12

CONTAMINANTE
EMERGENTE

PERSITENCIA

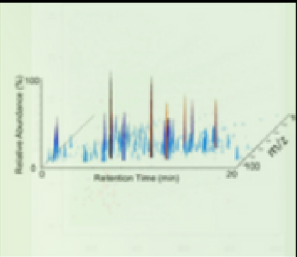
BAJA
DEGRADACIÓN

Clasificación de los CE: PPCP's

Tabla 1. *Compuestos considerados PPCPs.*

Tipo	Compuesto
Productos farmacéuticos	Antibióticos Hormonas Analgésicos Antiinflamatorios Antiepilépticos Reguladores de lípidos de la sangre B-bloqueadores Medios de contraste de diagnóstico Fármacos <u>cistostáticos</u>
Productos de cuidado personal	Agentes antimicrobianos Desinfectantes Almizcles sintéticos/fragancias Repelentes de insectos Conservadores Filtros solares

Fuente: (Castillo, 2020, pág. 17)



- Menu
 - Emerging Substances
 - DATABASES
 - Topics and Activities
 - Workshops and Events
 - QA/QC Issues
 - NORMAN Bulletin
 - Success Stories
 - Glossary
 - Useful links
 - Members' Area

Search

Home » Emerging Substances

NORMAN List of Emerging Substances

Algal toxins Biocide tranformation products Biocides Bio-terrorism / Sabotage agents Disinfection by-products (drinking water) Disinfection by-products (drinking water) / biocides Disinfection by-products (drinking water) / Flame retardants Drugs of abuse Flame retardants Food additives	Gasoline additives Industrial chemicals Industrial chemicals / Biocides Industrial chemicals / Flame retardants Lubricants / Flame retardants Moth repellent / Antimicrobial agent Other Perfluoroalkylated substances and their transformation products Personal care products Personal care products	Personal care products / Biocides Personal care products / Food additives Pharmaceuticals Plant protection products Plant protection products / Biocides Plant protection products/Biocides Plasticisers Plasticisers / Flame retardants Surfactants Trace metals and their compounds
--	---	--

Class/category I	Individual substances	CAS#
Algal toxins	Personal care products	Cyclopentadecanone
	Personal care products / Biocides	d-Limonene
		N,N-Diethyltoluamide
		Triclosan
Biocide tranformation products	Personal care products / Food additives	2,6-Di-tert-butylphenol
Biocides		2-Ethylthioacetic acid ethylester
		2-Methylthioacetic acid ethylester
		3-Methylthiopropionic acid
		Benzylacetate
		Butylated hydroxyanisole
		Butylated hydroxytoluene
		Dipropyltrisulfide
		Ethylene brassylate
		Habanolide
		tert-Butylhydroquinone
		Triethylcitrate

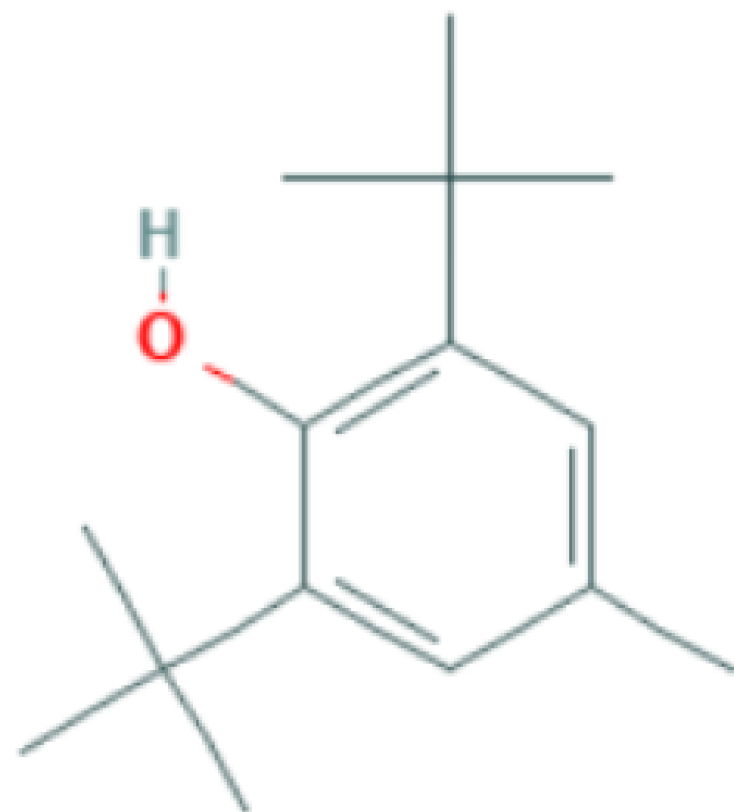


Figura 1. Estructura química del Hidroxitolueno butilado

Hidroxitolueno butilado (BHT)

Terbutilhidro- quinona (TBHQ)

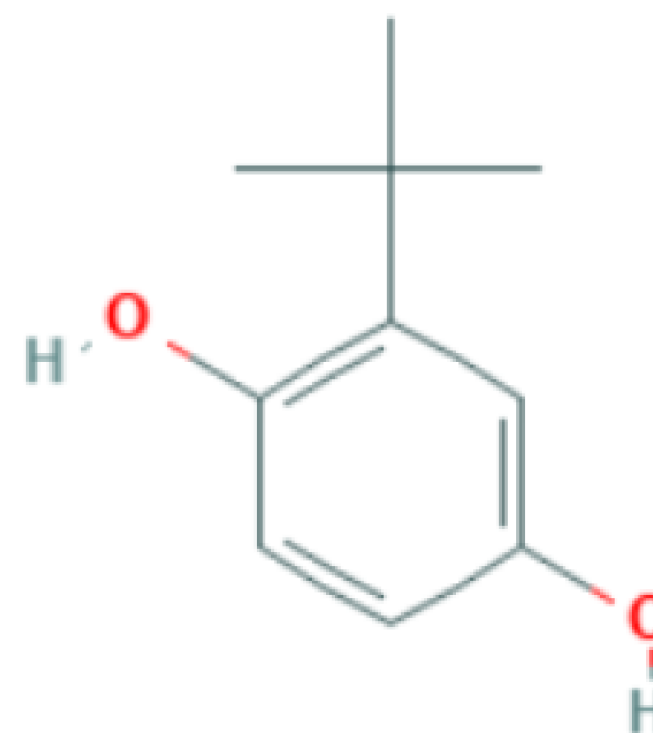


Figura 2. Estructura química de la Terbutilhidroquinona

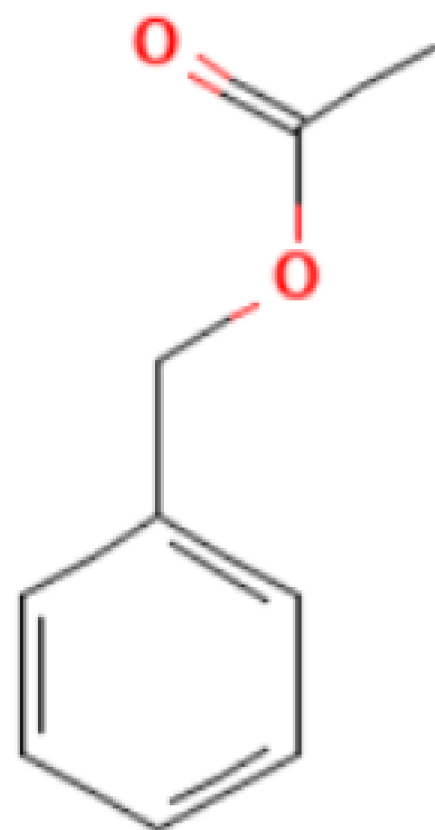


Figura 3. Estructura química del Acetato de bencilo

ACETATO DE BENCILO

N,N-Dietil-m- toluamida

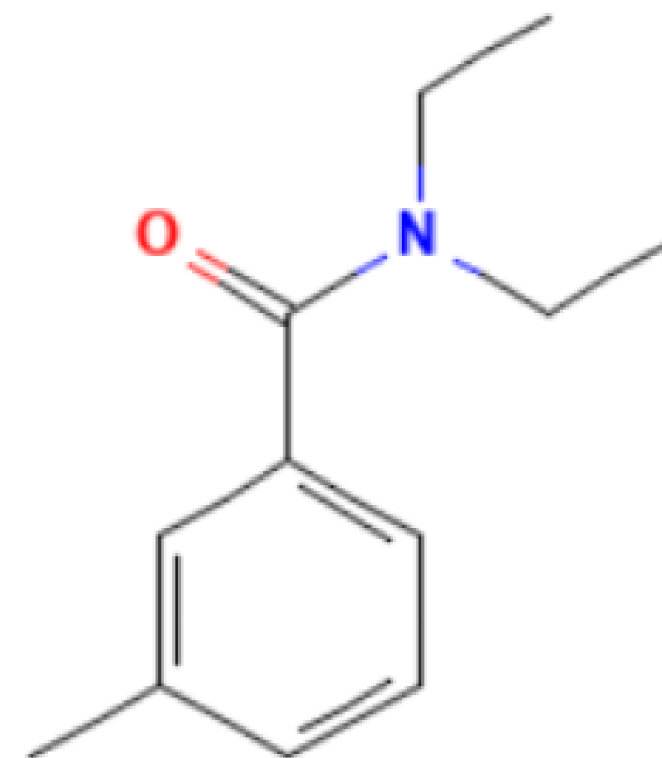
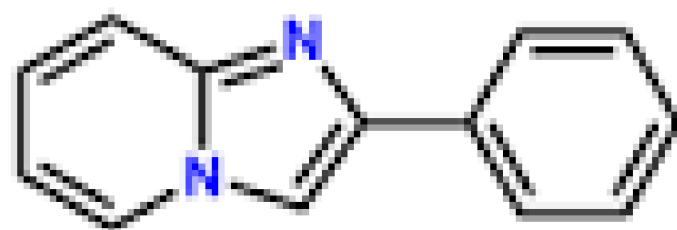


Figura 4. Estructura química de N-N-Dietil-m-toluamida

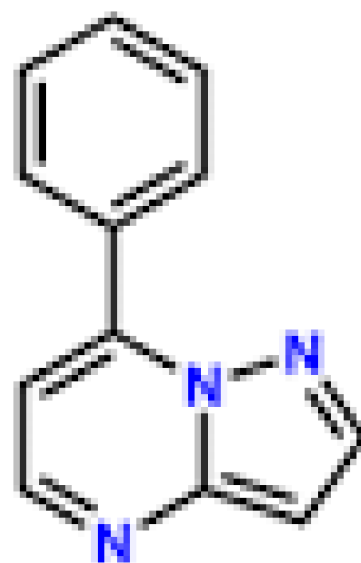
MODELOS PREDICTIVOS



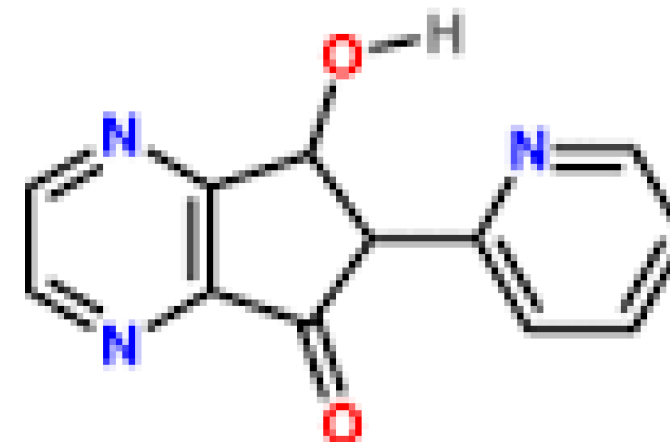
Basados en las Relaciones Estructura-Actividad (SAR: Structure Activity Relationships), que es un conjunto de técnicas para inferir propiedades y comportamiento de las sustancias químicas de interés sin datos disponibles, en función de su similitud estructural con una sustancia ya conocida (análogo).



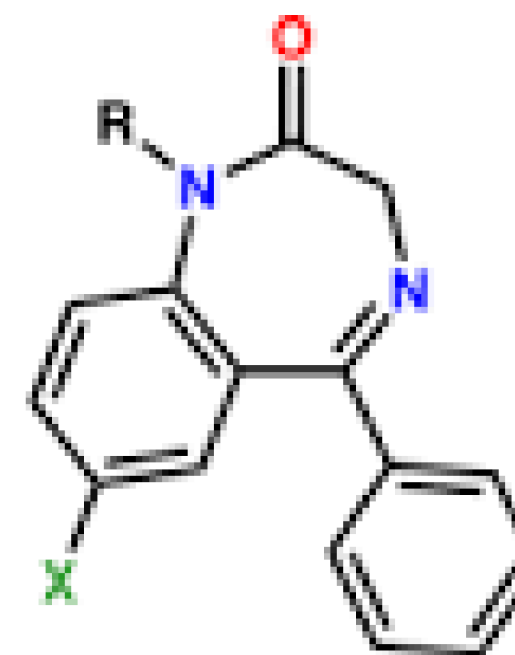
Imidazopyridines



pyrazolopyrimidine



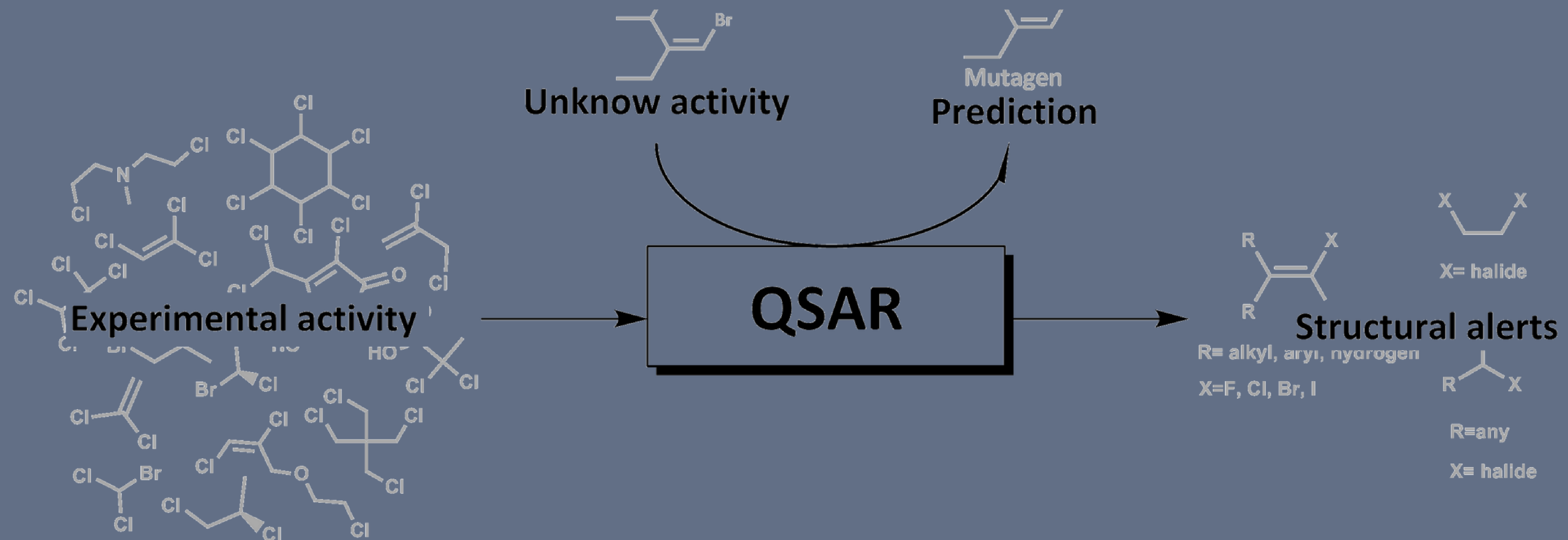
cyclopyrrolone



benzodiazepine

QSAR

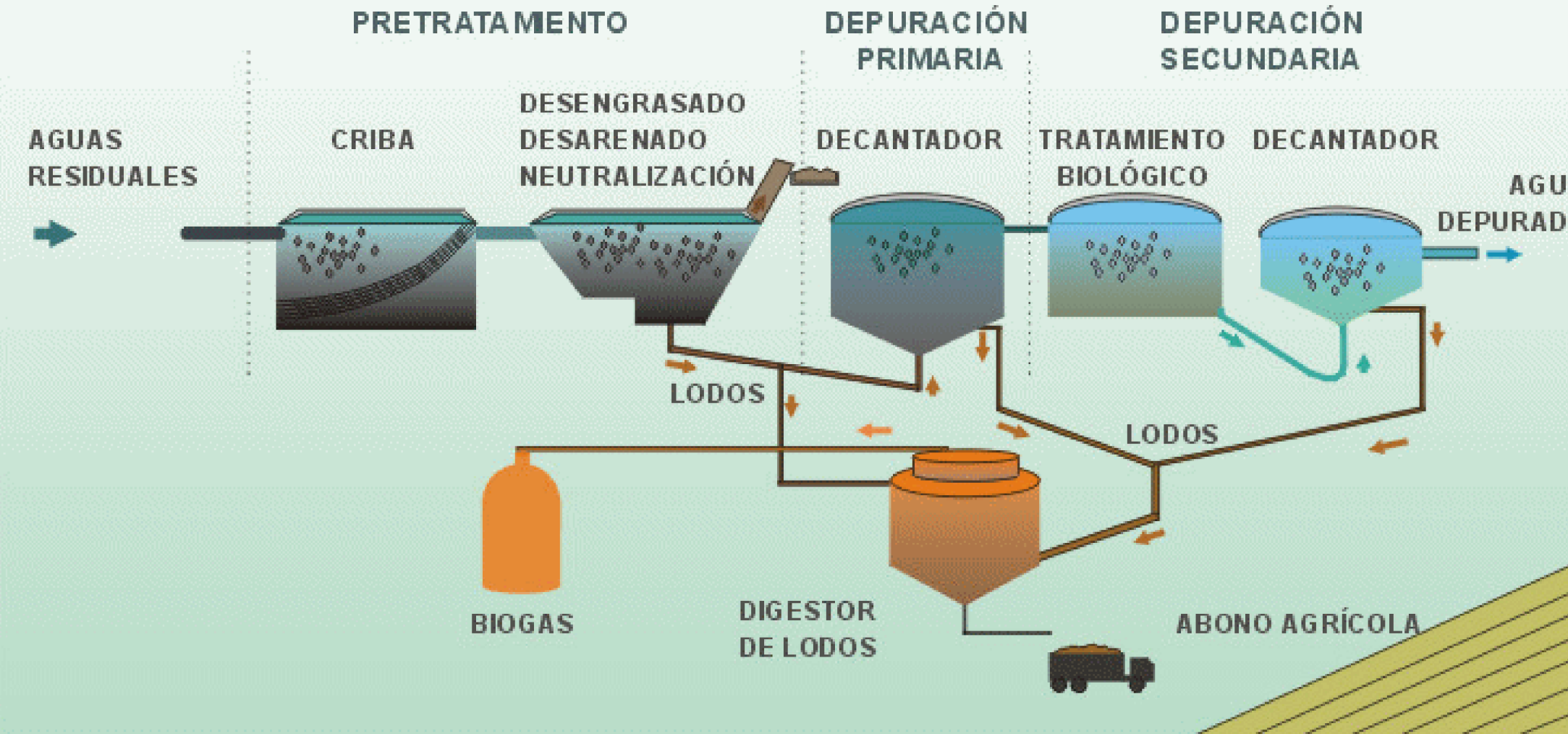
Relaciones cuantitativas estructura-actividad biológica, que mediante el uso de algoritmos matemáticos describe la relación entre las propiedades de la sustancia y su reacción en el medio ambiente.



PLANTAS TRATADORAS DE AGUA EN MÉXICO

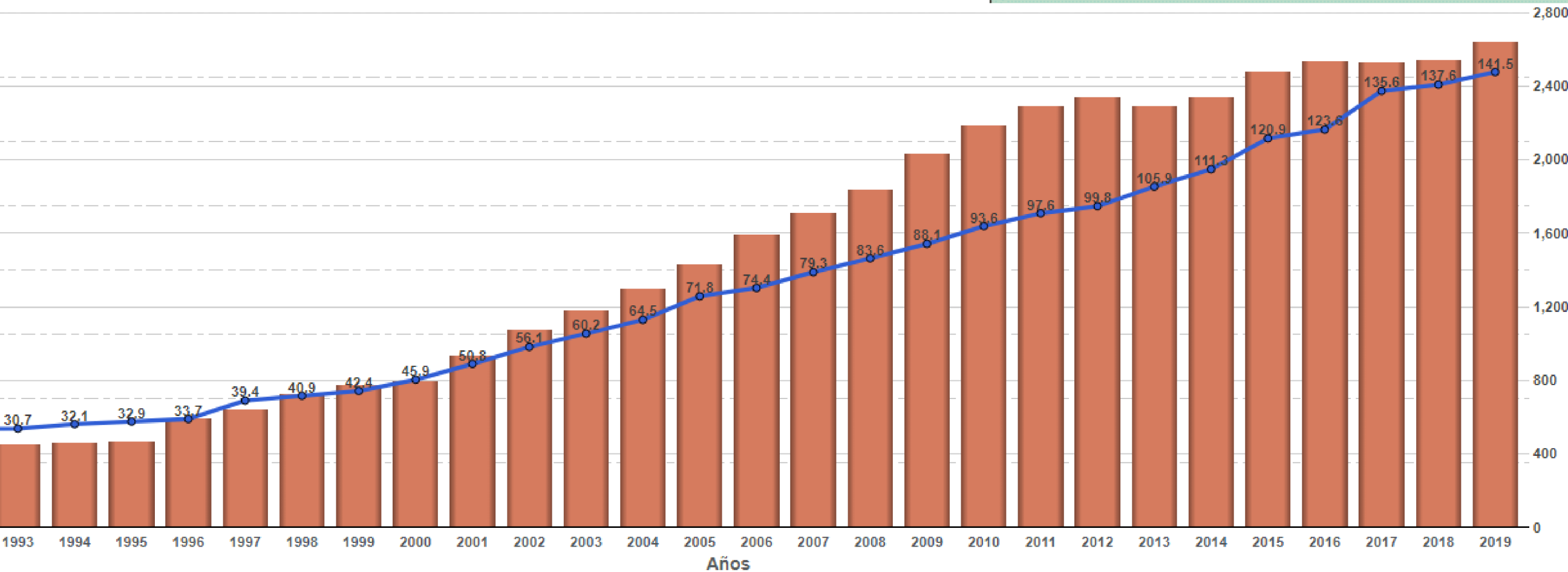
- Pretratamiento
- Tratamiento primario
- Tratamiento secundario
- Tratamiento terciario

ESQUEMA DE UNA DEPURADORA DE AGUAS RESIDUALES

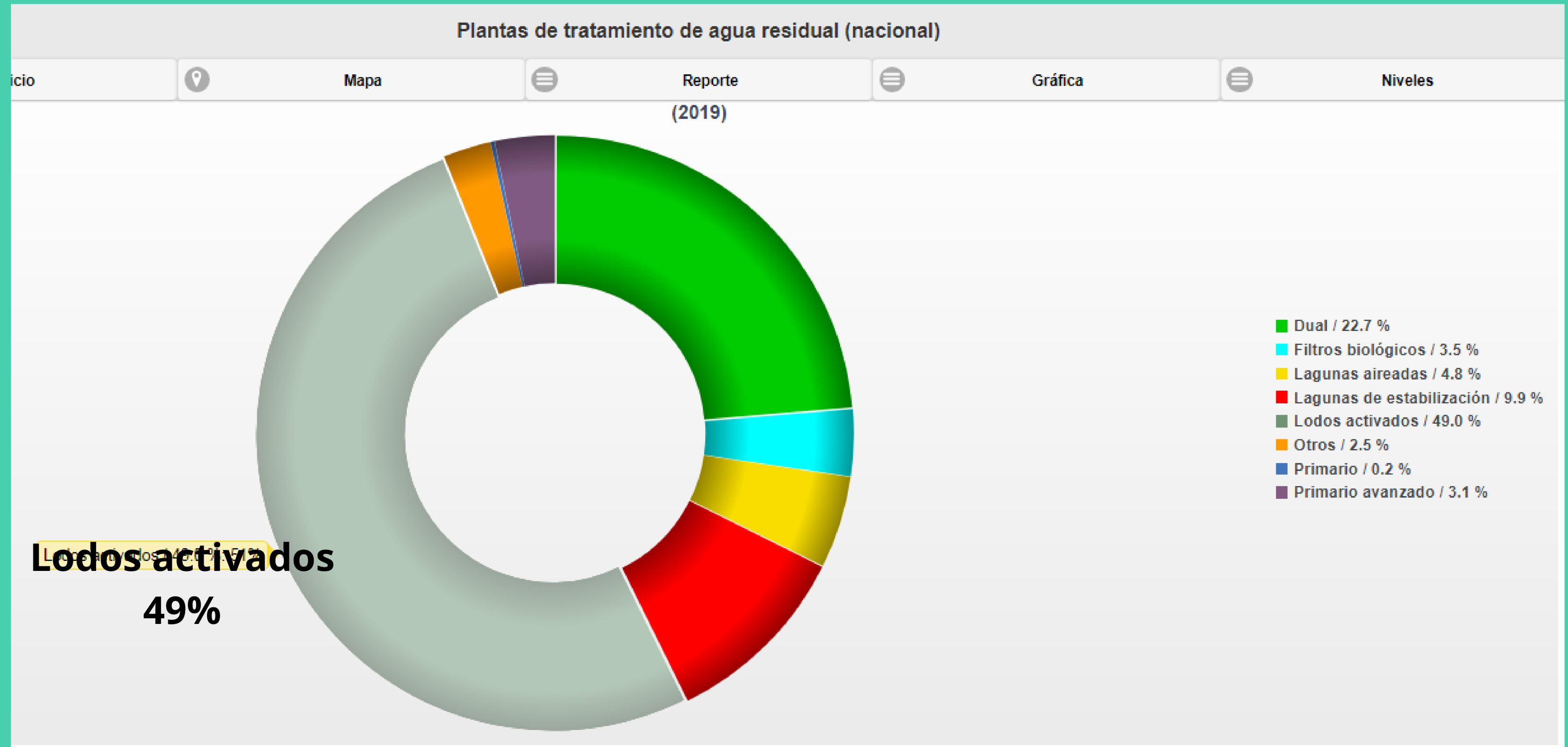


Plantas de tratamiento de agua residual (nacional)

Inicio Mapa Reporte (1992 - 2019)



Procesos secundarios

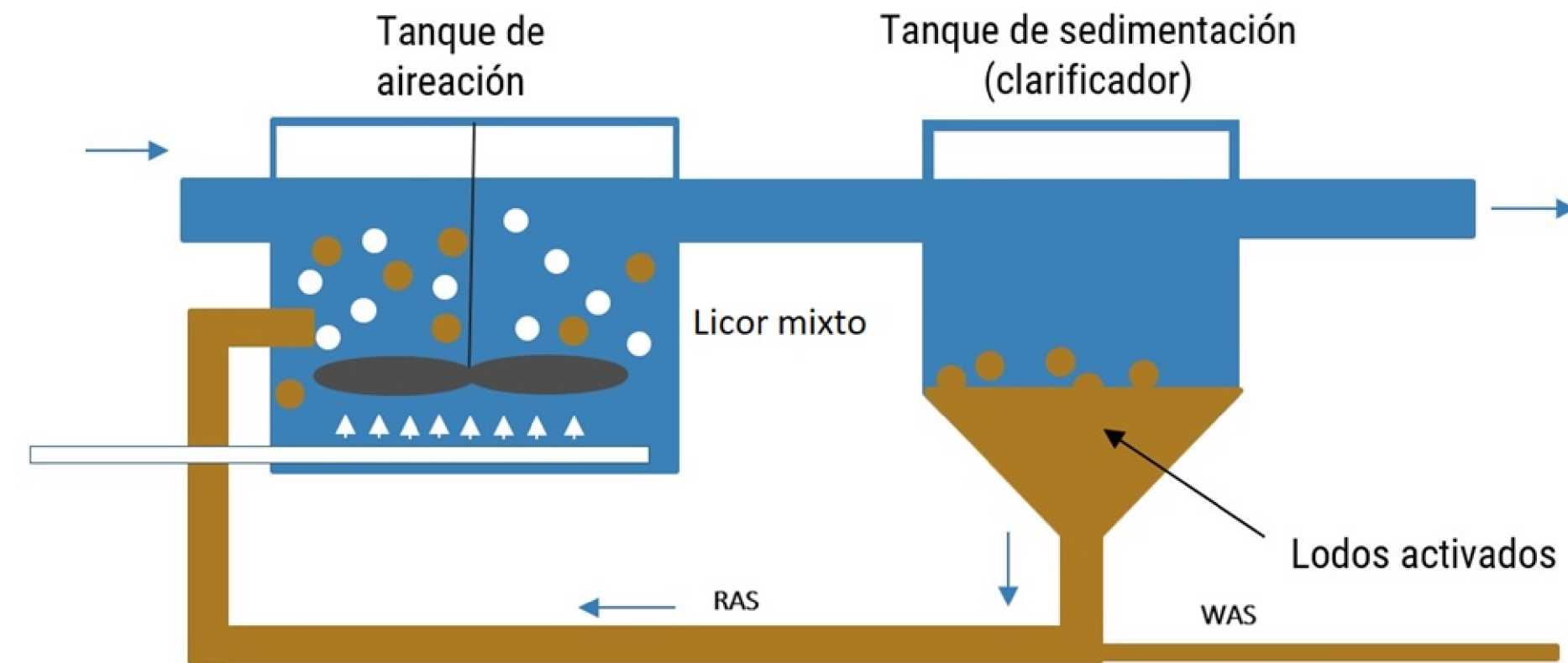


Fuente: CONAGUA. Subdirección General de Agua Potable, Drenaje y Saneamiento.
Gerencia de Potabilización y Tratamiento.

LODOS ACTIVADOS

Se le denomina lodo activado al proceso de tratamiento donde el agua residual se combina con el lodo biológico (microorganismo) en un reactor, para su mezcla y aireación, formando así, flóculos biológicos que sedimentarán en un tanque de sedimentación, desde donde serán nuevamente llevados al reactor.

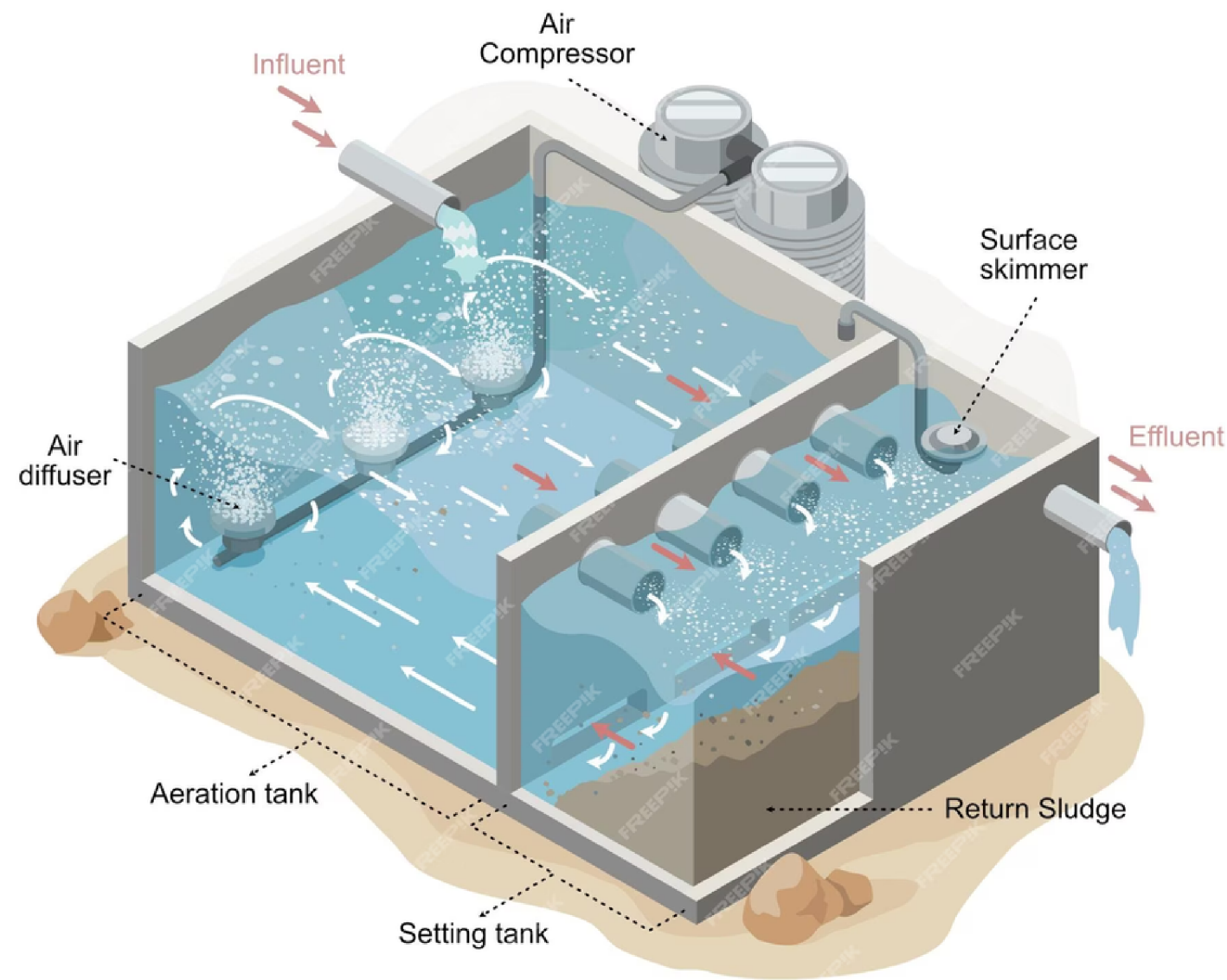
21



La materia orgánica sirve de sustrato para los m.o.

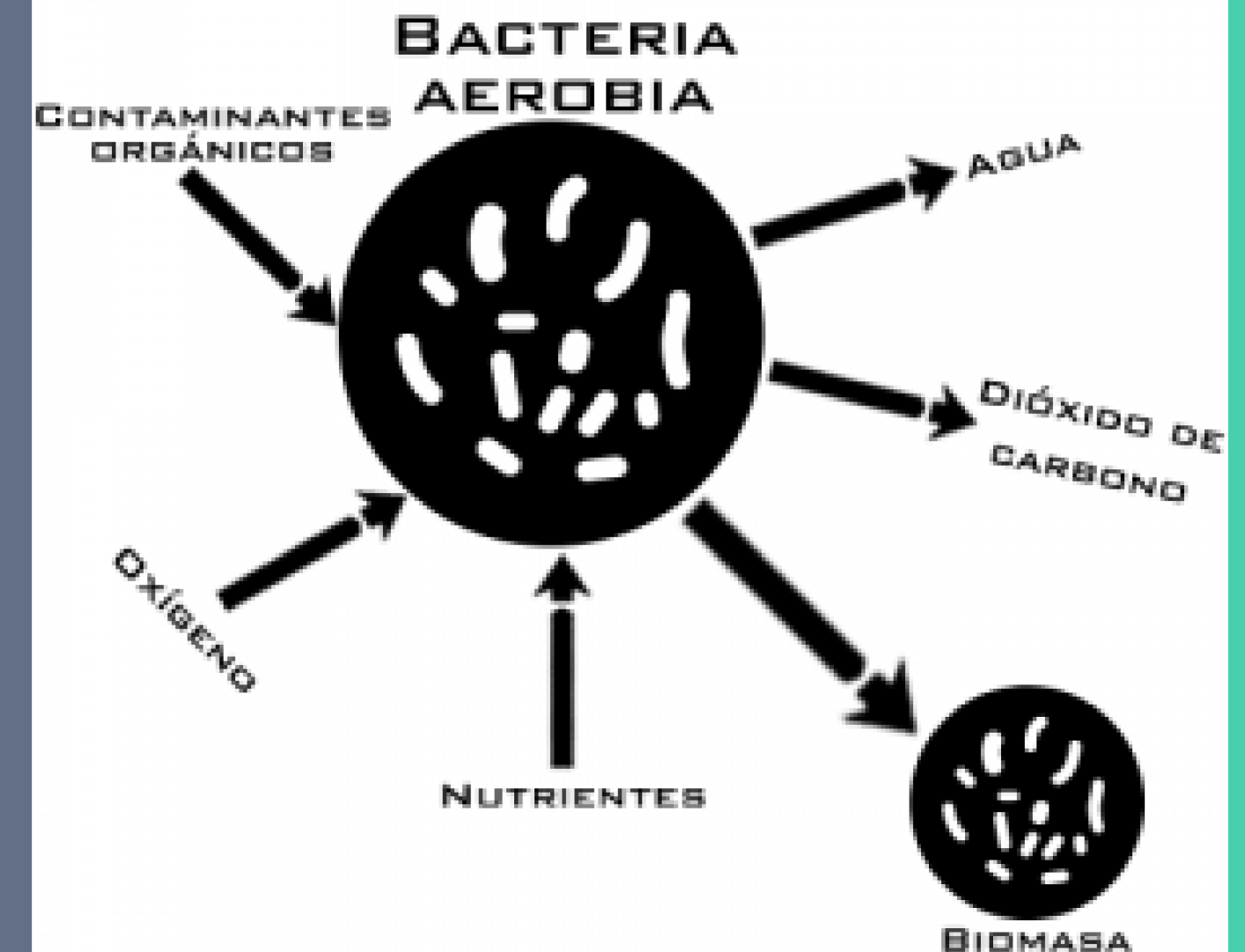
La mezcla será realizada mediante medios mecánicos superficiales o soplores sumergidos.

Aireación

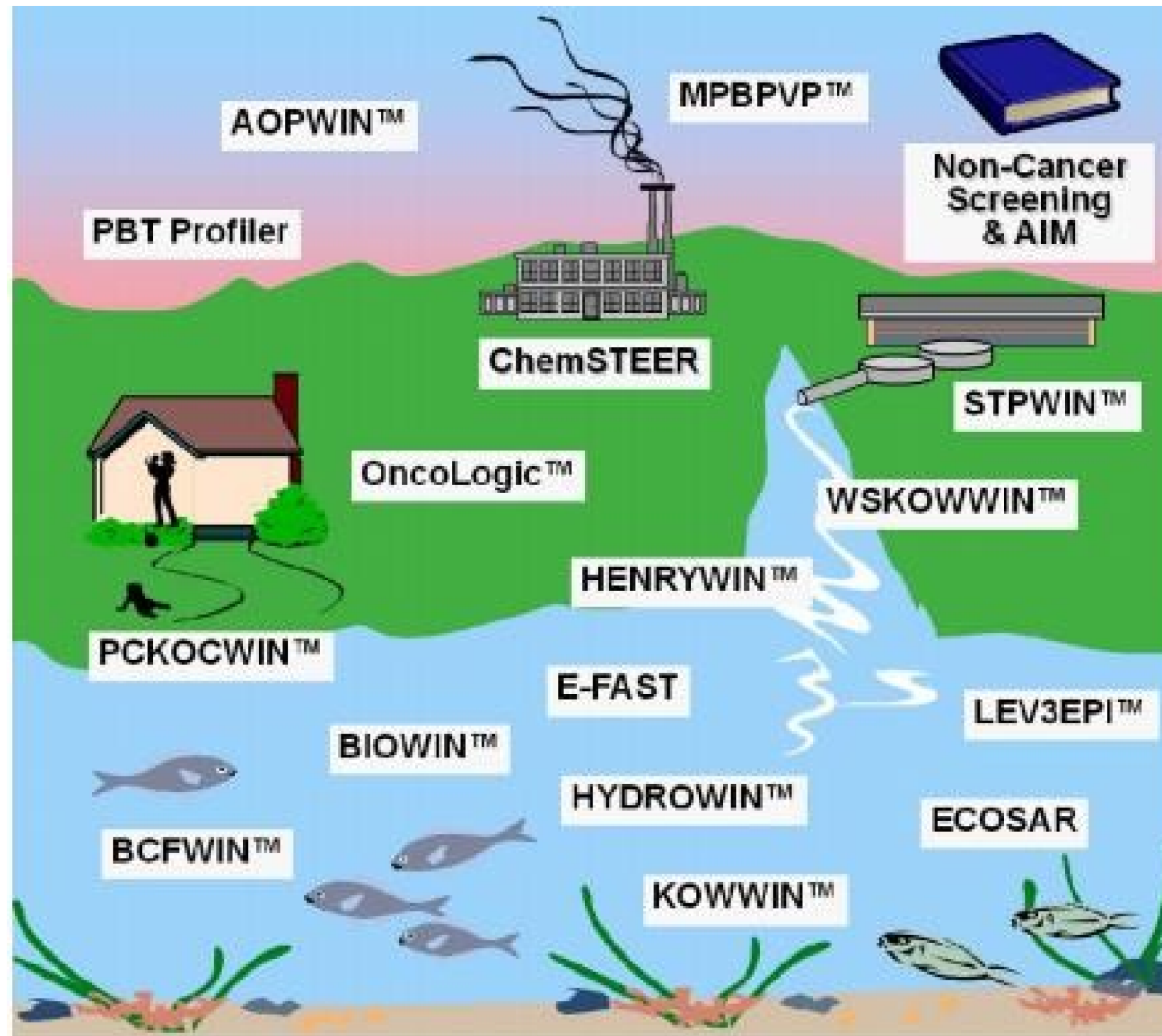


Bacterias aerobias

- Bacilos
- Mycobacterium tuberculosis
- Nocardia
- Lactobacillus
- Pseudomonas
- Staphylococcus (facultativo)
- Especies de Enterobacteriaceae (facultativas)

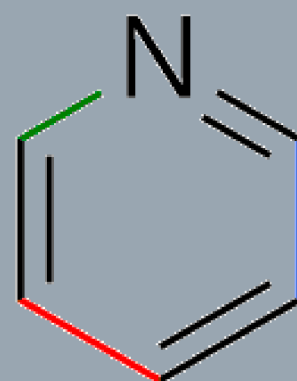


METODOLOGÍA



EPI Suite (Interfaz de programas de estimación) Suite es un conjunto de programas de estimación de propiedades químicas y destino ambiental desarrollados por la Oficina de Prevención de la Contaminación y Sustancias Tóxicas (OPPT) de la Agencia de Protección Ambiental (EPA)

Estructura SMILE

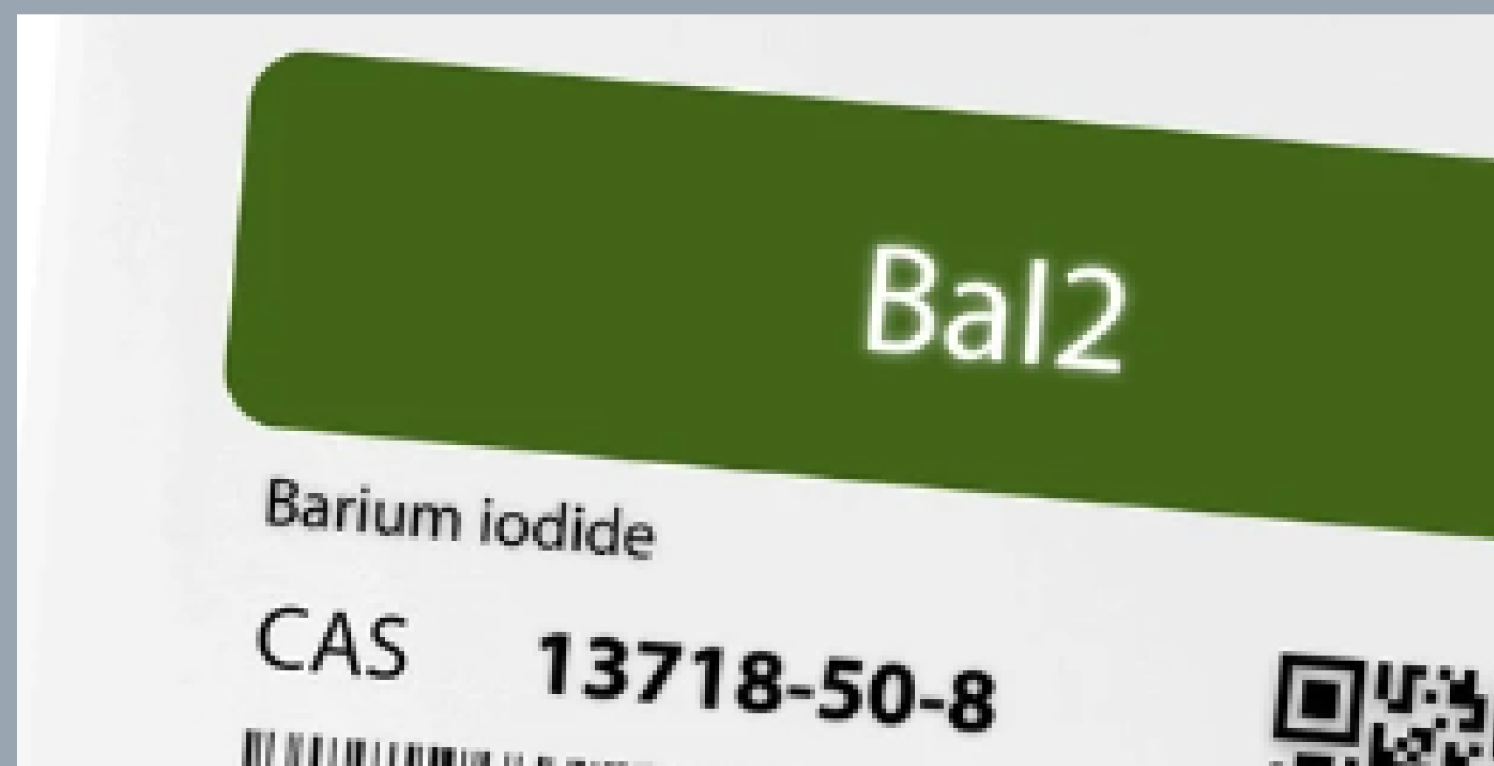


C1=CC=CN=C1

C1=CN=CC=C1

N1=CC=CC=C1

Número CAS



BIOWIN

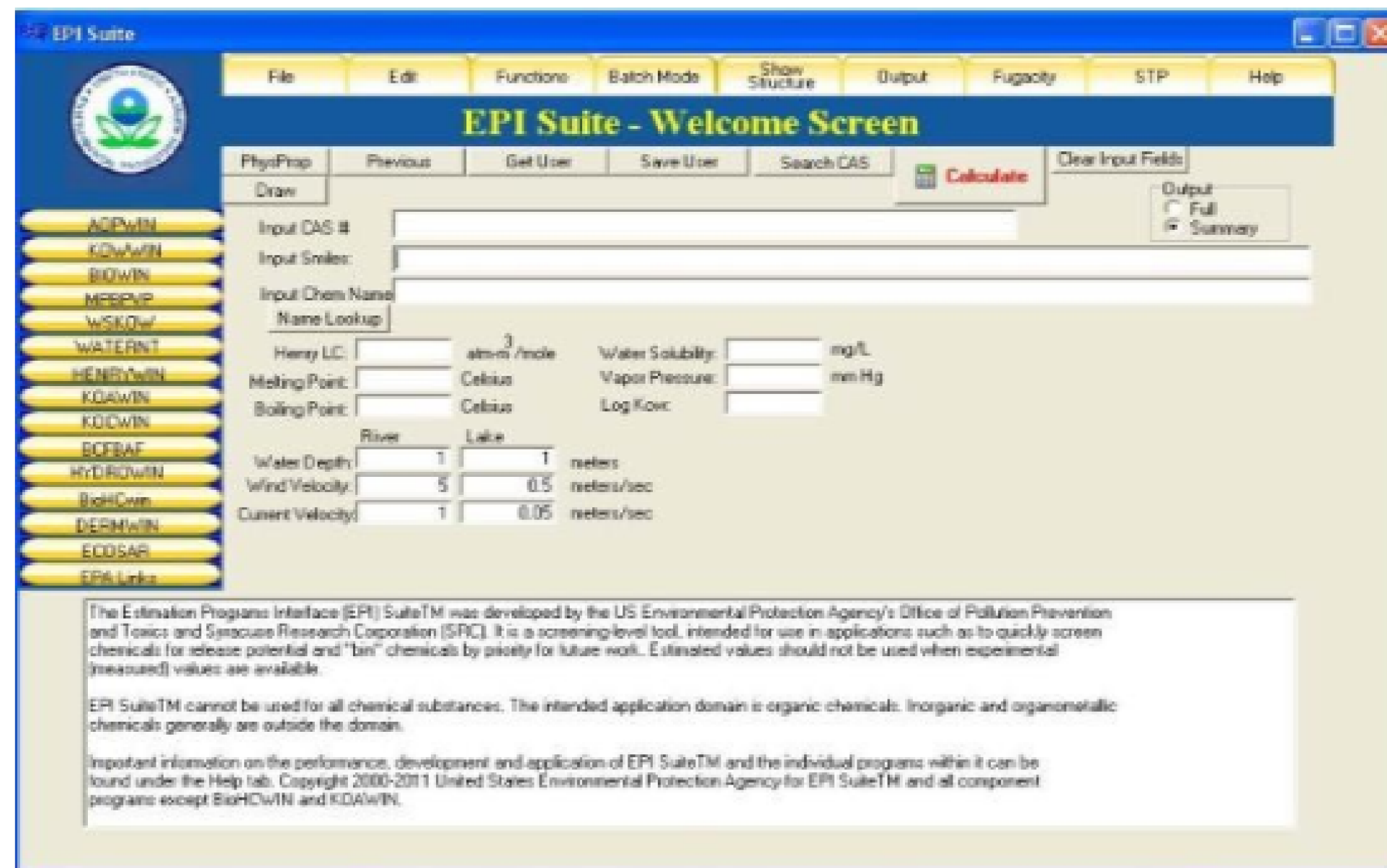


Figura 5. *EPI Suite™ versión 4.11*

Estimación de la biodegradabilidad

aeróbica y anaeróbica

Datos de biodegradabilidad

Modelos de Biowin™

Modelo	Nombre	Objetivo
Biowin1	Modelo de probabilidad lineal	Transmitir una indicación general de biodegradabilidad en condiciones aeróbicas
Biowin2	Modelo de probabilidad no lineal	
Biowin3	Modelo de biodegradación final de encuesta de expertos	Rendir estimaciones del tiempo necesario para lograr una biodegradación primaria y final completa en un medio acuático típico o "evaluativo".
Biowin4	Modelo de biodegradación primaria de encuesta de expertos	
Biowin5	Modelo lineal MITI	Evaluar la biodegradabilidad de un compuesto en la prueba de biodegradación lista para el MITI ³ (Ministerio de Comercio Internacional e Industria japonesa).
Biowin6	Modelo no lineal MITI	
Biowin7	Modelo de biodegradación anaeróbica	Predecir la degradación en un digestor anaeróbico típico.

Fuente: elaboración propia con datos obtenidos del manual de usuario de BLOWIN™, 2022.

BioWin v4.10

File Edit Functions BatchInput ShowStructure RemoveMetals Help

DRAW Previous Get User Save User CAS Input Calculate

Enter SMILES:

Enter NAME:

NameLookup



EPI v3.20

File Edit Functions BatchMode ShowStructure Output Fugacity STP Other Help

PhysProp Previous Get User Save User CAS Input CALCULATE ClearInputField What's New

Enter SMILES:

Chem NAME:

NameLookup

Henry LC [atm-m³/mole]: Wat Sol [mg/L]: MP:

Vap Pr [mm Hg]: BP:

Log Kow :

Output
☒ Summary
☐ Full

Water Depth [meters]:
 River:
 Lake:
 Wind Velocity [m/sec]:
 River:
 Lake:
 Current Velocity[m/sec]:
 River:
 Lake:



The Estimation Programs Interface (EPI) Suite™ was developed by the US Environmental Protection Agency's Office of Pollution Prevention and Toxics and Syracuse Research Corporation (SRC). It is a screening-level tool and cannot be used for all chemical substances. Like other such tools, it is intended for use in screening level applications such as to quickly screen chemicals for release potential, and "bin" chemicals by priority for future work. Estimated values should not be used when experimental (measured) values are available.

Important information on the performance, development and application of the individual estimation programs within EPI Suite™ is included in the User's Guide.

© 2000-2007 United States Environmental Protection Agency for EPI Suite™ and all component programs except BioHCWIN and KOAWIN.

STPWIN

Estimación de
remoción biológica

Fugacidad

Destino de la
sustancia química

Ventana de parámetros del modelo STPWin.

EPI Suite

File Edit Functions Batch Mode Show Structure Output Fugacity STP Help

STP Half-Life Parameters

☒ Use 10,000 hr default values

☐ Use BIOWIN output and EPA draft method for assigning half-lives.

☐ Use HalfLives entered below (in hours):

Bio P (primary clarifier): 10000

Bio A (aeration vessel): 10000

Bio S (settling tank): 10000

Guidance for selecting Bio A half-lives:

1 hr = rapid biodegradation
 3 hrs = moderate biodegradation
 10 hrs = moderate-to-slow biodegradation
 30 hrs = slow biodegradation
 100 hrs = very slow biodegradation

BIOWIN Half-Life Relationships

	Bio P	Bio A	Bio S
Biowin3 <= weeks + Biowin 5 > 0.5	10	1	1
Biowin3 <= weeks	30	3	3
Biowin5 > 0.5	100	10	10
Biowin3 = wk-mo	300	30	30
Biowin3 = months	1000	100	100
Biowin3 = recalcit	10000	10000	10000

Accept Cancel

The Estimation Programs Interface (EPI) Suite™ was developed by the US Environmental Protection Agency's Office of Pollution Prevention and Toxics and Syracuse Research Corporation (SRC). It is a screening-level tool, intended for use in applications such as to quickly screen chemicals for release potential and "bin" chemicals by priority for future work. Estimated values should not be used when experimental (measured) values are available.

Resultados

Evaluación de las sustancias de estudio

Biowin

TYPE	NUM	Biowin1 FRAGMENT DESCRIPTION	COEFF	VALUE
Frag	1	Aromatic alcohol [-OH]	0.1158	0.1158
Frag	2	Carbon with 4 single bonds & no hydrogens	-0.1839	-0.3679
Frag	1	Alkyl substituent on aromatic ring	0.0547	0.0547
MolWt	*	Molecular Weight Parameter		-0.1049
Const	*	Equation Constant		0.7475
=====+				
RESULT		Biowin1 (Linear Biodeg Probability)		0.4453
=====+				

TYPE	NUM	Biowin2 FRAGMENT DESCRIPTION	COEFF	VALUE
Frag	1	Aromatic alcohol [-OH]	0.9086	0.9086
Frag	2	Carbon with 4 single bonds & no hydrogens	-1.7232	-3.4464
Frag	1	Alkyl substituent on aromatic ring	0.5771	0.5771
MolWt	*	Molecular Weight Parameter		-3.1291
=====				
RESULT		Biowin2 (Non-Linear Biodeg Probability)		0.1109
=====				

TYPE	NUM	Biowin3 FRAGMENT DESCRIPTION	COEFF	VALUE
Frag	1	Aromatic alcohol [-OH]	0.0564	0.0564
Frag	2	Carbon with 4 single bonds & no hydrogens	-0.2121	-0.4242
Frag	1	Alkyl substituent on aromatic ring	-0.0749	-0.0749
MolWt	*	Molecular Weight Parameter		-0.4870
Const	*	Equation Constant		3.1992
=====				
RESULT		Biowin3 (Survey Model - Ultimate Biodeg)		2.2695
=====				

TYPE	NUM	Biowin5 FRAGMENT DESCRIPTION	COEFF	VALUE
Frag	1	Aromatic alcohol [-OH]	0.0642	0.0642
Frag	2	Carbon with 4 single bonds & no hydrogens	0.0676	0.1352
Frag	1	Aromatic-CH3	0.0415	0.0415
Frag	2	Aromatic-H	0.0082	0.0164
Frag	6	Methyl [-CH3]	0.0004	0.0025
MolWt	*	Molecular Weight Parameter		-0.6556
Const	*	Equation Constant		0.7121
=====				
RESULT		Biowin5 (MITI Linear Biodeg Probability)		0.3164
=====				

TYPE	NUM	Biowin7 FRAGMENT DESCRIPTION	COEFF	VALUE
Frag	1	Aromatic alcohol [-OH]	0.0807	0.0807
Frag	2	Carbon with 4 single bonds & no hydrogens	-0.3342	-0.6685
Frag	1	Alkyl substituent on aromatic ring	-0.1145	-0.1145
Frag	1	Aromatic-CH3	-0.2573	-0.2573
Frag	2	Aromatic-H	-0.0954	-0.1909
Frag	6	Methyl [-CH3]	-0.0796	-0.4774
Const	*	Equation Constant		0.8361
=====				
RESULT		Biowin7 (Anaerobic Linear Biodeg Prob)		-0.7917
=====				

TYPE	NUM	Biowin1 FRAGMENT DESCRIPTION	COEFF	VALUE
Frag	2	Aromatic alcohol [-OH]	0.1158	0.2316
Frag	1	Carbon with 4 single bonds & no hydrogens	-0.1839	-0.1839
MolWt	*	Molecular Weight Parameter		-0.0791
Const	*	Equation Constant		0.7475
=====				
RESULT		Biowin1 (Linear Biodeg Probability)		0.7161
=====				

TYPE	NUM	Biowin3 FRAGMENT DESCRIPTION	COEFF	VALUE
Frag	2	Aromatic alcohol [-OH]	0.0564	0.1128
Frag	1	Carbon with 4 single bonds & no hydrogens	-0.2121	-0.2121
MolWt	*	Molecular Weight Parameter		-0.3673
Const	*	Equation Constant		3.1992
=====				
RESULT		Biowin3 (Survey Model - Ultimate Biodeg)		2.7325
=====				

TYPE	NUM	Biowin1 FRAGMENT DESCRIPTION	COEFF	VALUE
Frag	1	Ester [-C(=O)-O-C]	0.1742	0.1742
Frag	1	Unsubstituted phenyl group (C6H5-)	0.1281	0.1281
MolWt	*	Molecular Weight Parameter		-0.0715
Const	*	Equation Constant		0.7475
=====				
RESULT		Biowin1 (Linear Biodeg Probability)		0.9783
=====				

TYPE	NUM	Biowin1 FRAGMENT DESCRIPTION	COEFF	VALUE
Frag	1	Amide [-C(=O)-N or -C(=S)-N]	0.2102	0.2102
Frag	1	Alkyl substituent on aromatic ring	0.0547	0.0547
MolWt	*	Molecular Weight Parameter		-0.0911
Const	*	Equation Constant		0.7475
=====				
RESULT		Biowin1 (Linear Biodeg Probability)		0.9213
=====				

Parámetros de evaluación de resultados de Biowin

Biowin 1 y 2

- Una probabilidad mayor o igual a 0.5 indica biodegradaciones rápidas
- Una probabilidad menor a 0.5 indica que no biodegradaciones rápidas

Biowin 3 y 4

- 5.00 -> horas 4.00 -> días 3.00 -> semanas
- 2.00 -> meses 1.00 -> mas tiempo

Biowin 5 y 6

- Una probabilidad mayor o igual a 0.5 indica: fácilmente degradable
- Una probabilidad menor a 0.5 indica: no fácilmente degradable

Biowin 7

- Una probabilidad mayor o igual a 0.5 indica: Biodegradacion rapida
- Una probabilidad menor a 0.5 indica: Biodegradacion no rapida

Clasificación del BHT mediante Biowin

Modelo	Valor obtenido	Clasificación
<u>Biowin 1</u>	0.4453	Biodegradación no rápida
<u>Biowin 2</u>	0.1109	Biodegradación no rápida
<u>Biowin 3</u>	2.2695	De semanas a meses
<u>Biowin 4</u>	3.1941	Semanas
<u>Biowin 5</u>	0.3164	No fácilmente degradable
<u>Biowin 6</u>	0.1318	No fácilmente degradable
<u>Biowin 7</u>	-0.7917	Biodegradación no rápida

Fuente: elaboración propia, en 2022.

Clasificación del TBHQ mediante Biowin

Modelo	Valor obtenido	Clasificación
<u>Biowin 1</u>	0.7161	Biodegradación rápida
<u>Biowin 2</u>	0.6775	Biodegradación rápida
<u>Biowin 3</u>	2.7325	De semanas a meses
<u>Biowin 4</u>	3.5339	De días a semanas
<u>Biowin 5</u>	0.4396	No fácilmente degradable
<u>Biowin 6</u>	0.3826	No fácilmente degradable
<u>Biowin 7</u>	0.1383	Biodegradación no rápida

Fuente: elaboración propia, en 2022.

Clasificación del acetato de bencilo mediante Biowin

Modelo	Valor obtenido	Clasificación
<u>Biowin 1</u>	0.9783	Biodegradación rápida
<u>Biowin 2</u>	0.9988	Biodegradación rápida
<u>Biowin 3</u>	3.0295	semanas
<u>Biowin 4</u>	3.8649	días
<u>Biowin 5</u>	0.5949	fácilmente degradable
<u>Biowin 6</u>	0.7562	fácilmente degradable
<u>Biowin 7</u>	0.6621	Biodegradación rápida

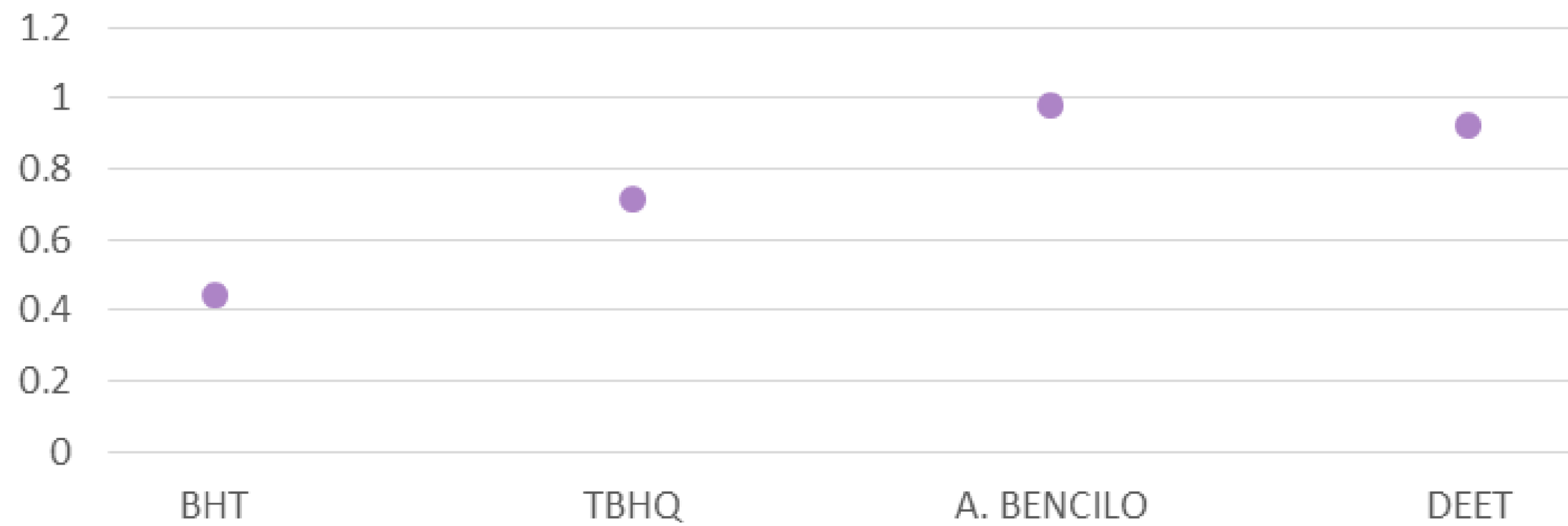
Fuente: elaboración propia, 2022.

Clasificación del DEET mediante Biowin

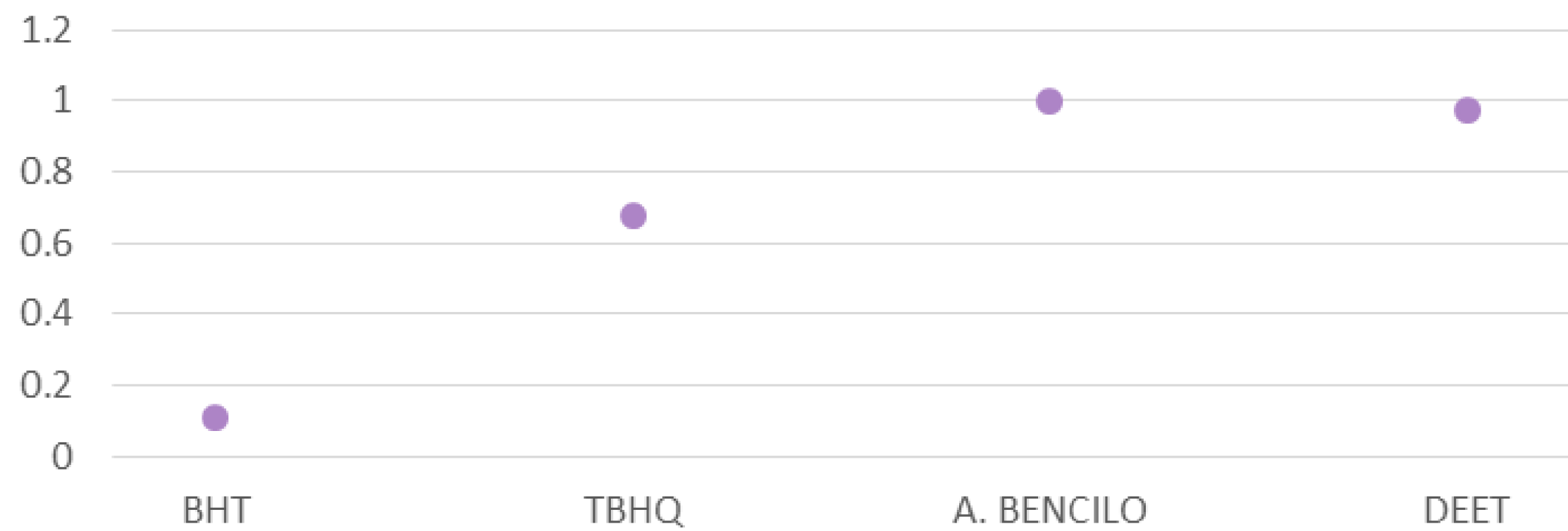
Modelo	Valor obtenido	Clasificación
<u>Biowin 1</u>	0.9213	Biodegradación rápida
<u>Biowin 2</u>	0.9724	biodegradación rápida
<u>Biowin 3</u>	2.6474	De semanas a meses
<u>Biowin 4</u>	3.7087	De días a Semanas
<u>Biowin 5</u>	0.4437	No fácilmente degradable
<u>Biowin 6</u>	0.3954	No fácilmente degradable
<u>Biowin 7</u>	-0.5924	biodegradación no rápida

Fuente: elaboración propia, 2022.

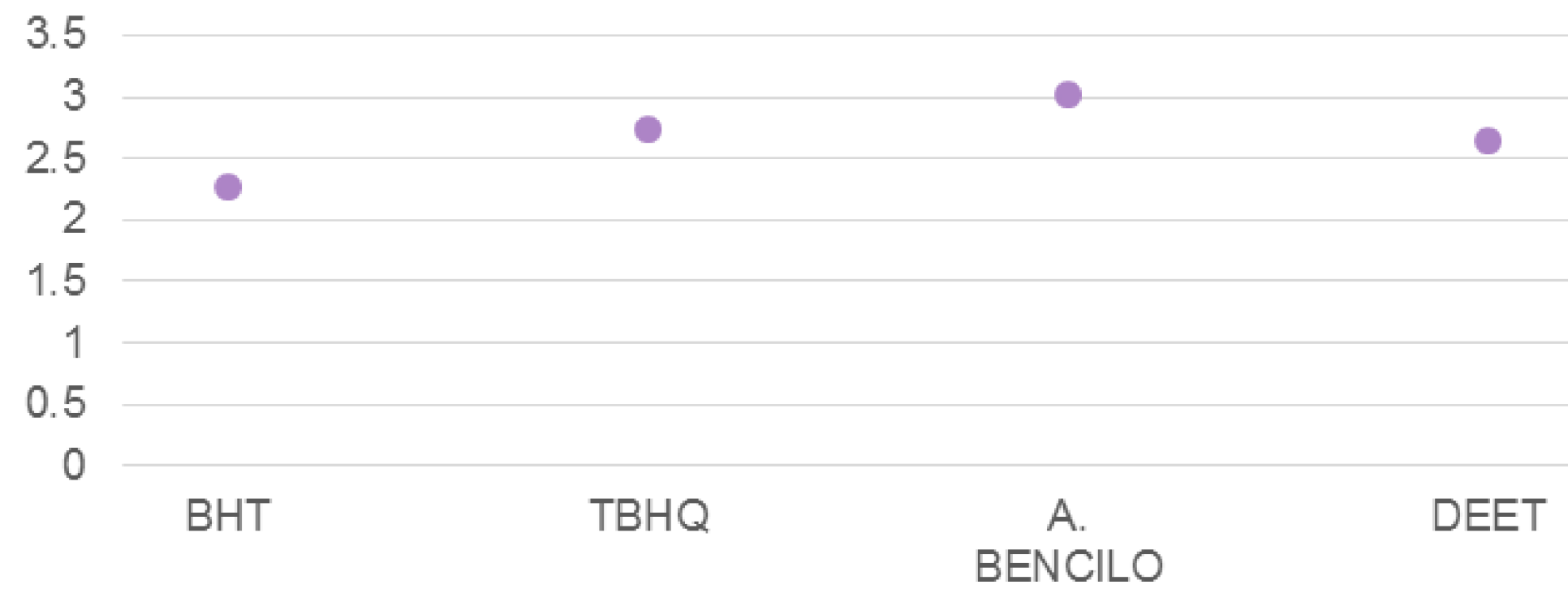
Biowin 1



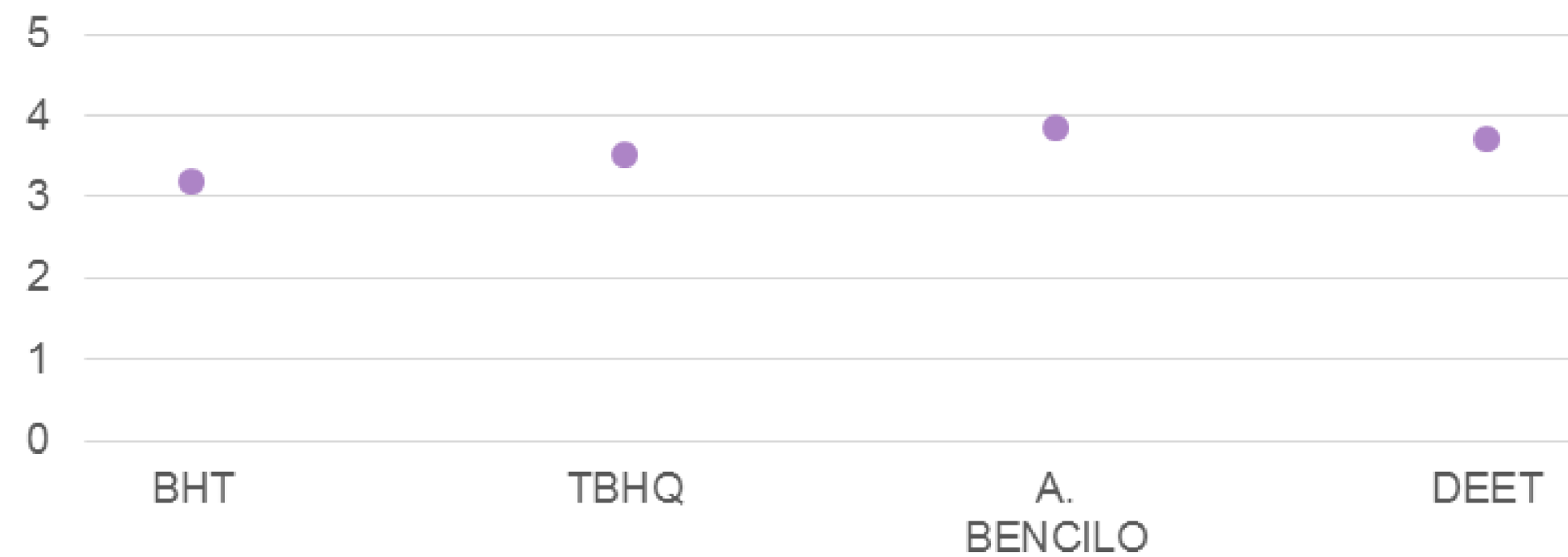
Biowin 2



Biowin 3



Biowin 4



Biowin 7



STPWin

41

	Bio P	Bio A	Bio S
Biowin3 <= weeks + Biowin 5 > 0.5	10	1	1
Biowin3 <= weeks	30	3	3
Biowin5 > 0.5	100	10	10
Biowin3 = wk-mo	300	30	30
Biowin3 = months	1000	100	100
Biowin3 = recalcit	10000	10000	10000

Hidroxitolueno butilado (BHT)

Biowin 3= semanas-meses BioP: 300 BioA:30 BioS:30

	g/h	mol/h	percent
Influent	1.00E+001	4.5E-002	100.00
Primary sludge	4.76E+000	2.2E-002	47.63
Waste sludge	5.75E-001	2.6E-003	5.75
Primary volatilization	1.91E-002	8.7E-005	0.19
Settling volatilization	9.10E-003	4.1E-005	0.09
Aeration off gas	2.53E-001	1.1E-003	2.53
Primary biodegradation	4.73E-001	2.1E-003	4.73
Settling biodegradation	2.48E-001	1.1E-003	2.48
Aeration biodegradation	3.29E+000	1.5E-002	32.88
Final water effluent	3.72E-001	1.7E-003	3.72
Total removal	9.63E+000	4.4E-002	96.28
Total biodegradation	4.01E+000	1.8E-002	40.09

El hidroxitolueno butilado presenta una remoción total del 96.28 % en el efluente final, donde el 40.09% es removido biológicamente. Con un mayor porcentaje en la etapa de aeración.

Terbutilhidroquinona (TBHQ)

Biowin 3= semanas-meses BioP: 300 BioA: 30 BioS:30

	g/h	mol/h	percent
Influent	1.00E+001	6.0E-002	100.00
Primary sludge	2.26E-001	1.4E-003	2.26
Waste sludge	2.83E-001	1.7E-003	2.83
Primary volatilization	9.32E-008	5.6E-010	0.00
Settling volatilization	2.53E-007	1.5E-009	0.00
Aeration off gas	6.24E-007	3.8E-009	0.00
Primary biodegradation	2.29E-003	1.4E-005	0.02
Settling biodegradation	6.84E-004	4.1E-006	0.01
Aeration biodegradation	9.00E-003	5.4E-005	0.09
Final water effluent	9.48E+000	5.7E-002	94.79
Total removal	5.21E-001	3.1E-003	5.21
Total biodegradation	1.20E-002	7.2E-005	0.12

Podemos comparar el porcentaje total del TBHQ al final del efluente 94.79%, es decir, solo el 5.21% fue removido, en la que existe una prácticamente nula biodegradación

Acetato de bencilo

Biowin 3= semanas y Biowin 5>0.5BioP: 10 BioA:1 BioS:1

	g/h	mol/h	percent
Influent	1.00E+001	6.7E-002	100.00
Primary sludge	3.95E-002	2.6E-004	0.39
Waste sludge	1.29E-002	8.6E-005	0.13
Primary volatilization	4.96E-003	3.3E-005	0.05
Settling volatilization	1.25E-003	8.3E-006	0.01
Aeration off gas	4.15E-003	2.8E-005	0.04
Primary biodegradation	1.54E+000	1.0E-002	15.36
Settling biodegradation	4.24E-001	2.8E-003	4.24
Aeration biodegradation	7.21E+000	4.8E-002	72.14
Final water effluent	7.63E-001	5.1E-003	7.63
Total removal	9.24E+000	6.2E-002	92.37
Total biodegradation	9.17E+000	6.1E-002	91.74

presenta una remoción total del 92.37 por ciento, del cual, 91.74 del porcentaje es producido por agentes biológicos, en la etapa de aireación

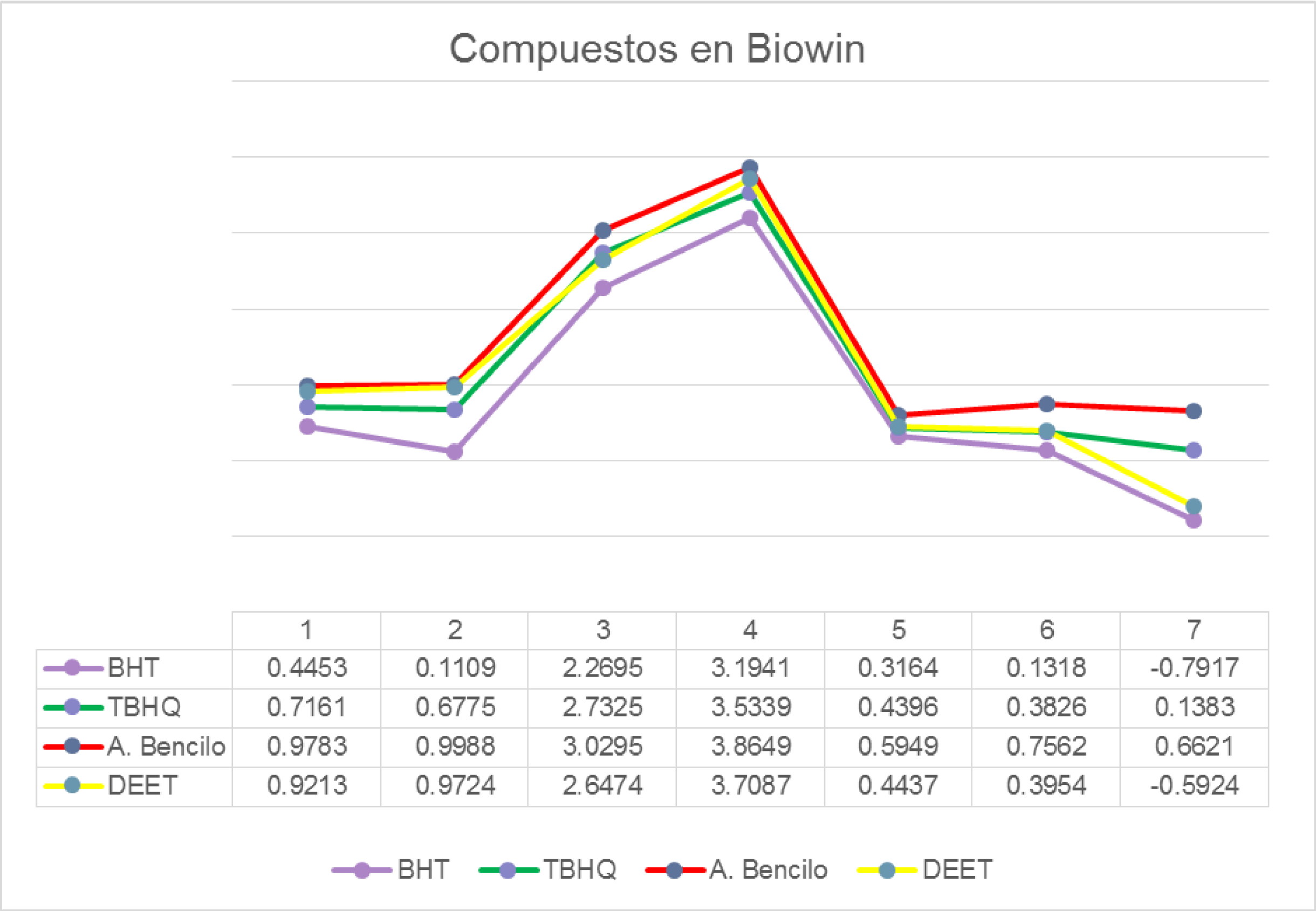
N,N-Dietil-m-toluamida (DEET)

BioP: 300 BioA:30 BioS:30.

	g/h	mol/h	percent
Influent	1.00E+001	5.2E-002	100.00
Primary sludge	6.05E-002	3.2E-004	0.61
Waste sludge	1.37E-001	7.2E-004	1.37
Primary volatilization	1.12E-005	5.9E-008	0.00
Settling volatilization	2.41E-005	1.3E-007	0.00
Aeration off gas	6.00E-005	3.1E-007	0.00
Primary biodegradation	6.14E-002	3.2E-004	0.61
Settling biodegradation	1.45E-001	7.6E-004	1.45
Aeration biodegradation	1.93E+000	1.0E-002	19.31
Final water effluent	7.66E+000	4.0E-002	76.64
Total removal	2.34E+000	1.2E-002	23.36
Total biodegradation	2.14E+000	1.1E-002	21.38

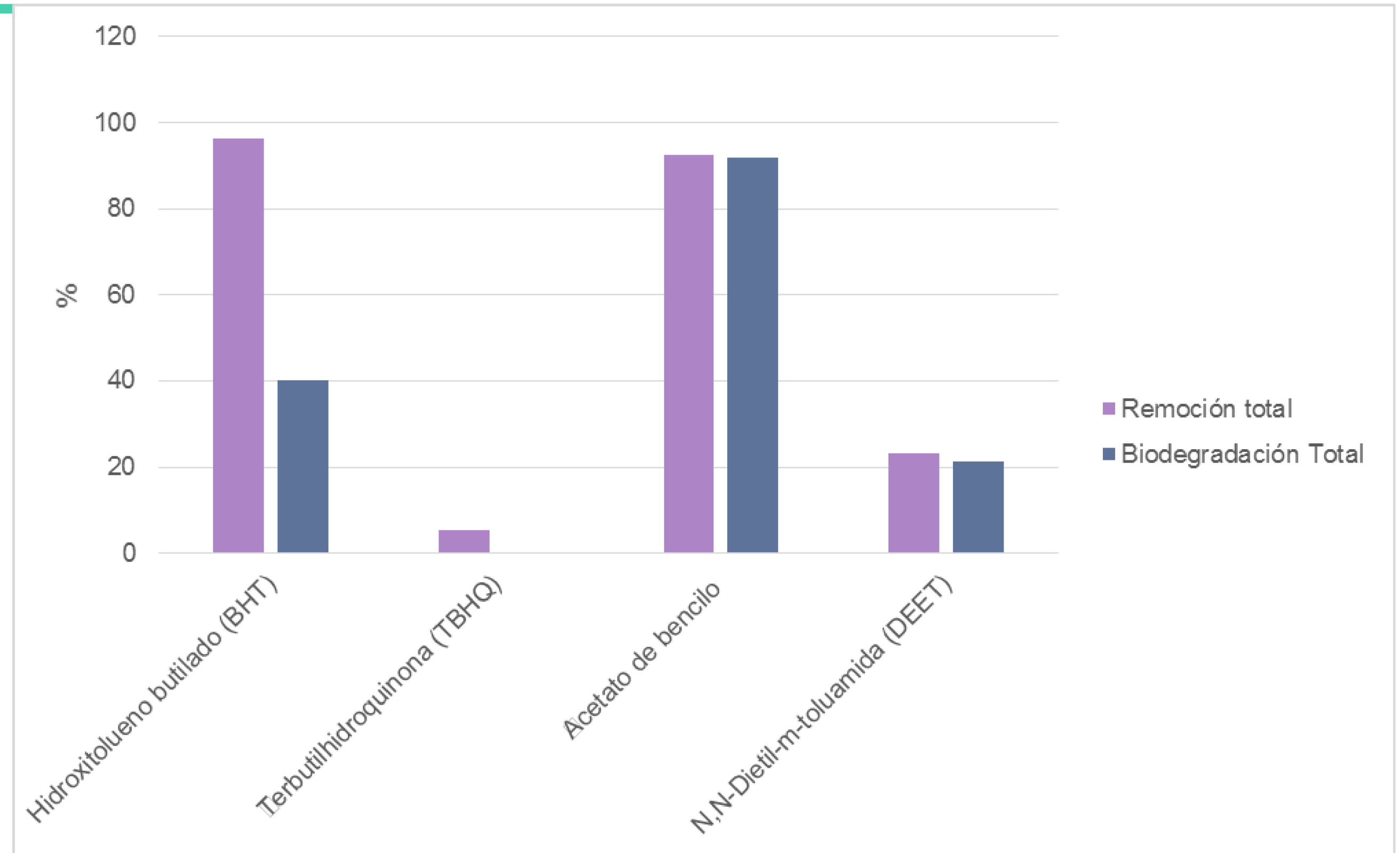
Un total del 76,64 por ciento, aun continua en el efluente final después de los procesos de tratamiento, donde lo removido es debido a la biodegradación en la etapa de aireación.

ANALISIS DE RESULTADOS



ANALISIS DE RESULTADOS

47



CONCLUSIONES

48

1. Se identificó la tasa de remoción total del Hidroxitolueno butilado, la Terbutilhidroquinona, el Acetato de bencilo y el N,N-Dietil-m-toluamida en una simulación de una planta de tratamiento de aguas residuales. Al hablar de remoción total se contemplan los procesos físicos, químicos y biológicos que pudieran ocurrir en el tren de tratamiento.

El hidroxitolueno butilado resultó ser el compuesto con mayor porcentaje total de 96.28% removido en el efluente final de la planta. Con una diferencia mínima, el acetato de bencilo se encuentra en el segundo lugar con 92.37% de materia suprimida. Y el contaminante con menos probabilidad de eliminación es la terbutilhidroquinona con un mínimo valor de 5.21% de remoción total.

2. Otra ventaja del programa STPWIN, es que también permite precisar el porcentaje de remoción debido únicamente a la biodegradación y distinguir en qué etapa del proceso ocurre

. Es así como, a pesar de que el hidroxitolueno butilado presenta una remoción total superior, tiene solo el 40 % de biodegradación, esto quiere decir que otros procesos, no biológicos, influyen en su eliminación. El caso del acetato de bencilo es muy diferente ya que, a pesar de tener menos porcentaje de remoción total, casi la única causa de esta es por efecto biológico.

CONCLUSIONES

3. El programa Biowin es una herramienta valiosa para el pronóstico de la biodegradación de los contaminantes emergentes y su distinta eficacia bajo condiciones aerobias y anaerobias.

- El acetato de bencilo tiene la misma tendencia de eliminación en condiciones aerobias y anaerobias, además del ser el más rápido en comparación con las otras sustancias.
- Biowin presenta el comportamiento de BHT no muy favorecedor, en contraste con Stpwin donde presenta una remoción total superior a las demás sustancias químicas, esto infiere y confirma que efectivamente, la eliminación del BHT es por procesos químicos o físicos, los biológicos no tienen mucho efecto sobre él.
- Otro comportamiento interesante para destacar es la erradicación del compuesto DEET en el agua residual, la cual es claramente más favorable en medio aeróbico que en condiciones anaerobias.

Comentarios finales

- Alianza por el Agua, E. y. (2014). Monográficos Agua en Centroamerica. Manual de depuración de aguas residuales urbanas. Centro de las nuevas tecnologías del agua.
- Aponte, J. L. (2012). "¿Qué sabe Ud. acerca de...QSAR". Revista mexicana de ciencias farmacéuticas, 43(2). DOI:ISSN 1870-0195
- Benítez, D. P. (2014). ¡Alerta! TBHQ en alimentos con grasa. Revista de divulgación científica y tecnológica de la universidad veracruzana.
- CAMEO. (2021). CAMEO Chemicals. Obtenido de Base de datos de materiales peligrosos.: <https://cameochemicals.noaa.gov/>
- CAS. (2015). Obtenido de Regulated chemicals - Chemlist. Chemical Abstracts Service: <https://www.cas.org/content/regulated-chemicals>
- Castillo, O. J. (2020). Desarrollo de una fibra de microextracción en fase sólida basada en líquidos iónicos para la extracción de residuos de productos farmacéuticos y de cuidado personal. (Tesis de doctorado). Universidad Autónoma de Nuevo León, México.
- Citver, C. d. (2018). Guía clínica de manejo por intoxicación por DEET. Veracruz.
- Clemente, A. R.-E. (2014). Procesos de tratamiento de aguas residuales para la eliminación de contaminantes orgánicos emergentes. Revista Ambiente & Agua, 8(3). doi:ISSN 1980-993X
- COFEPRIS. (2012). Comisión Federal para la Protección contra Riesgos Sanitarios de la Secretaria de Salud. ACUERDO por el que se determinan los aditivos y coadyuvantes en alimentos, bebidas y suplementos alimenticios, su uso y disposiciones sanitarias. Diario Oficial de la Federación de los Estados Unidos Mexicanos.
- EPA. (2021). Obtenido de <https://www.epa.gov/tsca-screening-tools/epi-suitetm-estimation-program-interface>
- Espinosa, N. Y. (2019). DIAGNÓSTICO Y REMOCIÓN DE CONTAMINANTES. Tesis de Doctorado. Facultad de Ingeniería de la Universidad Nacional de La Plata, La Plata, Argentina.
- Gines, M. P. (2020). Contaminantes emergentes. Tesis de grado. Escuela Técnica Superior de Ingenieros de Caminos, Canales y Puertos., Valencia.
- Grajales, D. M. (octubre de 2017). Aparición de productos para el cuidado personal como sustancias químicas emergentes de interés en los recursos hídricos: una revisión. Obtenido de Pubmed.gov: <https://pubmed.ncbi.nlm.nih.gov/28399499/>