



**Benemérita
Universidad Autónoma de Puebla**

FACULTAD DE INGENIERÍA QUÍMICA

**“EVALUACIÓN *IN SILICO* DE DESTINO Y RIESGO
AMBIENTAL DEL TRICLOSÁN VERTIDO EN
CUERPOS DE AGUA”**

TESIS PROFESIONAL

Que para obtener el Título de:

Licenciatura en Ingeniería Ambiental

Presenta:

María Elena Hernández Trejo

Director de Tesis:

M.I.A. Miriam Vega Hernández

Puebla, Pue.

Mayo 2021

A mi familia:

por todo su apoyo incondicional y su inmenso amor.

AGRADECIMIENTOS

A la Benemérita Universidad Autónoma de Puebla por ser mi casa de estudio y por el apoyo que brinda como institución y los valores que imparte.

A la facultad de Ingeniería Química y sus docentes por la oportunidad de formarme profesionalmente.

A la M.I.A. Miriam Vega Hernández por su confianza y brindarme la oportunidad de recurrir a su capacidad y conocimiento científico, por apoyarme a lo largo de este proceso y dedicar parte de su tiempo para la realización de este proyecto.

Al M.I. Angel Silveti Loeza por su interés, apoyo, paciencia y todo el tiempo dedicado para realizar este proyecto. Todos los comentarios y recomendaciones fueron sumamente importantes.

Al Dr. Miguel Ángel Valera Pérez por su tiempo y comentarios positivos y de mejora al proyecto.

Principalmente agradezco a Dios que es el pilar fundamental de mi vida, y por darme una gran familia que me apoya incondicionalmente en todo momento.

A mi mamá que es una mujer increíble, comprensiva, amorosa, que me apoya en todo momento, me alienta a seguir adelante y es mi ejemplo de vida.

Gracias a ellos he llegado a este punto.

Resumen

La contaminación ambiental incrementa velozmente, cada día se encuentran nuevos compuestos de distinto origen, principalmente en agua. Por ejemplo, contaminantes que presentan alta persistencia y baja degradación ambiental denominados, “Contaminantes Emergentes”. El Triclosán pertenece a esta clasificación y es introducido constantemente al ambiente debido a su presencia en una diversidad de productos de uso diario, induce la alteración de los ecosistemas y se caracteriza como disruptor endocrino.

El presente trabajo aborda este tema debido a la falta de normatividad mexicana vigente, para la regulación de estos contaminantes. Existen muchas limitaciones en cuanto a la información de estos compuestos debido a su estudio reciente, además realizar análisis de laboratorio requiere de técnicas de alta precisión como Cromatografía Líquida de Alta Eficacia (HPLC) y otras, que son costosas y requieren mucho tiempo. Como alternativa existen estudios *in silico* que reducen tiempo y costos.

El análisis del comportamiento y destino ambiental del Triclosán, se realizó mediante el modelo EPI (Estimation Programs Interface) Suite™, desarrollado por la EPA y Syracuse Research Corp. (SRC), permitiendo la estimación e interpretación de propiedades físicoquímicas y biológicas, a través de diferentes programas contenidos en esta suite.

Los resultados obtenidos en la simulación realizada en el trabajo, muestran al Triclosán como una sustancia de baja volatilidad, por lo que la vida media en cuerpos de agua es muy prolongada, limitando su presencia en la atmósfera. La remoción biológica de este contaminante en una planta de tratamiento, oscila entre el 68.70% y 83.10% según las condiciones establecidas en el programa. Los porcentajes de fugacidad indican que el Triclosán tiene mayor afinidad a migrar al suelo y los sedimentos, por lo que se debe tener un mayor interés en el monitoreo de estos compartimentos ambientales.

La información generada en el presente trabajo facilitará un acercamiento integral para fines de gestión o regulación futura de Contaminantes Emergentes en México y tomar conciencia sobre el uso de productos que contengan compuestos considerados Contaminantes Emergentes.

Palabras clave: Contaminantes Emergentes, volatilización, remoción biológica, fugacidad.

Abstract

Environmental pollution increases rapidly, every day new compounds of different origin are found, mainly in water. For example, pollutants with high persistence and low environmental degradation called “Emerging Pollutants”. Triclosan belongs to this classification and is constantly introduced to the environment due to its presence in a variety of products for daily use, it induces the alteration of ecosystems and is characterized as an endocrine disruptor.

The present work addresses this issue due to the lack of current Mexican regulations for the regulation of these pollutants. There are many limitations regarding the information of these compounds due to their recent study, in addition to performing laboratory analysis requires high precision techniques such as High Performance Liquid Chromatography (HPLC) and others, which are expensive and time consuming. As an alternative, there are *in silico* studies that reduce time and costs.

The analysis of behavior and environmental fate of Triclosan was carried out using the EPI (Estimation Programs Interface) Suite TM model, developed by the EPA and Syracuse Research Corp. (SRC), allowing the estimation and interpretation of physicochemical and biological properties, through of different programs contained in this suite.

The results obtained in the simulation carried out in the present work show Triclosan as a low volatility substance, so the half-life in water bodies is very long, limiting its presence in the atmosphere. The biological removal of this pollutant in a treatment plant is effective, ranging between 68.70% and 83.10% according to the conditions established in the program. The percentages of fugacity indicate that Triclosan has a greater affinity to migrate to the soil and sediments, so a greater interest should be taken in monitoring these environmental compartments.

The information generated in this work will facilitate a comprehensive approach for future management or regulation of Emerging Pollutants in Mexico and to raise awareness about the use of products that contain compounds considered Emerging Pollutants.

Keywords: Emerging Pollutants, volatilization, biological removal, fugacity.

CONTENIDO

INTRODUCCIÓN	1
PLANTEAMIENTO DEL PROBLEMA.....	3
JUSTIFICACIÓN	5
OBJETIVOS	6
OBJETIVO GENERAL.....	6
OBJETIVOS ESPECÍFICOS	6
HIPÓTESIS	6
CAPÍTULO I. ANTECEDENTES.....	7
1.1 Panorama hídrico.....	7
1.2 Generación de aguas residuales.....	8
1.3 Contaminantes Emergentes	9
1.3.1 Fuentes de contaminación de los Contaminantes Emergentes.....	13
1.4 TRICLOSÁN	14
1.4.1 Características del Triclosán.....	14
1.4.1.1 Compuesto Xenobiótico	15
1.4.1.2 Disruptor Endocrino	15
1.4.1.3 Fugacidad	16
1.4.1.4 Volatilidad	16
1.4.1.5 Polaridad	17
1.4.2 Usos del Triclosán.....	17
1.4.3 Consecuencias del Triclosán en el ambiente	18
1. 4.4 Consecuencias de Triclosán en la salud humana	19
1.5 Plantas de Tratamiento Biológico de Aguas Residuales	20
1.5.1 Lodos activados	21
1. 6 Técnicas analíticas utilizadas para la detección de Contaminantes Emergentes.....	23
1.7 Degradación ambiental de Triclosán.....	24
1. 8 Movilidad y transporte ambiental	25
1.9. Modelos ambientales.....	27
1.9.1 Tipos de modelos	28
1.9.2 Metodología QSAR	31

1.9.2.1 Ventajas y desventajas de la metodología QSAR	31
1.9.3 Estimación <i>in silico</i> : EPI Suite	32
1.10 Normatividad y regulación de Contaminantes Emergentes	32
1.10.1 Uso de los modelos <i>in silico</i> en el contexto de la regulación en Estados Unidos.	34
CAPÍTULO II. METODOLOGÍA	37
2.1 EPI Suite™	37
2.2 Fundamento del modelo de estimación de Volatilización.....	37
2.2.1 Pasos básicos del calculo.....	38
2.2.2 Método Group.....	40
2.2.3 Método Bond	40
2.2.4 Criterios para interpretación de resultados.....	41
2.2.5 Modelo de Volatilización en agua (ríos y lagos) – WVOLWIN™	43
2.3 Fundamento del modelo de estimación del Porcentaje de Remoción en Plantas de Tratamiento Biológico de Agua Residuales.	44
2.3.1 Porcentaje de remoción en Planta de Tratamiento de Agua Residual Biológico- STPWIN™	48
2.4 Fundamento del modelo de estimación de Fugacidad.....	49
2.4.1 Criterios para interpretación de resultados.....	58
2.4.2 Modelo de Fugacidad multimedia de nivel III de Triclosán -LEV3EPI™	59
CAPÍTULO III. RESULTADOS Y DISCUSIÓN	64
CONCLUSIONES	79
RECOMENDACIONES	81
TRABAJOS CITADOS	82

ÍNDICE DE TABLAS

<i>Tabla 1: Contaminantes Emergentes de mayor interés.....</i>	<i>11</i>
<i>Tabla 2: Contaminantes Emergentes de interés para México.....</i>	<i>12</i>
<i>Tabla 3: Porcentajes de remoción de Triclosán en diferentes países.</i>	<i>23</i>
<i>Tabla 4: Técnicas analíticas utilizadas para detectar Contaminantes Emergentes.....</i>	<i>24</i>
<i>Tabla 5: Técnicas analíticas de degradación del Triclosán.....</i>	<i>25</i>
<i>Tabla 6: Movilidad de los contaminantes</i>	<i>26</i>
<i>Tabla 7: Generalizaciones para la volatilidad de productos químicos dentro de los rangos específicos de HLC.....</i>	<i>42</i>
<i>Tabla 8: Solubilidad en agua</i>	<i>43</i>
<i>Tabla 9: Propiedades del sistema predeterminadas para STPWIN</i>	<i>46</i>
<i>Tabla 10: Relación BIOWIN de vidas medias.....</i>	<i>47</i>
<i>Tabla 11: Propiedades y dimensiones de los compartimentos del modelo de destino multimedia.</i>	<i>51</i>
<i>Tabla 12: Valores predeterminados de fracción de volumen y densidad del modelo de destino multimedia. .</i>	<i>51</i>
<i>Tabla 13: Definición de capacidades de fugacidad.</i>	<i>53</i>
<i>Tabla 14: Valores de MTC para procesos de transporte intermedio en el modelo.....</i>	<i>56</i>
<i>Tabla 15: Clasificación de polaridad según el valor de Log Kow de un compuesto.</i>	<i>59</i>
<i>Tabla 16: Parámetros para el cálculo de volatilización</i>	<i>64</i>
<i>Tabla 17: Parámetros de entrada de volatilización y valores de vida media obtenidos para Triclosán.</i>	<i>65</i>
<i>Tabla 18: Valor de HLC a diferentes temperaturas.....</i>	<i>68</i>
<i>Tabla 19: Propiedades para el proceso de tratamiento biológico de Triclosán.....</i>	<i>69</i>
<i>Tabla 20: Parámetros de configuración de la planta de tratamiento de aguas residuales.....</i>	<i>70</i>
<i>Tabla 21: Balance de masa química general de la planta de tratamiento de agua residual, usando 10000 hr para Bio P, Bio A y Bio S.</i>	<i>71</i>
<i>Tabla 22: Parámetros de configuración de la planta de tratamiento de aguas residuales.....</i>	<i>72</i>
<i>Tabla 23: Balance de masa química general de la planta de tratamiento de agua residual, usando valores proporcionados por BIOWIN.....</i>	<i>73</i>
<i>Tabla 24: Parámetros y sus valores que el modelo MCI utiliza para hacer el cálculo de fugacidad.....</i>	<i>75</i>
<i>Tabla 25: Resultados de Fugacidad en los diferentes compartimentos ambientales.....</i>	<i>75</i>

ÍNDICE DE FIGURAS

<i>Figura 1: Estructura química del Triclosán.....</i>	<i>14</i>
<i>Figura 2: Diagrama de un proceso de tratamiento biológico de agua residual implementando el proceso de lodos activos. (Velasco, Molano & Pramparo, 2019).</i>	<i>23</i>
<i>Figura 3: Pantalla de entrada de EPI Suite, para el programa de volatilización.</i>	<i>43</i>
<i>Figura 4: Pantalla de parámetros de vida media. A). Opciones para el método de estimación del modelo. B) Relaciones de vida media para las estimaciones en BIOWIN.</i>	<i>49</i>
<i>Figura 5: Diagrama conceptual del modelo de fugacidad de destino multimedia en EPI Suite.</i>	<i>50</i>
<i>Figura 6: Pantalla de entrada de EPI Suite, para los parámetros de Fugacidad.</i>	<i>59</i>
<i>Figura 7: Pantalla de parámetros necesarios para el modelo de fugacidad. A). Opciones para el método de estimación de vidas medias del modelo. B) Valores de vida media predeterminados por la EPA. C) Relaciones de vida media para las estimaciones en BIOWIN. D) Factores de vida media de BIOWIN.</i>	<i>60</i>
<i>Figura 8: Parámetros necesarios para estimar los valores de emisiones en el modelo de fugacidad. A) y B) Número de ejecuciones de salidas del modelo de nivel III. c) Tasa de emisión ambiental.</i>	<i>61</i>
<i>Figura 9: Parámetros de entrada de los valores de advección para el modelo de fugacidad.</i>	<i>62</i>
<i>Figura 10: Opciones del modelo de fugacidad para obtener el valor Koc del suelo. A) Valor Koc del suelo basado en el método MCI. B) Valor Koc del suelo introducido por el usuario.</i>	<i>62</i>

INTRODUCCIÓN

En las últimas dos décadas se han identificado en aguas residuales crudas y tratadas, grupos de contaminantes de diferentes orígenes, que se caracterizan por una alta persistencia y baja degradación en el ambiente denominados, Contaminantes Emergentes (Robledo et al. 2017). El Triclosán (TCS), considerado contaminante emergente, es el ingrediente activo antiséptico más común utilizado en productos de cuidado personal y otros que contienen de 0.1 a 0.3% del compuesto, se absorbe a través de la mucosa, piel, boca y tracto gastrointestinal. Su uso puede provocar varios efectos adversos incluyendo alergias, resistencia a los antibióticos, alteraciones endocrinas, toxicidad aguda-crónica y bioacumulación; incluso se han identificado sustancias cancerígenas (Carrasco & Lozano, 2017)

Para realizar el estudio en laboratorio de compuestos tóxicos, se deben llevar a cabo técnicas de extracción y cromatografía, por ejemplo; extracción en fase sólida y Cromatografía Líquida de Alta Eficacia (HPLC), por mencionar algunas, sin embargo, estos estudios son de alto costo en instrumentación y operación. Si no se entregan resultados oportunos, el estudio puede prolongarse por más tiempo del necesario.

Por otro lado, existen estudios *in silico*, estos representan un ahorro muy significativo de tiempo y recursos, se caracterizan asimismo por la aplicabilidad de modelos matemáticos y predicción del comportamiento de nuevas estructuras. Una de las primeras aplicaciones de la química computacional fue la predicción de la actividad biológica basada en la estructura química: método QSAR (del inglés “Quantitative Structure-Activity Relationships”), que puede utilizarse para predecir las propiedades de destino fisicoquímicas, biológicas y ambientales de los compuestos a partir del conocimiento de su estructura química. (Lozano-Aponte & Scior, 2012)

El interés de este trabajo se debe a que en México no existen normas oficiales para contaminantes emergentes en materia de agua y hay pocos datos disponibles que indiquen la presencia, riesgo y toxicidad de estos compuestos en agua superficial y subterránea y que representan un grave problema ambiental. Por otro lado, los sistemas de tratamiento de aguas residuales que operan en México no están diseñados para degradar este tipo de

contaminantes, por lo que muchos compuestos tóxicos pasan el proceso de tratamiento con poca o ninguna modificación en su concentración.

La presente tesis aborda el análisis mediante técnicas *in silico*, el comportamiento de distribución y eliminación del Triclosán en entornos naturales y de plantas de tratamiento biológico. El modelo por utilizar es EPI (Estimation Programs Interface) Suite™, desarrollado por la EPA y Syracuse Research Corp. (SRC). Es un conjunto de programas basado en Windows que permite la estimación de propiedades físicas / químicas y de destino ambiental, del contaminante en cuestión, así como su interpretación.

El análisis se basa en las siguientes variables; la volatilización a través del programa WVOLWIN, el porcentaje de remoción de Triclosán en una planta de tratamiento biológico, de aguas residuales utilizando el programa STPWIN. La evaluación de fugacidad del Triclosán en un entorno evaluativo entre agua, suelo, aire y sedimentos, a través del programa LEV3EPI, y la estimación a través del programa BIOWIN de la tasa de biodegradación ambiental del Triclosán, que se utilizará dentro de los programas anteriores.

El presente proyecto permitirá visualizar escenarios más reales, permitiendo el ahorro de tiempo, recursos y personal. Además, los datos obtenidos de los programas aportarán información relevante para su regulación futura, o estudios posteriores del Triclosán como contaminante emergente.

PLANTEAMIENTO DEL PROBLEMA

Con el desarrollo de la tecnología se han producido muchos compuestos químicos sintéticos, lo que ha generado un incremento en el número de contaminantes que son considerados un potencial amenazador para el ambiente y todo organismo vivo.

Hoy en día se habla de Contaminantes Emergentes (CEs) estos, corresponden en la mayoría de los casos a contaminantes no regulados, que pueden ser candidatos a regulación futura dependiendo de investigaciones sobre sus efectos potenciales en la salud y los datos de monitoreo con respecto a su incidencia, ya que se encuentran en bajas concentraciones (generalmente en partes por millón o partes por trillón). (Henríquez, 2012).

También incluye la síntesis de nuevos compuestos químicos o cambios en el uso y disposición de los productos químicos ya existentes. Los contaminantes emergentes comprenden una amplia gama de compuestos químicos, productos farmacéuticos, de cuidado personal, agentes tensoactivos, plastificantes, aditivos industriales, etc., que no están incluidos en el monitoreo actual de programas de tratamiento de aguas; por lo que una alta proporción de estos compuestos y sus metabolitos no sufren ningún cambio y entran con elevada toxicidad al medio acuático. (Herrero et al, 2012 & Barreto,2017)

Diversos estudios han demostrado que los contaminantes emergentes se encuentran en cuerpos de agua como; aguas residuales, ríos, arroyos, aguas subterráneas y entornos marinos, generando un interés creciente sobre los efectos perjudiciales que estos compuestos representan para el medio ambiente y la salud humana ya que se ha proporcionado evidencia sobre su acumulación y efectos negativos en organismos acuáticos (Cartagena, 2011 & EPA,2019).

Dentro de los contaminantes emergentes, se encuentra el Triclosán (TCS), el cual es objeto de estudio, es un agente antimicrobiano sintético de amplio espectro, ampliamente utilizado en productos de cuidado personal como jabones, cremas, pastas dentales, cosméticos, cremas para la piel y desodorante, así como en productos textiles, entre otros. (Seoane, 2018)

El Triclosán tiene actividad antibacteriana contra bacterias, hongos y virus; sin embargo, su uso sigue siendo controvertido ya que se han informado diversos efectos adversos, incluyendo alergias, resistencia a los antibióticos, alteraciones endocrinas, toxicidad aguda-

crónica y bioacumulación; incluso se han identificado sustancias cancerígenas. (Seoane, 2018)

Según McAvoy et al. 2002, hasta el 96% de Triclosán en productos de consumo se vierte por el desagüe, lo que lleva a una concentración de Triclosán que varía de 1 a 10 mg/L, en el afluente de una planta de tratamiento. Por otra parte, durante este proceso, el Triclosán puede convertirse en otros derivados: puede ser biológicamente metilado o clorado, pudiendo ser más tóxicos que el compuesto original.

Hasta hace algunos años ha pasado inadvertido, debido tanto a la limitación de técnicas analíticas para su detección, como a la falta de métodos toxicológicos para identificar su potencial efecto en los seres vivos, aunado a esto, los tratamientos convencionales de estos contaminantes y su eliminación del agua residual resulta ser difícil y costoso, ya que requiere de tecnologías avanzadas y personal capacitado. (Rodríguez, 2009)

JUSTIFICACIÓN

El Triclosán (TCS) es un agente antibacteriano utilizado en una gran variedad de productos de cuidado personal y otros. Las rutas más probables de exposición a TCS en humanos son la ingestión y la absorción cutánea, su eliminación al sistema de alcantarillado está provocando graves daños al ambiente y la salud pública, debido a sus propiedades de bioacumulación y resistencia a la degradación. (Yueh & Tukey, 2016)

Realizar estudios de laboratorio requiere mucho tiempo y recursos, para esto existen metodologías computacionales o *in silico* que relacionan numéricamente estructuras con sus actividades biológicas, método QSAR (*Quantitative Structure-Activity Relationships*).

Las ventajas de los estudios *in silico* es que son una herramienta accesible haciendo que la construcción de moléculas y los cálculos sean sumamente rápidos y de bajo costo, ayudando a obtener resultados que contemplen escenarios y características que se modelan para obtener resultados predictivos más reales. Algunas desventajas, pueden ser la familiarización con las metodologías que se utilizan y la disposición de datos que se emplean para la realización de los cálculos. (Lozano-Aponte & Scior, 2012)

La importancia de realizar un análisis de riesgo *in silico* del Triclosán, radica en los efectos perjudiciales a consecuencia de sus características. Este estudio computacional ayuda a predecir los efectos tóxicos de las sustancias químicas en la salud humana y/o el medio ambiente, y adicionalmente comprender mejor los mecanismos por los que un producto químico determinado induce daño.

EPI (Estimation Programs Interface) Suite, es una herramienta computacional, desarrollada por la Agencia de Protección Ambiental de los Estados Unidos y Syracuse Research Corp. Algunos modelos que lo conforman son, WVOLWIN: para estimar la tasa de volatilización, STPWIN: calcula la tasa de remoción de un producto químico como el Triclosán en una planta de tratamiento biológico, LEV3EPI: para estimar la fugacidad de este contaminante, y BIOWIN: estima la tasa de biodegradación ambiental dentro de los programas anteriores. Con los resultados se obtendrá un panorama más real de los efectos que el Triclosán puede provocar en el ambiente y recabar datos que puedan ayudar en su regulación futura.

OBJETIVOS

OBJETIVO GENERAL

- Analizar *in silico*, el comportamiento y destino ambiental del Triclosán vertido a cuerpos de agua para conocer los impactos en la salud humana y el ecosistema.

OBJETIVOS ESPECÍFICOS

- Estimar la tasa de volatilización del Triclosán en cuerpos de agua, mediante el programa WVOLWIN.
- Predecir el porcentaje de remoción de Triclosán en una planta de tratamiento biológico de aguas residuales, utilizando el programa STPWIN.
- Evaluar la fugacidad del Triclosán en un entorno evaluativo entre agua, suelo, aire y sedimentos, a través del programa LEV3EPI.

HIPÓTESIS

El comportamiento y destino ambiental del Triclosán generan impactos negativos en la salud humana y el ecosistema receptor.

CAPÍTULO I. ANTECEDENTES

1.1 Panorama hídrico

La Tierra está formada por una serie de capas (atmósfera, hidrosfera, litosfera y biósfera) perfectamente diferenciadas, pero interconectadas e interrelacionadas, que en su conjunto determinan el medio ambiente donde se desarrollan las diferentes actividades del hombre y el resto de los seres vivos. El planeta está conformado en un 71% de agua, el resto es masa continental. La disponibilidad de agua promedio anual en el mundo es de aproximadamente 1,386 millones de kilómetros cúbicos, de los cuales aproximadamente el 97.5 % es agua salada y sólo el 2.5%, es agua dulce.

De esta cantidad casi el 70% no está disponible para consumo humano debido a que se encuentra en forma de glaciares, nieve o hielo. Alrededor del 30% es agua subterránea de difícil acceso y menos del 1% se encuentra en lagos, ríos, humedad en el suelo y aire, humedales, plantas y animales, solo este porcentaje está disponible para consumo humano y ecosistemas. (EAM, 2011)

Según el Fondo para la Comunicación y la Educación Ambiental (2015), México cuenta aproximadamente con el 0.1% del total de agua dulce disponible a nivel mundial, lo que determina que una parte importante del territorio sea considerado como zona semidesértica. Uno de los principales problemas que enfrenta nuestro país, es la desigual distribución del recurso hídrico a lo largo del territorio.

La precipitación pluvial constituye una parte importante del ciclo hidrológico, ya que produce el agua renovable del planeta. Anualmente México recibe aproximadamente 1, 449 471 millones de metros cúbicos de agua en forma de precipitación. De esta agua, se estima que el 72.1% se evapotranspira y regresa a la atmósfera, el 21.4% escurre por los ríos o arroyos, y el 6.4% restante se infiltra al subsuelo de forma natural y recarga los acuíferos. Tomando en cuenta los flujos de salida (exportaciones) y de entrada (importaciones) de agua con los países vecinos, el país anualmente cuenta con 451 585 millones de metros cúbicos de agua dulce renovable por año y está considerado como un país con baja disponibilidad de agua. (EAM, 2018)

1.2 Generación de aguas residuales

El porcentaje tan reducido en la disponibilidad de agua en el planeta, en conjunto con la desigualdad en su distribución, genera la responsabilidad de una gestión adecuada del agua como recurso vital.

Actualmente debe enfrentarse la creciente demanda de agua para satisfacer las necesidades de la población, las necesidades agrícolas y por supuesto no dejar de considerar las necesidades del medio ambiente. La generación de aguas residuales va en aumento al mismo tiempo que la población del país y el mundo entero aumenta de forma disparada.

Por todo lo anterior, es esencial un control preventivo en su aprovechamiento y un tratamiento después de su uso, con el fin de reducir considerablemente la contaminación causada por su vertido al cauce natural.

De acuerdo con la NOM-001-SEMARNAT-1996, se define como agua residual, aquellas de composición variada, contaminadas con impurezas provenientes de las descargas de usos municipales, industriales, comerciales, de servicios, agrícolas, pecuarios y domésticos, incluyendo fraccionamientos y en general de cualquier otro uso, así como la mezcla de ellas y son transportadas mediante el sistema de alcantarillado.

Estas tienen ciertas características físicas, químicas y biológicas, dependiendo del origen de desecho. Requieren sistemas de canalización, tratamiento y desalojo, de acuerdo a la normatividad establecida por cada país.

Las aguas residuales se dividen en dos grupos según su procedencia, aguas residuales municipales y aguas residuales industriales. Las primeras, proceden de comercios, escuelas y hogares de localidades urbanas y rurales y se colectan en sistemas de alcantarillado sanitario municipal, mientras que las aguas residuales industriales son aquellas generadas en procesos industriales. (SEMARNAT-INECC, 2018)

La contaminación del agua puede ser de diferente naturaleza en función de la procedencia del vertido.

1. **Aguas residuales domésticas.** Son aquellas de origen doméstico y están producidas en esencia por el metabolismo humano y por las actividades que se llevan a cabo en el ámbito doméstico. Suelen presentar un alto contenido en sólidos en suspensión,

materia orgánica, nitrógeno amoniacal, fosfatos y tensioactivos iónicos debido al uso de detergentes.

2. **Aguas residuales industriales.** Dentro de este tipo de aguas residuales se encuentran todas aquellas aguas residuales que han sido vertidas desde un lugar con finalidad comercial o industrial, que sean distintas de las domésticas y las aguas residuales de origen pluvial. Presentan características muy diversas, variando el caudal y la composición en función de la industria que las genera, pueden contener sólidos gruesos, materia orgánica, fosfatos, nitrógeno amoniacal, pesticidas y otras sustancias químicas.
3. **Aguas residuales urbanas.** Hacen referencia a aquellas aguas que contienen aguas residuales domésticas y aguas residuales industriales. También aquellas aguas que incluyen las aguas de corriente pluvial. (EAM, 2018 & Rodríguez, 2019)

Según las Estadísticas del Agua en México (2018) , en el país, tan solo el 63% de las aguas residuales son tratadas, el resto son vertidas sin previo tratamiento, contaminando suelo y aguas superficiales o en esas condiciones son utilizadas en riego agrícola, causando severos problemas de contaminación y deterioro ambiental poniendo en riesgo las funciones vitales de los ecosistemas y los servicios ambientales que proporcionan, también reducen las posibilidades de aprovechar los recursos naturales en beneficio de la sociedad y un riesgo obvio para la salud humana.

La gran cantidad de productos usados por el hombre, ha llevado en aumento la presencia de contaminantes nocivos para el ambiente, en los sistemas de agua residual.

1.3 Contaminantes Emergentes

La contaminación es el problema ambiental más importante de la actualidad, es el resultado de la introducción de un sinnúmero de sustancia al ambiente a dosis que sobrepasen los niveles aceptables en la naturaleza, causando deterioro o desequilibrio de los componentes habituales del planeta y efectos adversos en el hombre, flora y fauna. En específico, la contaminación del agua es un problema mundial que requiere urgentemente conceptos para el seguimiento y la implementación de planes que deriven soluciones. (SEMARNAT, 2015)

La Ley General de Equilibrio Ecológico y Protección al Ambiente (LGEEPA), define como contaminante, toda materia o energía en cualesquiera de sus estados físicos y formas, que al incorporarse o actuar en la atmósfera, agua, suelo, flora, fauna o cualquier elemento natural, altere o modifique su composición y condición natural; y que pueden causar efectos (adversos) para la salud o el medio ambiente.

El avance de sensibilidad que se ha desarrollado en las técnicas analíticas en los últimos años, ha permitido detectar la presencia de una serie de compuestos presentes en el agua, que no son necesariamente nuevos, sino previamente conocidos o incluso algunos todavía desconocidos, y que han estado presentes sin darles la importancia adecuada, actualmente despiertan la preocupación e interés por las consecuencias futuras que puedan presentar tanto a la salud humana como al medio ambiente y son denominados Contaminantes Emergentes (CEs). Estas sustancias están presentes en bajas concentraciones (rango de ng/Ly µg/L), son de naturaleza orgánica o inorgánica, sintéticas o de origen natural. (Seoane, 2018)

Los Contaminantes Emergentes (CEs) también llamados microcontaminates son altamente persistentes y de baja degradación ambiental. (Undiano, Arroyo, & Ayala, 2017) Por su parte, la Agencia de Protección Ambiental de Estados Unidos (EPA por sus siglas en inglés), define un contaminante emergente como un compuesto químico o un material que se caracteriza porque se percibe como un peligro potencial o real para la salud humana o el medio ambiente, pero que no cuenta con normativa legal y que han sido detectados en los diferentes compartimentos ambientales. También se les llama emergentes, porque produce un efecto poco estudiado en los humanos, o porque se han desarrollado nuevas tecnologías de detección y tratamiento.

Existe una continua introducción de Contaminantes Emergentes al ambiente debido a su presencia en un sinnúmero de productos de uso cotidiano, la persistencia de estos compuestos en el medio acuático depende de sus propiedades químicas como: solubilidad, volatilidad, fugacidad, absorción, biodegradación, polaridad y estabilidad, entre otras; estos factores pueden afectar la eficiencia de los procesos de tratamiento de las aguas residuales donde son transportados y, por ende, el porcentaje de remoción de estos mismos. (Robledo et al, 2017)

La lista de contaminantes de interés emergente incluye una amplia variedad de compuestos de diferentes estructuras y usos, así como metabolitos y productos de transformación.

Su grado de toxicidad es relevante y muchos pueden clasificarse como disruptores endocrinos, causando alteraciones en el crecimiento, desarrollo, reproducción y comportamiento de los seres vivos al estar en constante contacto con estos compuestos (Salazar, 2016)

Los contaminantes emergentes constituyen más de 70,000 compuestos orgánicos de uso diario, entre los que se encuentran compuestos o metabolitos presentes en diferentes productos. (Acosta, 2010)

En la Tabla 1 se muestran algunos de los contaminantes de interés emergente más representativos.

Tabla 1: Contaminantes Emergentes de mayor interés

Grupo de contaminantes	Subgrupo	Compuestos de interés
FÁRMACOS	Antibióticos	Lincosamidas, macrólidos, sulfamidas, tetraciclinas, quinolonas.
	Analgésicos y antiinflamatorios	Paracetamol, ácido acetil salicílico, ibuprofeno, diclofenaco, oxicam, codeína, acetaminofen.
	Antisépticos	Triclosán, clorofeno.
	Psiquiátricos	Benzodiacepinas, barbitúricos, Diazepam, fluoxetina, carbamazepina, Bezafibrato, ácido clofíbrico y fenofíbrico, atorvastatina.
	B-bloqueadores	Metoprolol, propranolol, timolol, atenolol.
	Medios de contraste de rayos X	Iopromide, iopamidol, diatrizoato.
	Esteroides y hormonas	Estradiol, estrona, estriol, dietilestilbestrol.
	Citostáticos	Vincristina, etopósido, cisplatino.
	Parabenos	Metilparabeno, etilparabeno, propilparabeno.
	PRODUCTOS DEL CUIDADO PERSONAL	Filtros solares
Perfumes		Fragancias nitro, policíclicas y macrocíclicas.
Repelentes		N, N-dietiltoluamida.

TENSOACTIVOS	Sulfonatos Alcanolamidas Alquilfenoles Benzotriazoles	α -olefin sulfonato de sodio. Lauril monoetanolamida. Nonilfenol, octilfenol. Benzotriazol, tolitriazol.
ADITIVOS Y AGENTES INDUSTRIALES	Agentes quelantes Aditivos de gasolina	Ácido etilendiaminotetraacético (EDTA). Dialquil éteres, Metil-t-bitil éter.
EDULCORANTES		Sacarina, sucralosa, aspartamo, ciclamato, stevia, neoesperidina dihidrocalcona (NHDC).
DROGAS DE ABUSO	Cocaínicos Opiáceos Opioides	Cocaína, benzoilecgonina. Morfina, codeína. Heroína, metadona.
SUBPRODUCTOS DE DESINFECCIÓN		Yodo, trihalometanos, bromoácidos, bromoacetónitrilos, bromoaldehidos, bromato.

Fuente: Salazar, 2016 & Barreto, 2017

Por su parte de acuerdo a datos proporcionados por Comisión Nacional del Agua (CONAGUA, 2020), México cuenta con una lista de contaminantes emergentes, en la cual solo se enlistan 17 de estos contaminantes, y se puede visualizar que el Triclosán no es de interés para el país, esta lista se presenta en la Tabla 2.

Tabla 2: Contaminantes Emergentes de interés para México.

Nombre del Contaminante Emergente	
1. Atenolol	10. Sulfametoxazol
2. Carbamazepina	11. Tetraciclina
3. Claritromicina	12. Azitromicina
4. Difenhidramina	13. Amoxicilina β -lactámico
5. Metoprolol	14. 17 β -Estradiol
6. Trimetoprim	15. Estrona (E1)
7. Oxitetraciclina	16. Glifosato
8. Roxitromicina	17. Plaguicidas
9. Sulfadimetoxina	

Fuente: Solicitud de lista de Contaminantes Emergentes de interés para México, con número 1610100215520, CONAGUA 2020.

1.3.1 Fuentes de contaminación de los Contaminantes Emergentes

El número de contaminantes detectados en los sistemas acuáticos, va en aumento considerable. Se ha establecido que estos compuestos entran al ambiente a través de diferentes fuentes y vías, por ejemplo, aguas residuales, efluentes y biosólidos de las plantas de tratamiento, excreciones humanas y animales, desechos médicos, veterinarios o industriales, lixiviados de vertederos, efluentes hospitalarios, ríos, lagos, embalses, estuarios y tanques sépticos, los cuales contienen un gran número de componentes orgánicos específicos y contaminantes emergentes que se producen a diferentes concentraciones en las aguas superficiales. (Pal et al, 2010) Sin embargo, también se destacan las actividades agrícolas y ganaderas como una fuente de contaminación difusa de plaguicidas, pesticidas, antibióticos y disruptores endocrinos. (Vadillo-Perez et al, 2018)

El organismo humano no es capaz de biotransformar completamente los activos principales de los fármacos, excretando así gran parte de estos, llegando de esta forma a las aguas residuales. Los contaminantes emergentes comprenden una amplia gama de compuestos químicos, que no están incluidos en el monitoreo actual de programas de tratamiento de aguas; sumado a esto las plantas de tratamiento de aguas residuales convencionales, no están diseñadas para eliminarlos; por lo que acaban esparcidos en los sistemas acuáticos naturales, haciéndose presentes en las cadenas alimentarias de los distintos ecosistemas. (Barreto, 2017)

Aunque estos contaminantes pueden estar presentes en niveles traza, se hace presente la creciente inquietud por los efectos adversos sobre la vida acuática, los animales e incluso los seres humanos, pues los criterios de calidad ambiental no se han podido establecer de forma certera, volviendo todo lo anterior motivo de preocupación científica y para las entidades ambientales reguladoras. (Eggen, Moeder, & Arukwe, 2010)

En México existe limitada información científica sobre la presencia de mezclas complejas de contaminantes no regulados, que tienen diversos orígenes y que representan un gran problema ambiental. Los trabajos de Durán-Álvarez et al. (2014 y 2015) han abierto las investigaciones en este país, centrándose en la cuantificación, transporte y biodegradación de contaminantes farmacéuticos como el Naproxeno, Carbamazepina y Triclosán, el último compuesto, será el contaminante que se analizará en el presente trabajo.

1.4 TRICLOSÁN

1.4.1 Características del Triclosán

El Triclosán (TCS), por su nombre IUPAC 5-cloro-2-(2,4-dicloro-fenoxi)-fenol, es un éter aromático que es fenol, está sustituido en C-5 por un grupo cloro y en C-2 por un grupo 2,4-diclorofenoxi, es un potente agente antimicrobiano, fungicida y desinfectante no iónico de amplio espectro, fue patentado en el año de 1964 y es incorporado en una variedad de productos para retardar o detener el crecimiento de bacterias, hongos y moho. Es comercializado bajo el nombre de Irgacare MP o Irgasan DP 300. En condiciones normales se encuentra en estado sólido, incoloro con un ligero olor a fenol. (Pal et al, 2010)

El Triclosán es hidrolíticamente estable, relativamente no volátil, hidrofóbico, estudios recientes sugieren que posee potencial androgénico y anti estrogénico y que presenta elevado potencial como disruptor endocrino. (Torres & Echeverria, 2017) Desempeña el papel de agente antibacteriano, fungicida, antipalúdico, xenobiótico, contaminante orgánico persistente y un alérgeno de fármacos. (Bermudez & Torres, 2019)

En la Figura 1, se muestra la estructura química de este compuesto y sus propiedades fisicoquímicas reportadas en la hoja de seguridad obtenida de SIGMA-ALDRICH actualizada en 2020.

Propiedades:

NO. CAS: 3380-34-5

Fórmula molecular $C_{12}H_7Cl_3O_2$

Peso molecular 289.5 gr/mol

Punto de fusión 56-58 °C

Punto de ebullición 280-290°C

Solubilidad en agua: 12 mg/L a 20 °C y 10 mg/L a 25 °C

Coefficiente de reparto n octanol/agua: log Kow 4.76

Constante de disociación: 8.14 a 20 °C

Densidad: 1.49 g/cm³

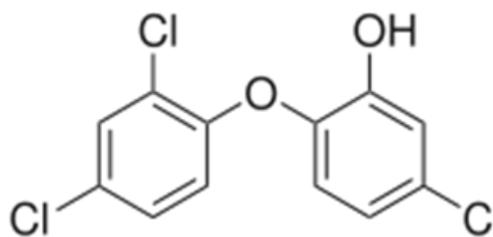


Figura 1: Estructura química del Triclosán

Temperatura de descomposición: > 350 °C

Presión de vapor: 4.6×10^{-6} mm Hg a 20 °C

Constante de disociación: $pK_a=7.9$

1.4.1.1 Compuesto Xenobiótico

Después del desarrollo industrial son muchos los compuestos químicos que están presentes en el medio ambiente que son exógenos a la composición y extraños al metabolismo natural de los seres vivos; a ese conjunto de sustancias referidas como ajenas o extrañas a los organismos vivos, se les denomina xenobióticos. (Seoane, 2018)

La concentración de compuestos xenobióticos ha incrementado considerablemente durante las últimas décadas a causa de los productos provenientes de diferentes procesos industriales, son motivo de preocupación esencialmente por sus efectos carcinogénicos, mutagénicos, teratogénicos y por sus características bioacumulables y biomagnificantes. (Pérez, 2017)

Muchos de los compuestos clasificados como xenobióticos, están dentro de los llamados contaminantes emergentes, por ejemplo, el Triclosán, estos compuestos tienen características semejantes, son sustancias químicas tóxicas, persistentes y bioacumulables, su origen puede ser de productos industriales y uso doméstico diario, en diferentes productos.

1.4.1.2 Disruptor Endocrino

Los disruptores endocrinos son sustancias exógenas al ser humano, que pueden ser naturales o sintéticas. Se trata de sustancias que intervienen en la formación, liberación, transporte, acoplamiento, actividad o desplazamiento de hormonas naturales del cuerpo que mantienen la homeostasis, el desarrollo, reproducción y comportamiento de los organismos. Se encuentran en aguas residuales en concentraciones inmensamente bajas (a niveles de $\eta\text{g/L}$ y $\mu\text{g/L}$). Llegan al medio a través de actividades humanas e industriales y no son capaces de ser eliminados por las plantas de tratamiento de aguas. Estos compuestos son de gran preocupación pues se desconoce su impacto total a largo plazo en humanos. (Baz, 2019)

Un ejemplo de estos disruptores es el Triclosán, usado en diferentes productos de consumo y cuidado personal. No obstante, este compuesto tiene efectos adversos a la salud humana,

como la disminución del tamaño y estructura de los testículos, infertilidad, y otros efectos en las hormonas sexuales. (Viloria, 2020)

1.4.1.3 Fugacidad

La fugacidad es la medida del potencial químico en la forma de "presión ajustada". Está directamente relacionada con la tendencia de una sustancia de preferir una fase (líquida, sólida o gas) frente a otra. A una temperatura y presión fijas el agua (por ejemplo) tendrá una fugacidad diferente en cada fase. Aquella fase con la menor fugacidad, será la más favorable; la sustancia minimiza entonces la Energía Libre de Gibbs.

El concepto de Fugacidad fue introducido por el químico americano Gilbert N. Lewis en su obra *The osmotic pressure of concentrated solutions, and the laws of the perfect solution* (La presión osmótica en las soluciones concentradas y las leyes de las soluciones perfectas). El coeficiente de fugacidad es adimensional y mide la "idealidad" de una sustancia. Cuanto más próximo a la unidad sea más ideal será y viceversa. (Ordoñez, 2018)

1.4.1.4 Volatilidad

Según Petrucci et al. (2003), en química, la palabra "volátil" se refiere a una sustancia que se vaporiza fácilmente, generalmente a condiciones estándar de temperatura y presión, las sustancias con mayor presión de vapor se evaporan más fácilmente que las sustancias con una menor presión de vapor. Una sustancia volátil tiene una alta presión de vapor a una temperatura determinada en comparación con un compuesto no volátil.

Una sustancia será más volátil cuando se evapore más fácilmente, es decir que posee menores fuerzas intermoleculares. Cuando la velocidad de las moléculas que abandonan la superficie del líquido (evaporación) es igual a la velocidad de las moléculas que regresan al líquido (condensación), se establece un equilibrio dinámico. En este momento ya no se modifica la cantidad de moléculas en el estado vapor.

El vapor ejerce entonces una presión constante conocida como presión de vapor del líquido (P_{vapor}), esto depende de la temperatura (T): a mayor T, mayor es la P_{vapor} . La presión de vapor de un líquido a una temperatura determinada es la presión ejercida por su vapor cuando los estados líquidos y gaseoso están en equilibrio dinámico.

A mayor intensidad de la fuerza intermolecular: menor volatilidad y menor presión de vapor.

Entonces la volatilización, es el proceso en el que un compuesto se mueve de una fase líquida o sólida a la gaseosa. La velocidad de volatilización de un compuesto en el suelo, es una función de su concentración, su presión de vapor y su solubilidad. Depende del tipo de compuesto, contenido de humedad, temperatura y porosidad del suelo, contenido de materia orgánica y de arcillas, entre otras. (SEMARNAT-INECC, 2018)

1.4.1.5 Polaridad

La polaridad representa la separación de las cargas eléctricas en una misma molécula de un compuesto químico. El agua es una molécula polar debido a que el alineamiento del hidrógeno y oxígeno produce un extremo positivo y otro negativo. Por ello moléculas polares tienden a disolverse en agua, en cambio moléculas no polares suelen repartirse en ambientes no polares (como: organismos vivos o suelos). (Delgado, 2016).

1.4.2 Usos del Triclosán

Como resultado de su actividad antiséptica contra un amplio rango de bacterias gram-positivas y gram-negativas, el Triclosán se encuentra presente en la gran mayoría de productos cotidianos. (Carrasco & Lozano, 2017)

De acuerdo con información de la Agencia de Protección Ambiental (EPA, 2019), se utiliza ampliamente como conservante y agente antimicrobiano en productos para el cuidado personal como jabones, cremas para la piel, pasta de dientes, shampoo, cosméticos, toallitas húmedas, talcos, bloqueadores, fragancias y desodorantes, así como en artículos domésticos, artículos de limpieza, equipamiento deportivo, hospitalario, calzado y algunos juguetes, ya que actúa como agente antibacteriano. (Bermudez & Torres, 2019)

Este agente antibacteriano está en el punto de mira desde el año 2000, cuando comenzaron a surgir las primeras incertidumbres sobre los riesgos que provocan a la salud.

La Unión Europea (UE) permite una concentración máxima del Triclosán del 0.3% en los productos, aunque este porcentaje sigue siendo inseguro para los consumidores, por la magnitud de la exposición acumulada, por ello la Comisión Europea considera que debe ser

restringido. Su uso es legal con la concentración máxima del 0.3% en los siguientes productos: en las pastas de dientes, jabones de manos o corporales y geles de ducha, desodorantes (no en aerosol), polvos compactos, maquillajes, productos para la higiene de las uñas previos a la aplicación de uñas artificiales, y está autorizado en una concentración máxima de 0.2% para los enjuagues bucales. En el resto de los productos cosméticos Triclosán aún está prohibido. (HENNEO, 2019 & Bermudez y Torres 2019)

Actualmente se siguen estudiando los efectos negativos que el Triclosán provoca en la salud humana y el ambiente.

1.4.3 Consecuencias del Triclosán en el ambiente

La ruta primaria del Triclosán para entrar al ambiente es a través de la descarga de efluentes de plantas de tratamiento de aguas residuales y la disposición de lodos en tierra. (Acosta, 2010) Actualmente, están siendo identificados porque están generando gran impacto ecológico y efectos sobre la salud, por tanto, su contacto con el medio acuático o en zonas ambientales presenta la eliminación de especies y daños en la fauna y flora. (Bermudez & Torres, 2019)

Se señala que, según las propiedades físico-químicas de los fármacos, sus metabolitos, productos de degradación, y las características de los suelos, estas sustancias pueden llegar a alcanzar las aguas subterráneas y contaminar los acuíferos o bien quedar retenidas en el suelo y acumularse, dando como resultado daños severos a los ecosistemas y a los humanos por medio de la cadena trófica. A escala mundial los fármacos más usados son analgésicos, antihipertensivos y antimicrobianos. (Gil et al, 2012)

La exposición a Triclosán genera una diversidad de efectos ecotoxicológicos desfavorables en múltiples especies. En estudios realizados sobre el efecto de esta sustancia en sistemas acuáticos se llegó a establecer que las algas y crustáceos, son las especies más susceptibles a este compuesto, aun en concentraciones muy bajas, un efecto sobre estos organismos tendría el potencial de generar un efecto en toda la cadena. Las algas unicelulares, específicamente las algas verdes y las cianobacterias, son 30 a 80 veces más sensibles a la exposición a Triclosán que otros organismos acuáticos. (Torres & Echeverría, 2017 & Sandoval 2016)

Asimismo, se ha demostrado que el Triclosán puede ser precursor de dioxinas, es decir, compuestos hidrofóbicos y lipofílicos altamente resistentes a ser metabolizados por especies vertebradas, incluida la humana. Como resultado de estas propiedades, la biomagnificación se produce a través de la cadena alimentaria, y a menudo pueden producirse altas concentraciones en el tejido de las especies predatoras de mayor nivel. (Acosta, 2010)

1. 4.4 Consecuencias de Triclosán en la salud humana

La Agencia de Protección Ambiental de Estados Unidos (EPA, 2019), considera al Triclosán como un contaminante de alto riesgo para la salud humana y el ambiente, debido a la similitud que la formulación química y la estructura molecular de este compuesto tiene con algunos de los productos químicos más tóxicos en la tierra, en relación a la dioxina y los policlorobifenilos (PCB).

El Triclosán puede absorberse y alcanzar la circulación sistémica a través de la membrana mucosa de la boca, por exposición dérmica a través de la piel y, después de la exposición oral, a través del tracto gastrointestinal, tiene la capacidad de alterar el sistema endocrino, acumularse en tejido muscular e incluso transmitirse durante la lactancia y aunque no se ha concluido sobre su posible efecto en la incidencia de cáncer de mama, este no ha sido descartado, pues se han realizado pocos estudios sobre el tema y falta evidencia científica. Por otra parte, podrían presentarse interferencias con las hormonas naturales del cuerpo y afectar la capacidad de los antibióticos al combatir infecciones en el cuerpo (esto debido a su uso excesivo, pues podría causar cambios en las bacterias que las hacen más difíciles de matar). (Torres & Echeverría, 2017, Weatherly & Gosse, 2017)

En líneas celulares humanas el Triclosán provoca androgenicidad, estrogenicidad, daño en membrana celular, acidosis metabólica, pérdida del potencial mitocondrial transmembranal y necrosis. Hay indicios de que en infantes causa desequilibrio en el nivel de hormonas tiroideas y problemas de comportamiento. (Netzahuatl & Rodríguez, 2020)

Toda la población está expuesta a la presencia de Triclosán y como ya se menciona anteriormente, es absorbido fácilmente por el cuerpo. En septiembre de 2016, el Triclosán fue prohibido por la Administración de Alimentos y Medicamentos de los Estados Unidos (FDA) en productos de jabón (líquido, gel, espuma, barra); sin embargo, Triclosán todavía

se permite en la pasta de dientes, desinfectante de manos y enjuague bucal. La Unión Europea (UE) prohibió el uso de Triclosán en todos los biocidas para la higiene humana a partir de enero de 2017. (Weatherly & Gosse, 2017)

1.5 Plantas de Tratamiento Biológico de Aguas Residuales

El tratamiento de aguas es el conjunto de operaciones unitarias de tipo físico, químico o biológico, tienen como objetivo principal la eliminación o reducción de la contaminación o las características no deseables de las aguas, ya sean naturales, de abastecimiento, de proceso o residuales. (Salazar, 2016)

La mejor alternativa de tratamiento se selecciona con base en el estudio individual de cada caso de acuerdo con las eficiencias de remoción requeridas y con los costos de cada una de las posibles soluciones técnicas. Los efectos de las aguas residuales sobre el sistema de tratamiento y sobre la fuente receptora son resultado de sus características, concentración y caudal. (Romero, 2004)

El tratamiento biológico de las aguas residuales, tiene como finalidad eliminar los contaminantes presentes en el agua mediante el uso de microorganismos. Fundamentalmente la materia orgánica soluble e insoluble y nitrógeno, son eliminados eficazmente por la actividad biológica. El fósforo también puede eliminarse de esta forma, sin embargo, es un método que no está cien por ciento implementado. (Buitrón et al, 2018)

Según Pilato 2017, durante el diseño de un proceso de tratamiento biológico de aguas, los principales aspectos a considerar, para garantizar su efectividad, son los siguientes:

- I. Requerimientos nutricionales óptimos para el crecimiento de los microorganismos y obtención de energía.
- II. Metabolismo de los microorganismos;
- III. Conocer la relación entre crecimiento microbiano y sustrato necesario;
- IV. Factores ambientales que afectan el crecimiento microbiano (temperatura, pH y el oxígeno presente en el reactor biológico).

Según Luna (2014), Las etapas para el tratamiento biológico son las siguientes:

Tratamiento preliminar: El efluente llega a la Planta de Tratamiento de Agua Residual (PTAR), los sólidos y materiales flotantes son retirados físicamente a través de procesos como el cribado, rejillas desarenadores, etc.

Tratamiento primario: En esta etapa se lleva a cabo la remoción parcial de sólidos suspendidos, materia orgánica u organismos patógenos, mediante métodos de precipitación por gravedad u otros medios, sirve como método de preparación del agua para el tratamiento secundario.

Un beneficio importante de las dos primeras etapas del proceso, es mantener el equipo e instalaciones de la PTAR en buen estado.

Tratamiento secundario: En esta etapa del proceso se remueve principalmente la Demanda Bioquímica de Oxígeno (DBO), Demanda Química de Oxígeno (DQO) y sólidos suspendidos por un proceso de oxidación y conversión de los compuestos a CO_2 y H_2O ; e incluye los procesos biológicos de lodos activados, filtros percoladores, sistemas de lagunas y sedimentación. Este proceso es efectuado por microorganismos que degradan la materia orgánica convirtiéndola en sustancias más sencillas en presencia de oxígeno, se reproducen generando lodo de exceso que debe ser removido periódicamente.

El tratamiento terciario y avanzado: Supone generalmente, la necesidad de remoción de nutrientes para prevenir la eutrofización de las fuentes receptoras o de mejorar la calidad del vertido final, mejorando sus características para adecuar el agua para su reúso.

1.5.1 Lodos activados

El proceso de lodos activos es un proceso de biomasa en suspensión, los microorganismos crecen en suspensión y se agrupan formando flóculos que a su vez forman una masa microbiana activa llamada “lodo activo o activado”. El término “activo” se refiere a la capacidad de este lodo (microorganismos) para metabolizar la materia orgánica soluble y coloidal a dióxido de carbono y agua. La mezcla de los lodos activos y del agua residual se denomina “licor de mezcla”. Las bacterias aerobias toman la materia orgánica como alimento. (Pilato 2017)

Los lodos evidencian una heterogénea población de microorganismos que cambian continuamente en función de las condiciones ambientales y la variación en la composición

de las aguas residuales, permiten el desarrollo de una depuración de origen natural en la que los microorganismos son capaces de devolver agua contaminada a su estado natural más parecido. (Luna, 2014)

Hoy en día, el proceso de lodos activos es el más utilizado tanto para tratamiento de las aguas urbanas como de las aguas industriales.

En el manual técnico sobre tecnologías biológicas aerobias aplicadas al tratamiento de aguas residuales industriales, Buitrón et al., (2018) describe que el proceso de lodos activos consta principalmente de:

- I. Un tanque de aireación (reactor) en el cual los microorganismos se mantienen en suspensión y aireados. Es en este momento en el que comienza a producirse la reacción de carácter biológico y oxidación de la materia orgánica.
- II. Un sistema de separación de sólidos, tras el primer procedimiento, el desagüe ya mezclado que llega del tanque aireador pasa a su sedimentación, donde se separan los sólidos suspendidos (lodos activados), para así conseguir el clarificado y
- III. Un sistema de recirculación para devolver la biomasa sedimentada (microorganismos y sólidos inertes) al reactor y conservar la concentración de microorganismos alta.

Los lodos restantes se consideran residuos y son distribuidos paralelamente para su tratamiento.

A continuación, en la Figura 2 se muestra el proceso de una planta de tratamiento biológico.

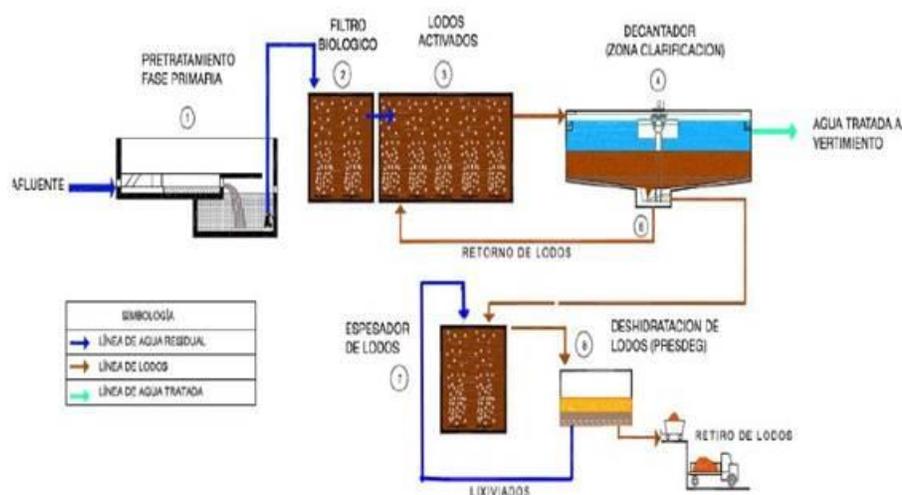


Figura 2: Diagrama de un proceso de tratamiento biológico de agua residual implementando el proceso de lodos activos. (Velasco, Molano & Pramparo, 2019).

En la Tabla 3, se presenta una serie de resultados bibliográficos obtenidos en análisis realizados para la remoción del Triclosán en plantas de tratamiento.

Tabla 3: Porcentajes de remoción de Triclosán en diferentes países.

Lugar	Porcentaje de remoción	Referencia
Guatemala	La remoción oscila entre 31 y 95% dependiendo de la etapa de tratamiento de muestreo.	(Torres & Echeverria, 2017)
Remoción general		
India (2 Estados)	77%	(Yang et al, 2017)
USA, California	>90%	
Corea	79%	
EE.UU.	55%	

1. 6 Técnicas analíticas utilizadas para la detección de Contaminantes Emergentes

Con la reciente identificación de Contaminantes Emergentes, surge la necesidad de implementar nuevas técnicas específicas de identificación para estos compuestos, ya que la concentración presente en el agua es muy baja, además de que puede haber interferencias con

otros compuestos. Algunas técnicas de identificación de contaminantes emergentes, se presentan en la Tabla 4.

Tabla 4: Técnicas analíticas utilizadas para detectar Contaminantes Emergentes.

Técnica analítica	Para que se utiliza.
Cromatografía de gases o líquida (GC o LC) acoplada a espectroscopia de masas (MS/MS).	Detecta la mayoría de Compuestos Emergentes.
Cromatografía Líquida de Alta detección de diodos (HPLC-DAD) Equipo de cromatografía líquida acoplado a un espectrómetro cuádruple de masas. (LC-MS)	Detección de Fármacos
Cromatografía de gases acoplado a la espectrometría de masas. (GC-MS)	Detección de Fármacos y productos de cuidado personal.
Cromatografía líquida acoplado con espectrometría de masas. (LC-MS)	Detección de hormonas sintéticas, productos de cuidado personal, fármacos y drogas ilícitas.
Cromatografía líquida y de gases acopladas con espectrometría de masas. (LC-MS o GC-MS)	Análisis de coproductos del procesamiento de pescado (FPCP)
Cromatografía de gases junto con espectrometría de masas (GC/MS/MS).	Detección de Fragancias
Cromatografía de líquidos junto con espectrometría de masas (LC/MS/MS).	Identificación y cuantificación de Antibióticos

Fuente: Aguilar, 2013 & Luján, 2015

1.7 Degradación ambiental de Triclosán

La biodegradación depende de la presencia de una comunidad de organismos capaces de transformar los contaminantes a través de redes metabólicas y la biodisponibilidad de los contaminantes, especialmente los sedimentos y el suelo.

El Triclosán es un compuesto presente en el ambiente a consecuencia de muchos productos. Dentro de las diferentes tecnologías de degradación, las principales y que tienen considerables porcentajes de remoción para el Triclosán son: fotodegradación, biodegradación, degradación con ozono, electro-fenton y degradación con nano partículas que según estudios pueden ir desde el 70% de eliminación al 99% de eliminación. (Molina-Andrade, 2014)

En la Tabla 5, se presentan algunas de las técnicas empleadas para la degradación del Triclosán.

Tabla 5: Técnicas analíticas de degradación del Triclosán.

Tecnología	Porcentaje	Productos de degradación	Referencia
Fotocatálisis heterogénea, utilizando catalizador inmovilizado.	Superior al 90% en 20 minutos.	2,4-diclorofenol dioxinas, y generación de radicales hidroxilos.	(Kosera et al, 2017)
Biodegradación con <i>Pseudomonas</i>	95.8 ±1.2 %		(Veetil et al, 2012)
Biodegradación (cepa <i>Sphingopyxis</i> KCY1)	100%	Cloruro	(Zhao et al, 2012)
Electro-fenton	82.7%		(Song et al, 2012)
Ozono	92%	2,4-diclorofenol, cloro-catecol, mono-hidroxitriclosán y di-hidroxitriclosan	(Chen, et al (2012)

Es importante tener en cuenta que, al ser técnicas de alta sensibilidad, son muy costosas por los equipos necesarios y requieren tiempo para la realización correcta del análisis.

1. 8 Movilidad y transporte ambiental

A medida que los contaminantes son "emergentes", existe poca evidencia experimental disponible en cuanto a su transporte y reparto en el ambiente.

La movilidad ambiental: es la capacidad de cambiar de medio. Un número significativo de contaminantes emergentes resultantes de la contaminación concentrada y difusa, se encuentran presentes en el medio acuático. (Yang et al, 2017)

En la ecuación 1 de Henderson-Hasselbalch, se muestra la constante de disociación (pKa) que determina la relación entre la forma ionizada y la forma neutra de un compuesto. Así, las sustancias con carácter ácido presentan una elevada movilidad en los suelos. Por otro lado, las sustancias con propiedades básicas presentan una baja movilidad en los suelos.

$$pKa = pH - \log\left(\frac{A^-}{HA}\right) \text{ [Ec. 1]}$$

Donde:

pKa: Constante de disociación

pH: Potencial de hidrógeno

A- Forma ionizada del compuesto

HA: Forma neutra del compuesto

En la siguiente tabla (Tabla 6), se muestra la movilidad de los contaminantes respecto a los valores de pKa.

Tabla 6: Movilidad de los contaminantes

Valores de pKa	Movilidad
pKa <3-4	Movilidad alta
10 > pKa >3-4	Movilidad moderada
pKa >10	Baja movilidad

Fuente: Delgado, 2016

Se ha demostrado que los contaminantes emergentes, se adhieren al ciclo hidrológico, hecho que intensifica la preocupación por la presencia de estos compuestos, pues algunos tienen la capacidad de transportarse a largas distancias y presentan una gran ubicuidad en el ambiente. Los efectos adversos de los Contaminantes Emergentes presentes en los ambientes acuáticos dependen de la frecuencia y la cantidad de su dosificación, si se encuentran en su forma

nativa o como metabolitos y de la matriz ambiental en la que se encuentren. (Hernández et al, 2019)

De acuerdo con algunos estudios realizados, en las áreas naturales, los contaminantes emergentes se distribuyen de manera difusa sobre el área y son transportados dependiendo de sus propiedades a través del aire, escorrentía, erosión o lixiviación hasta llegar a un cuerpo de agua, penetrando en aguas subterráneas o superficiales. Pueden ser interceptados por el suelo por sorción o pueden degradarse durante el transporte y nunca llegar a los cuerpos de agua. Una vez que se alcanzan los cuerpos de agua, puede ocurrir un mayor transporte corriente abajo en solución o material adherido a suspendido. La presencia de estiércol o lodos en suelos agrícolas no solo puede afectar el comportamiento de absorción de estos materiales sino su persistencia.

Como muchos otros tóxicos, los contaminantes emergentes muestran una presencia multicompartimental en el medio ambiente. Es decir, se involucra a más de un compartimento (agua, aire, suelo, sedimentos, etc.) en el ambiente, los efectos en cada compartimento son diferentes. Es necesario un mecanismo eficaz para la evaluación y gestión de los riesgos basados en los ecosistemas a través del desarrollo y aplicación de metodologías armonizadas aplicadas a todos los compartimentos que contienen contaminantes emergentes, con particular énfasis en la priorización en el medio acuático. (Geissen et al, 2015)

1.9. Modelos ambientales

Un modelo ambiental es aquel que pertenece a un aspecto específico del entorno natural o construido, es una representación simplificada de una realidad compleja de forma que resulte adecuada para los propósitos de la modelización.

Esta simplificación se basa en una serie de estimaciones acerca de cómo funciona un sistema que no son totalmente reales, pero permiten representar el sistema de forma más sencilla. Se han desarrollado modelos ambientales para representar, entre otras cosas, elementos del sistema climático de la Tierra, procesos hidrológicos, ecosistemas y ciclos biogeoquímicos. (Barnsley, 2007)

Las finalidades de los modelos son:

- Mejorar la comprensión
- Facilitar la predicción
- Realizar simulaciones

La producción de un modelo ambiental implica un proceso de abstracción, en el sentido de que los modelos ambientales abordan conceptos e ideas abstractas en lugar de objetos y eventos físicos (conceptualización), examina los elementos componentes de un sistema ambiental procesos y estructuras que gobiernan las relaciones e interacciones entre ellos.

Declaración de suposiciones

Todo modelo se basa en un conjunto de supuestos que simplifican el sistema lo suficiente para producir un modelo de trabajo y reflejar los límites del conocimiento del sistema objetivo.

La validez y alcance de las suposiciones determinan el valor del modelo. Es posible que se descubra que algunas suposiciones son incorrectas, en cuyo caso es importante que se revisen, reconozcan, comprendan y se establezcan explícitamente para aclarar la naturaleza, el propósito y las limitaciones del modelo

La necesidad de decidir qué aspectos de la realidad se deben incluir en el modelo hace que este refleje no sólo la realidad del sistema, sino también la percepción que el investigador tenga del mismo o las teorías que considera más adecuadas para representarlo. De este modo se puede estudiar como diversas políticas, acontecimientos imprevistos o nuevas actividades afectan a los elementos del sistema representado en el modelo, bajo la premisa de que los resultados serán similares en la realidad. (Barnsley, 2007 & Toca & Carrillo 2013)

1.9.1 Tipos de modelos

Según Barnsley (2007) los modelos se clasifican en:

- 1. Modelo Empírico:** Se basa principal o exclusivamente en observaciones.

Las relaciones entre los elementos componentes del sistema se establecen examinando las mediciones de las variables en cuestión. La forma de cada relación está definida por una

función elegida de un conjunto de funciones candidatas Es valioso para hacer predicciones en los casos para los que se desarrollan, pero por lo general carecen de generalidad (es difícil emplearlos en otras ubicaciones espaciales o puntos en el tiempo).

- 2. Modelo Determinístico:** Es aquel en el que las salidas (resultados) son determinadas única y consistentemente por las entradas (valores utilizados para impulsar el modelo).

Las salidas (resultados) se determinan única y consistentemente por las entradas (valores utilizados para el modelo). Funcionan de la misma manera y producen la misma salida, cada vez que se ejecutan utilizando un conjunto fijo de valores de entrada. Basado en supuestos, teoría o conocimiento de la naturaleza y forma de las relaciones entre las variables en el sistema objetivo

- 3. Modelos estocásticos (probabilísticos):** es aquel en el que los eventos y efectos aleatorios juegan un papel importante.

El estado de las variables del modelo se describe mediante distribuciones de probabilidad, en lugar de valores únicos. Como resultado, la salida del modelo varía de una ejecución a otra, incluso cuando se utiliza un conjunto fijo de valores de entrada.

4. Modelos de caja negra y caja blanca

Los modelos matemáticos también se pueden clasificar de acuerdo con el grado en que la composición, la estructura y el funcionamiento del sistema de destino se conocen y se representan en el modelo.

Modelos de caja blanca: El funcionamiento interno del sistema de destino se conoce, se comprende completamente y se indica claramente

Modelos de caja negra: El sistema de destino se trata como una unidad sellada, generalmente definido empíricamente

La mayoría de los modelos se encuentran en algún lugar entre estos dos extremos (modelo de caja gris).

5. Modelado directo e inverso

Modelo directo: Expresa matemáticamente la relación funcional (función “f”).

Modelo inverso: Expresa matemáticamente la relación de la función inversa del método directo. (inversa de la función “f”).

Para muchos modelos deterministas y estocásticos, el problema de modelado inverso es muy desafiante e implica el uso de soluciones analíticas y numéricas

6. Modelos estáticos y dinámicos

Los modelos estáticos se aplican a sistemas que no cambian, o al menos se piensa que no cambian significativamente con respecto al tiempo. La atención se centra en los procesos o fuerzas que mantienen el sistema en un estado de equilibrio.

Los modelos dinámicos se aplican a sistemas que cambian con el tiempo

Normalmente construido a partir de ecuaciones diferenciales. Ayudan a comprender el comportamiento de un sistema ambiental con respecto al tiempo.

7. Modelos continuos y discretos

Modelos discretos: El tiempo transcurre en una serie de pasos finitos, generalmente de igual duración. Cada paso se relaciona con un intervalo de tiempo específico (por ejemplo, hora, día, mes). El estado del sistema se actualiza al final de cada paso de tiempo.

Modelos continuos: El estado del sistema se actualiza instantáneamente en respuesta a cambios continuos en los factores de fuerza.

8. Modelos de parámetros distribuidos y agrupados

Los sistemas ambientales a menudo exhiben considerables heterogeneidades en los valores de sus variables y los procesos que los controlan.

Los modelos de parámetros distribuidos: asignan diferentes valores de los parámetros y variables del sistema a estas unidades espaciales.

Los modelos de parámetros agrupados: asignan un único valor "agrupado" en todo el dominio espacial del modelo.

1.9.2 Metodología QSAR

En los últimos años, se han desarrollado una gran variedad de herramientas computacionales, una de ellas es la metodología que relaciona numéricamente estructuras químicas con sus actividades biológicas, mejor conocida como metodología QSAR (*Quantitative Structure-Activity Relationships*). QSAR reúne un conjunto de técnicas computacionales relacionadas con diseño y visualización espacial virtual de moléculas (también llamado *in silico*), cálculo de propiedades fisicoquímicas moleculares (Descriptores), bioinformática y estadística. (Lozano-Aponte & Scior, 2012)

Todo con el fin de hacer una predicción teórica de la actividad biológica que permita el diseño de compuestos aun no existentes o recientemente detectados. Los dos objetivos de la metodología QSAR se resumen a continuación:

- Permitir la predicción del riesgo biológico de compuestos caracterizados químicamente, con limitados o nulos ensayos biológicos y existencia de poca información.
- Extraer información de un compuesto acerca de las características moleculares, que puedan resultar determinantes para su actividad biológica. (Gaitán, 2014)

1.9.2.1 Ventajas y desventajas de la metodología QSAR

Al ser una ciencia que existe sólo en un entorno virtual desmaterializado, con enfoque en las relaciones estructura química y actividad biológica, el diseño de estos análisis es mucho más económico, ya que hay programas gratuitos, información parcialmente accesible, no requiere instrumental, ni reactivos químicos, etc., el uso de interfaces simplifican el manejo y diseño, además de que la construcción de las moléculas y el cálculo de descriptores pueden ser sumamente rápidos.

Algunas de sus desventajas son la familiarización con metodologías computacionales (diferentes sistemas operativos e interfaces gráficas, manejo de bases de datos, desarrollo del

software) y en este sentido, la resolución de diferentes problemas de cómputo (compatibilidad, actualizaciones, registros, formatos de datos). (Lozano-Aponte & Scior, 2012)

1.9.3 Estimación *in silico*: EPI Suite

Para la evaluación de destino ambiental que se realizará en este trabajo se utilizará el software EPI Suite™ versión 4.11. Los programas que se utilizarán no son programas independientes, es decir, no pueden funcionar por sí mismo sin la interfaz EPI y varios programas de esta suite.

EPI (Interfaz de programas de estimación) Suite™, es un conjunto de programas de estimación de propiedades fisicoquímicas y de destino ambiental desarrollado por la oficina de prevención de la contaminación de la Agencia de Protección Ambiental (EPA) de los Estados Unidos y Syracuse Research Corporation (SRC) para detectar nuevas sustancias químicas que carecen de datos experimentales basados en los cálculos. Los módulos dentro de este software, contienen información detallada sobre cómo se hacen las predicciones.

EPI Suite™ utiliza una sola entrada para ejecutar los siguientes programas de estimación: KOWWIN™, AOPWIN™, HENRYWIN™, MPBPWIN™, BIOWIN™, BioHCwin™, KOCWIN™, WSKOWWIN™, WATERNT™, BCFBAF™, HYDROWIN™, KOAWIN™ y AEROWIN™ y los modelos de destino WVOLWIN™, STPWIN™ y LEV3EPI™. ECOSAR™, que estima la ecotoxicidad, también se incluye en EPI Suite™.

Es importante comprender que EPI Suite™ es una herramienta de nivel de detección, si se dispone de datos medidos aceptables, no debe usarse. Los usuarios pueden ingresar datos experimentales en EPI Suite™ para reemplazar datos conservados por defecto y mejorar las estimaciones de las otras propiedades. Todos los usuarios deben utilizar estos métodos de forma adecuada e interpretar los resultados cuidadosamente. (EPA, 2020)

1.10 Normatividad y regulación de Contaminantes Emergentes

Debido al desconocimiento de su presencia e impacto en los distintos compartimentos ambientales y la escasez de datos ambientales disponibles sobre los Contaminantes Emergentes dificulta su regulación a través de las normas mexicanas para el control de la

contaminación del agua, además de que la disponibilidad de métodos para su análisis es nula o limitada.

Las consecuencias del uso de sustancias químicas a nivel mundial son preocupantes ya que la presencia de Contaminantes Emergentes se ha detectado además de aguas residuales, en aguas superficiales y subterráneas que son fuentes de abastecimiento de agua para consumo humano.

Por lo anterior es necesario continuar con estudios sobre estos y otros contaminantes, a fin de evidenciar los efectos sobre el ambiente y la salud humana, que trae consigo la omnipresencia de estos compuestos y el desinterés por el problema de contaminación ambiental que se está viviendo, con el fin de empezar a actuar para adoptar la reglamentación y normatividad que puedan regular su uso y tratamiento en nuestro país, ya que actualmente no se dispone de ella.

Dentro de la regulación internacional, muchos países, están a la vanguardia en cuanto al interés y esfuerzos por desarrollar una normatividad dirigida a vigilar la calidad del agua y evaluaciones de riesgo ambiental, que incluya a los productos farmacéuticos y otros Contaminantes Emergentes.

En la administración europea y española, el marco normativo relevante que afecta a los Contaminantes Emergentes en el medio ambiente europeo incluye un conjunto complejo de normativas que regulan la ubicación de la comercialización, el uso y las emisiones al medio ambiente, y la presencia de contaminantes en el medio ambiente y el agua potable (normas de calidad/seguimiento), desde una perspectiva legal todo empieza con la Directiva 2000/60/CE, también conocida como la Directiva Marco del Agua, la cual establece un marco global y estratégico para prevenir y controlar la contaminación del agua. A partir de aquí van surgiendo en cascada una serie de documentos normativos que incluyen los Contaminantes Emergentes recopilando información muy valiosa a través del tiempo y los estudios realizados.

El documento más reciente, se publicó en 2018, es la Decisión de Ejecución 2018/840/UE, en ella se establece una lista de ocho sustancias de observación, considerados Contaminantes Emergentes, los más estudiados de documentos anteriores. La lista de observación está compuesta por los siguientes compuestos; 17-alfa-etinilestradiol, 17-beta-estradiol estrona,

antibióticos macrólidos (eritromicina, claritromicina, azitromicina), 4.11 amoxicilina, y ciprofloxacina.

Uno de los principales organismos que investiga los Contaminantes Emergentes en Europa es el NORMAN Network, inició sus actividades en septiembre de 2005 con el apoyo financiero de la Comisión Europea (proyecto NORMAN - VI Programa Marco - Prioridad 6.3 - Contrato N ° 018486). En 2009, la red NORMAN se convirtió en una red autosuficiente permanente de laboratorios de referencia, centros de investigación y organizaciones relacionadas para el monitoreo y biomonitoreo de sustancias ambientales emergentes.

Norman Network (2021), recupera en una base de datos de compuestos, considerados Contaminantes Emergentes según estudios que se están realizando, hasta el momento se enlistan 1036 compuestos, con la última actualización en 2016 y asigna las sustancias a categorías de acción prioritarias.

En los Estados Unidos de Norte América, la regulación de los contaminantes en el medio ambiente está dentro del ámbito tanto de la Agencia de Protección Ambiental de los Estados Unidos (EPA, 2020), que tiene autoridad sobre la mayoría de los ámbitos del medio ambiente.

En países como Japón, Canadá y Australia, la reglamentación de la ley de protección ambiental, se enfocan en evaluaciones del riesgo ambiental que generan los productos farmacéuticos. En China, por su parte se ha puesto en marcha desde el año 2013 un plan quinquenal para el control y la prevención de los riesgos ambientales de las sustancias químicas incluidos los productos farmacéuticos

Los países latinoamericanos, presentan brechas al momento de establecer un espectro normativo referente a la generación en la fuente, transporte, comercialización y posconsumo de productos que generan Contaminantes Emergentes. (Rubio, Delgado, & Amaya, 2017)

1.10.1 Uso de los modelos *in silico* en el contexto de la regulación en Estados Unidos.

A continuación, se describe como la EPA por medio de proyectos implementados con diferentes empresas logra establecer los métodos *in silico* como una herramienta de gran utilidad para evaluar la intervención de nuevos productos químicos o sustancias químicas y que puedan estar dentro de las normas ambientales previniendo riesgos futuros. Esta

información se explica de forma más puntual en el manual Sustainable Futures/P2 Framework (2012).

Los métodos computacionales incluidos en el marco de Prevención de la Contaminación, de los Estados Unidos, están destinados a proporcionar información sobre el nivel de detección para ayudar a evaluar el riesgo potencial que representa una sustancia química o un grupo de sustancias químicas.

La Prevención de la Contaminación es el entendimiento de sentido común de que es más fácil y menos costoso prevenir problemas que corregirlos. Los modelos predictivos desarrollados por la Agencia de Protección Ambiental (EPA) y la Oficina de Prevención de la Contaminación y Sustancias Tóxicas (OPPT) para detectar nuevos químicos incluyen sistemas computacionales de toxicología, entre otros enfoques, que están integrados en el software EPI Suite. Los puntos finales abordados incluyen propiedades fisicoquímicas, de destino ambiental, peligro de cáncer, toxicidad acuática, exposición y riesgo.

En los años transcurridos desde que se implementó la Ley de Control de Sustancias Tóxicas (TSCA), la Oficina de Prevención de la Contaminación y Sustancias Tóxicas (OPPT) ha recibido una gran cantidad de datos de Información Comercial Confidencial de empresas, sobre decenas de miles de productos químicos que cubren la amplia gama de productos químicos.

Siempre que sea posible, el conocimiento de Información Comercial Confidencial de las presentaciones de Aviso de Prefabricación se utiliza para desarrollar las Relaciones Estructura-Actividad (SAR). Los SAR en sí mismos no son Información Comercial Confidencial y pueden divulgarse al público. Un ejemplo es el modelo ECOSAR que contiene numerosos SAR desarrollados con datos de Información Comercial Confidencial.

En 1995, la OPPT comenzó a trabajar con la industria química para ayudar a transferir los métodos de cribado químico a los desarrolladores de nuevos productos químicos. OPPT desarrolló asociaciones de Prevención de la Contaminación con muchos sectores de la industria para ayudarlos a explorar la aplicación de los métodos del marco de Prevención de la Contaminación a su diseño y prácticas de manejo de químicos. Se propuso un proyecto

llamado Excelencia en Liderazgo (XL) basado en el marco de referencia de la Prevención de la Contaminación.

La EPA ofreció cierta flexibilidad en sus regulaciones para alentar a las empresas, comunidades y otros participantes del proyecto para desarrollar y probar alternativas más limpias, más baratas e inteligentes que puedan producir resultados ambientales superiores a los que se habrían logrado con la normativa vigente y políticas.

Dos empresas que utilizaron los métodos de Prevención de la Contaminación pudieron mejorar el desempeño ambiental de los productos al tiempo que reducían los costos, ahorrando tiempo, mejorando la ventaja competitiva y disminuyendo la responsabilidad potencial.

A partir del éxito del proyecto Excelencia en Liderazgo (XL) basado en el marco de Prevención de la Contaminación. La EPA optó por “ampliarlo” y ofrecerlo en todo el país. Como resultado, desde 2002 se lanzó la Iniciativa “Futuro Sostenible”, y cualquier empresa puede ser candidato para implementar este programa.

La intención de Futuro Sostenible es ofrecer a la industria química y a otras partes interesadas un camino hacia productos y procesos químicos más seguros.

Futuro Sostenible está ayudando a la EPA a lograr el objetivo de hacer públicos sus modelos y métodos predictivos disponibles. Otro beneficio importante para la EPA es capturar y transferir una gran cantidad de conocimientos químicos y tecnología predictiva de vanguardia al público para promover la prevención de la contaminación y la seguridad química. Además de que los participantes de Futuro Sostenible han experimentado muchos beneficios en cuanto al desarrollo de sus empresas y aplicación de la normatividad.

CAPÍTULO II. METODOLOGÍA

2.1 EPI Suite™

Para el análisis del Triclosán realizado en este trabajo, se utilizó la versión 4.11 (v4.11) de la Interfaz del programa de estimación (EPI Suite™), esta versión es la última modificación del programa y las nuevas funciones realizadas en noviembre de 2012.

Según la Agencia de Protección Ambiental de los Estados Unidos (EPA, 2020), los modelos que conforman EPI Suite™, contienen información detallada que permite hacer predicciones de destino ambiental. Se ingresa la información, una vez en EPI Suite se estiman los siguientes modelos de destino ambiental para el Triclosán: modelo de volatilización, modelo de porcentaje de remoción en plantas de tratamiento biológico de aguas residuales y modelo de fugacidad.

Para poder utilizar cualquiera de los programas de este software, se indica en la pantalla principal, el número de identificación único para cada compuesto (No. CAS), la Especificación Lineal de Entrada Molecular Simplificada (SMILES) o el nombre químico del compuesto con el cual se trabajará. 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, a la que también se accede desde la pantalla principal de EPI Suite, es una fuente útil de valores medidos para diferentes parámetros, así como otros programas de estimación dentro de esta suite.

Una vez ingresados todos los valores necesarios para cada modelo a utilizar, el programa muestra los resultados de forma completa o en resumen según lo indique el usuario.

2.2 Fundamento del modelo de estimación de Volatilización

El Programa de Volatilización en Agua “WVOLWIN” de la EPI Suite estima las vidas medias de volatilización en un río y un lago modelo. La metodología del programa se basa en una adaptación del método recomendado en el "Manual de métodos de estimación de propiedades químicas" de Thomas (1990).

2.2.1 Pasos básicos del calculo

1) Registro de la Constante de la Ley de Henry.

La constante de la ley de Henry (HLC) se puede definir como la relación entre la concentración de un compuesto en la fase gaseosa y la concentración del compuesto en una solución acuosa diluida en equilibrio. Esta relación o coeficiente de partición generalmente se conoce como HLC.

En EPI Suite, el modelo de volatilización en agua registra la constante de la ley de Henry (HLC) mediante otros programas. El valor de esta HLC esta medida en atm m³/mole, las ecuaciones utilizadas para calcular la tasa de volatilización, requieren que este valor sea adimensional.

Para convertir esta constante a un valor adimensional, se aplica la ecuación 2:

$$H = \frac{H'}{RT} \text{ [Ec. 2]}$$

H': HLC con unidades,

R: constante de los gases universales (0.00008206 atm m³/mole) y

T: temperatura en grados (K).

El modelo de volatilización del agua calcula la tasa de volatilización a 25 °C (298K) por lo tanto, el valor RT es 0.02446.

2) Cálculo del coeficiente de fase líquida (KPL).

El modelo de volatilización en agua calcula el KPL con las siguientes ecuaciones, tomadas del método de Thomas (1990):

Si el peso molecular (MW) es menor que 25:

$$KPL = (20) \left(\sqrt{\frac{44}{MW}} \right) (cm/hr) \text{ [Ec. 3]}$$

Si el peso molecular (MW) es mayor o igual a 25 y la velocidad del viento es menor que 1.9 m/s:

$$KPL = (23.51) \left(\frac{VC^{0.969}}{Z^{0.973}} \right) \left(\sqrt{\frac{32}{MW}} \right) (cm/hr) \text{ [Ec. 4]}$$

Si el peso molecular (MW) es mayor o igual a 25 y la velocidad del viento es mayor a 1.9 m/s:

$$KPL = (23.51) \left(\frac{VC^{0.969}}{Z^{0.973}} \right) \left(\sqrt{\frac{32}{MW}} \right) (e^{0.526(VW-1.9)}) (cm/hr) \text{ [Ec. 5]}$$

Donde:

MW: peso molecular

VC: velocidad de la corriente (m/s)

VW: velocidad del viento (m/s)

Z: profundidad del agua (m)

3) Calcular el coeficiente de fase gaseosa (KPG):

El Modelo de Volatilización del Agua calcula el KPG de la siguiente manera:

Si el peso molecular (MW) es inferior a 25:

$$KPG = (300) \left(\sqrt{\frac{18}{MW}} \right) (cm/hr) \text{ [Ec. 6]}$$

Si el peso molecular (MW) es mayor o igual a 25 y la velocidad del viento es menor que 1.9 m/s:

$$KPG = (1137.5) (VW + VC) \left(\sqrt{\frac{18}{MW}} \right) (cm/hr) \text{ [Ec. 7]}$$

4) Calcular el coeficiente de transferencia de masa en fase líquida global (KL).

El Modelo de Volatilización del Agua calcula el KL de la siguiente manera:

$$KL = \frac{(H)(KPG)(KPL)}{(H)(KPG) + KPL} \text{ [Ec. 8]}$$

Donde:

H: HLC adimensional

5) Calcula la vida media usando KL y la profundidad del agua en cm (Z).

$$\text{Volatilization Half - Life} = \text{Ln}(2) \left(\frac{Z}{KL} \right) = (0.6931) \left(\frac{Z}{KL} \right) (\text{hr}) [\text{Ec. 9}]$$

2.2.2 Método Group

HENRYWIN estima la constante de la ley de Henry de los compuestos orgánicos a 25 ° C utilizando la metodología descrita originalmente por Hine y Mookerjee (1975). Para el método Group, HENRYWIN usa los valores de contribución de grupo originales según lo derivado por Hine y Mookerjee (1975). No se realizó una nueva regresión lineal múltiple utilizando datos experimentales más recientes para actualizar estos valores o derivar nuevos valores; sin embargo, se agregan valores de contribución de grupo adicionales a HENRYWIN de forma individual que se encuentran en la biblioteca de datos de EPI suite.

Cada compuesto se divide en una suma de los grupos individuales que lo componen. Para obtener valores, la suma se establece igual al coeficiente de partición log agua-aire (por sus siglas en inglés LWAPC) conocido del compuesto.

En la mayoría de los casos, se considera que un grupo contiene un átomo polivalente y los átomos monovalentes unidos a él, pero el grupo se caracteriza por la naturaleza de los átomos a los que está unido, así como por los que contiene.

Por ejemplo, un grupo metileno unido a dos átomos de oxígeno es diferente de un grupo metileno unido a un átomo de oxígeno y un átomo de carbono.

2.2.3 Método Bond

La metodología de Bond original se actualizó y amplió como se describe en Meylan y Howard (1991). Cada compuesto se divide en una suma de los enlaces individuales que lo componen. La suma se establece igual al Coeficiente de partición log agua-aire (por sus siglas en inglés LWAPC) conocido del compuesto.

Por ejemplo, el etanol se compone de un enlace C-C, cinco enlaces C-H, un enlace C-O y un enlace O-H. Cada enlace diferente se asigna a una variable única en una ecuación lineal. Todos los compuestos utilizados para derivar los valores de contribución de Bond se tratan de manera similar. Los grupos funcionales seleccionados, incluidos los grupos ciano (CN),

carbonilo (CO) y nitro (NO₂), se tratan como átomos y no se dividen en enlaces individuales. Los LWAPC conocidos utilizados en las ecuaciones son LWAPC medidos experimentalmente. Cuando no se dispone de un LWAPC medido, el LWAPC conocido se deriva de la relación presión de vapor y solubilidad en agua (VP-W_{Sol}) medida.

Todas las ecuaciones lineales se someten a un tratamiento de mínimos cuadrados (una regresión lineal múltiple) para determinar el mejor ajuste para cada valor de contribución de Bond.

Tanto el método de Group como el método de Bond son susceptibles de estimaciones que dan como resultado "fragmentos faltantes". El método Group se encuentra frecuentemente con un problema de "fragmentos faltantes" para diversas estructuras que contienen fragmentos de grupo no disponibles en la biblioteca de fragmentos de Group; por lo tanto, la estimación es "incompleta".

El método Bond (que muy pocas veces tiene "fragmentos faltantes") se convierte en la estimación preferida por defecto.

Siempre que el método Bond contenga algún "factor de corrección" además de los fragmentos generales, se prefiere este método; de lo contrario, se prefiere la estimación del método de Group.

2.2.4 Criterios para interpretación de resultados

a) Constante de Ley de Henry

La constante de la ley de Henry (HLC) de un químico puede dar una idea de los procesos de control de la tasa de evaporación.

La Tabla 7 presenta algunas generalizaciones sobre la volatilidad de los productos químicos que se encuentran dentro de los rangos específicos del valor de H (Thomas, 1990).

Tabla 7: Generalizaciones para la volatilidad de productos químicos dentro de los rangos específicos de HLC.

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

Fuente: EPA (2021). Programas de estimación Interface EPI Suite “WVOLLWIN”.

b) Solubilidad

La solubilidad se define como la concentración máxima de un contaminante en equilibrio que se detectaría en agua. Cuanto mayor es la solubilidad en agua, mayor es la tendencia a permanecer disuelto y, por lo tanto, menor es la probabilidad de volatilizarse del agua y permanecer en el medio acuático. Por otro lado, las sustancias poco solubles en agua se

volatilizan más fácilmente en el agua, tienden a precipitarse, a adsorberse en el suelo y a bioconcentrarse en organismos acuáticos. (López & Barceló, n.d)

La Tabla 8 agrupa los contaminantes en función de su solubilidad en agua.

Tabla 8: Solubilidad en agua

Valores de S (mg/L)	Solubilidad
$0,2 < S < 1$	Poco soluble o insoluble
$1 < S < 500$	Soluble
$500 < S < 850$	Muy soluble

Fuente: López & Barceló, n.d

2.2.5 Modelo de Volatilización en agua (ríos y lagos) – WVOLWIN™

1. La pantalla de entrada de la interfaz de EPI Suite incluye seis campos de entrada que se utilizarán exclusivamente por el Programa de Volatilización en Agua, para un río y un lago modelo, los valores de profundidad del agua (m), la velocidad de la corriente de agua (m/s) y la velocidad del viento (m/s), están establecidos respectivamente por el programa WVOLWIN, como se muestra en la Figura 3. El modelo no funciona sin estos valores.

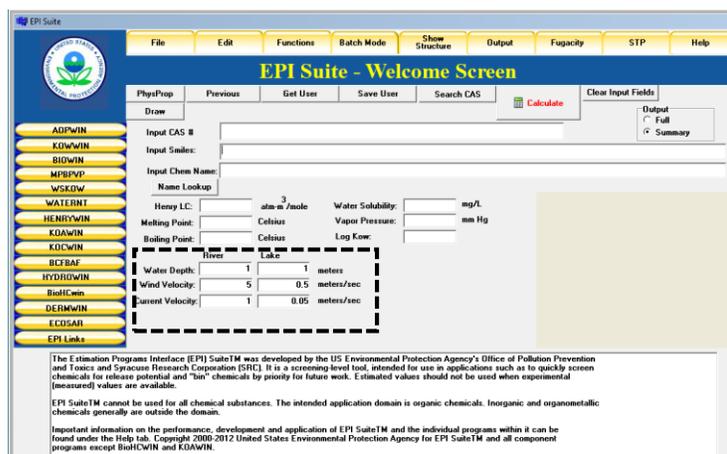


Figura 3: Pantalla de entrada de EPI Suite, para el programa de volatilización.

2. El programa de interfaz EPI ejecuta el programa WVOLWIN transfiriendo el Peso Molecular, la Constante de la Ley de Henry y los diversos parámetros de volatilización a WVOLWIN. Los valores de los diferentes parámetros necesarios para este cálculo, se

obtienen de la base de datos PhysProp o ya están establecidos por el programa, por ejemplo, las características de los cuerpos de agua. Una vez establecidos estos valores el programa entonces pasa las estimaciones de volatilización de vuelta a la interfaz EPI.

3. La propiedad física controladora que impulsa el modelo es la constante de la ley de Henry (HLC). La interfaz de EPI Suite y los programas individuales, pueden generar varios valores de HLC (tanto experimentales como estimados).

- 3.1. El usuario puede ingresar el valor de HLC, en el campo de entrada "Henry LC".

- 3.2. En ausencia de valores introducidos, se tomarán de una base de datos. El programa HENRYWIN, es capaz de pasar tres valores de HLC al modelo.

- 3.2.1 **El método Group:** se encuentra frecuentemente con un problema de "fragmentos faltantes".

- 3.2.2 **El método Bond:** Es la estimación preferida por defecto.

- 3.2.3 Cálculo de HLC a partir de datos y estimaciones de la Presión de Vapor (PV de MPBPWIN) y la solubilidad en agua (W_{Sol} de WSKOWWIN) disponibles.

4. Una vez que se tengan todos los datos necesarios, se ejecuta el programa y se muestran los resultados estimados.

2.3 Fundamento del modelo de estimación del Porcentaje de Remoción en Plantas de Tratamiento Bilógico de Agua Residuales.

El modelo STP se basa en principios de fugacidad, predice el destino de una sustancia química orgánica presente en el afluente a medida que se somete a eliminación por evaporación, biodegradación u otros procesos de degradación, sorción al lodo y pérdida en el efluente final en un entorno evaluativo, este entorno es una Planta de Tratamiento de Aguas Residuales (PTAR) que utiliza tratamiento secundario de lodos activados, modelo que funciona a 25°C.

Es útil para establecer las características generales del comportamiento de un químico en una planta de tratamiento de aguas residuales con lodos activados. No está destinado a proporcionar una simulación precisa del destino químico en una planta específica.

El programa STPWIN utiliza una combinación de parámetros predeterminados y parámetros de entrada que pueden ser definidos o estimados por otros programas dentro de EPI Suite y a continuación se describen.

a) Valores de entrada de vida media

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

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

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

Las opciones disponibles para trabajar las vidas medias del modelo STP son las siguientes, la primera opción es la predeterminada por el modelo.

(1) 10,000 horas para el clarificador primario, recipiente de aireación y tanque de sedimentación. Estos valores se utilizan para indicar que no hay biodegradación, lo que normalmente se considera un escenario del "peor de los casos".

(2) Estimaciones basadas en BIOWIN. Las vidas medias se asignan según un método de la EPA que utiliza BIOWIN. Este método se proporciona en la opción "BIOWIN Half-life relationships" de la ventana Parámetros de vida media de STP.

b) Propiedades predeterminadas del sistema de tratamiento

STPWIN limita el acceso del usuario a muchos parámetros del modelo STP. Por ejemplo, el usuario no puede modificar los parámetros que definen la configuración de la planta de tratamiento de aguas residuales. Las propiedades de la planta de tratamiento incluyen lo siguiente:

- Número de tanques
- Flujo afluente y concentración de Sólidos Volátiles en Suspensión (VSS)
- Coeficientes de transferencia de masa en fase líquida y gaseosa para cada tanque

Para estos parámetros, STPWIN se basa únicamente en los valores predeterminados determinados por el modelo de Mackay (1995). La Tabla 9 resume las condiciones del sistema de tratamiento predeterminado.

Tabla 9: Propiedades del sistema predeterminadas para STPWIN

Parámetro	Tanque 1	Tanque 2	Tanque 3
Área (m)	266.7	800	727.3
Profundidad (m ²)	3.8	10	3.8
Concentración VSS (g/m ³)	50 000	-	5 500
Biomasa de VSS (fracción)	0.005	0.0025	0.00055
Concentración de VSS de flujo de salida (g/m ³)	80.2	2500	15
Tasa de aireación VSS (m ³ /hr)	--	8960	--
Fracción de flujo afluente reciclada	--	--	0.8
Fracción de flujo afluente eliminada	0.0024	--	0.015

Fuente: EPA (2021). Programas de estimación Interface EPI Suite "STPWIN".

Otras propiedades del sistema: caudal total afluente: 1000 m³/hr; concentración VSS del afluente: 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.

c) Método EPA para vidas medias de biodegradación STP

Las vidas medias para la biodegradación de una sustancia química en el tratamiento de aguas residuales se determinan utilizando el modelo de encuesta de expertos en biodegradación final del programa de estimación BIOWIN3 de acuerdo con Boethling et al. (1994), en combinación con el modelo lineal del Ministerio de Industria y Comercio Internacional (MITI, BIOWIN5) de Tunkel et al. (2000). BIOWIN3 proporciona una indicación de la tasa de biodegradación ambiental de una sustancia química en términos relativos, como horas, horas a días, días, días a semanas, etc. Los términos representan la cantidad aproximada de tiempo necesario para que la degradación sea "completa". BIOWIN5 proporciona la probabilidad estimada de que una sustancia pase la prueba de fácil biodegradabilidad para el Ministerio de Industria y Comercio Internacional (MITI).

Estas salidas no pueden ser utilizadas directamente por el modelo STP. En cambio, las vidas medias de Bio P, Bio A y Bio S se asignan a la salida del modelo como se muestra en la Tabla 10:

Tabla 10: Relación BLOWIN de vidas medias.

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

Fuente: EPA (2021). Programas de estimación Interface EPI Suite "STPWIN".

La proporción predeterminada de 10: 1: 1 para Bio P: Bio A: Bio S, es la recomendada por Clark et al. (1995); sin embargo, el usuario puede ingresar las semividas que desee, por lo que no es necesario establecer la relación en el valor predeterminado.

El método preliminar de la EPA se desarrolló en un ejercicio de calibración ejecutando repetidamente EPI Suite para un conjunto de 33 sustancias químicas, provenientes de aguas residuales domésticas. El conjunto completo de 33 sustancias químicas representó un conjunto muy diverso de estructuras químicas con una amplia gama de propiedades químicas.

El objetivo de asignar vidas medias basadas en la salida de BLOWIN es coincidir mejor con el porcentaje total medido de eliminación. Para todos los productos químicos, los valores de propiedad medidos de PHYSPROP se recuperan y utilizan en los cálculos; Además, la relación Bio P: Bio A: Bio S B, se establece como el valor predeterminado de 10: 1: 1 (excepto para la clase de vida media más lenta).

El método de borrador de la EPA agrega dos clases de vida media Bio A; es decir, 100 horas para "biodegradación muy lenta" y el sistema predeterminado para sustancias "recalcitrantes", que ya se estableció en 10, 000 horas para Bio P, Bio A y Bio S. La clase de vida media más corta, Bio A:1 hora (" biodegradación rápida "), se asigna en función de la salida de BLOWIN3 y BLOWIN5 exactamente de la misma manera que para la predicción de la biodegradabilidad inmediata. Por lo tanto, también se pronosticará que las sustancias que se predice que pasarán una prueba de biodegradación fácil se biodegradarán rápidamente en

el tratamiento. Para sustancias sin mecanismo de eliminación que no sea la biodegradación, esto significa que la eliminación máxima prevista está cerca del valor predeterminado que usa la EPA para sustancias que pasan una prueba de fácil biodegradación: 90%. Se debe tener en cuenta que el porcentaje total de eliminación previsto para una sustancia determinada depende no solo de la tasa de biodegradación, sino también de las propiedades químicas, para poder alcanzar el 100%. Sin embargo, dadas las muchas incertidumbres en este tipo de modelado, la EPA recomienda que se establezca el 95% como el valor máximo derivado del modelo.

2.3.1 Porcentaje de remoción en Planta de Tratamiento de Agua Residual Biológico-STPWIN™

1. STPWIN, utiliza una combinación de parámetros predeterminados y parámetros de entrada que pueden ser definidos por el usuario o estimados por otros programas dentro de EPI Suite.
2. Las variables que se utilizan son Constante de Ley Henry, punto de fusión, punto de ebullición, solubilidad en agua, presión de vapor y Log Kow.
3. Si no se ingresan datos por el usuario en la pantalla principal, el programa busca preferentemente bases de datos de valores medidos que forman parte de los programas KOWWIN (para log Kow) y HENRYWIN (para la constante de la Ley de Henry).
4. La configuración de la planta de tratamiento ya está predeterminada por el modelo (como número de tanques, profundidad, flujo, etc.).
5. Para acceder a los parámetros de vida media de STP, se ingresa por medio de la pestaña STP en la parte superior de la pantalla de bienvenida de EPI Suite. Aparecerá la siguiente ventana (Figura 4), de valores de entrada de vida media:

STP Half-Life Parameters

A)

Use 10,000 hr default values

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

Use Half-lives entered below (in hours):

Bio P (primary clarifier):

Bio A (aeration vessel):

Bio S (settling tank):

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

B) BIOWIN Half-Life Relationships

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

Accept Cancel

Figura 4: Pantalla de parámetros de vida media. A). Opciones para el método de estimación del modelo. B) Relaciones de vida media para las estimaciones en BIOWIN.

- En la sección de opciones del método de estimación (Figura 4; inciso A), se elige la opción “Use BIOWIN output and EPA draft method for assigning half lives”, ya que esta permite calcular el porcentaje de remoción y biodegradación del compuesto en una planta de tratamiento de agua residual con lodos activados. Se utiliza el programa BIOWIN para hacer estas estimaciones.
- Las vidas medias de Bio P, Bio A y Bio S, están asignadas por el método EPA a la salida del modelo de acuerdo a la configuración mostrada en la Figura 4; inciso B.
- Una vez que se tengan todos los datos necesarios, se ejecutará el programa y se mostrarán los resultados estimados.

2.4 Fundamento del modelo de estimación de Fugacidad

El modelo de fugacidad en EPI Suite es un modelo de destino multimedia de nivel III que utiliza parámetros ambientales idénticos a los utilizados en Mackay et al. (1992). El entorno del modelo consta de cuatro compartimentos principales: aire, sedimentos, agua y suelo. Al mismo tiempo cuenta con tres subcompartimentos: fase de aerosol, sólidos en suspensión y una fase de biota, dentro de los compartimentos principales específicos.

Se asume una temperatura fija de 25 °C. y se modela el transporte de masa entre los compartimentos a través de volatilización, difusión, deposición y escorrentía. Un diagrama conceptual de este modelo y sus vías de transporte masivo se ilustra en la Figura 5.

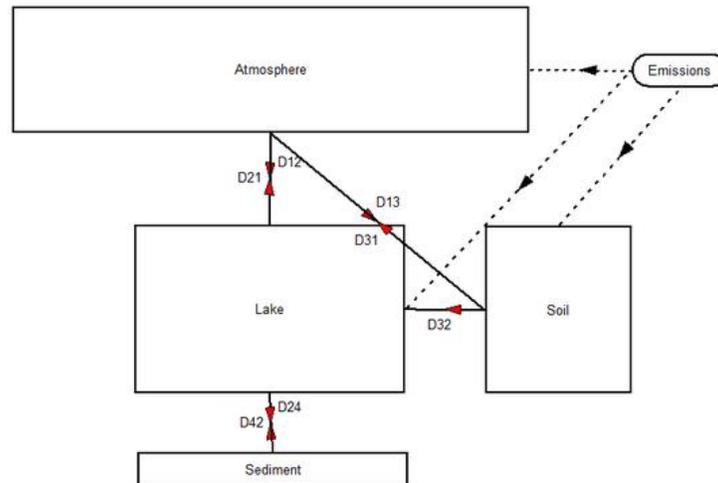


Figura 5: Diagrama conceptual del modelo de fugacidad de destino multimedia en EPI Suite.

El programa LEV3EPI estudia la partición de sustancias químicas, en un entorno evaluativo, entre los cuatro compartimentos antes mencionados, usando una combinación de parámetros predeterminados y varios parámetros de entrada que incluyen, valores de vida media del contaminante, valores de emisiones, valores de advección y valores de coeficiente de adsorción de carbono orgánico (K_{oc}) del suelo.

Un modelo de nivel III asume condiciones de estado estacionario, sin equilibrio. Las condiciones de estado estacionario significan que el cambio en la concentración de una sustancia química en cada compartimento (i) con respecto al tiempo finalmente se acerca a cero. El modelo no supone que exista un equilibrio común de fugacidad entre las fases, por lo que, si se emite una sustancia química en un compartimento, puede dividirse en los otros compartimentos.

La pérdida de sustancias químicas se produce a través de dos procesos:

- a) Reacción, que es la degradación biótica o abiótica de la sustancia química que se calcula utilizando las vidas medias especificadas por el usuario o calculadas por el modelo de la sustancia química en cada uno de los cuatro compartimentos principales y
- b) Advección, que es la eliminación de una sustancia química de un compartimento a través de pérdidas distintas de la degradación (reacción). La tasa de advección en un

compartimento dado se determina mediante un caudal (m³/hora) a través de la ecuación 10:

$$Tasa\ de\ Advección = \frac{Vol.del\ compartimento}{Tempo\ de\ Advección} [Ec. 10]$$

Se consideran procesos de advección para los compartimentos de aire, agua y sedimentos.

Para fines comparativos entre los diferentes compartimentos, se toma como referencia los valores recomendados en la Tabla 11, que se considera representan los valores promedios a nivel mundial de las dimensiones de cada compartimento para el modelo de nivel III. El usuario no puede modificar estos valores

Tabla 11: Propiedades y dimensiones de los compartimentos del modelo de destino multimedia.

	Aire	Agua	Suelo	Sedimentos
Volumen (m³)	1x10 ¹⁴	2x10 ¹¹	1.8x10 ¹⁰	5x10 ⁸
Profundad (m)	1000	20	0.2	0.05
Área (m²)	1x10 ¹¹	1x10 ¹⁰	9x10 ¹⁰	1x10 ¹⁰

Fuente: EPA (2021). Programas de estimación Interface EPI Suite “LEV3EPI”.

La Tabla 12 resume otras propiedades ambientales fijas para el modelo de fugacidad de nivel III.

Tabla 12: Valores predeterminados de fracción de volumen y densidad del modelo de destino multimedia.

	Aire	Agua	Suelo	Sedimentos
Fracción de volumen Aerosol	2.0E-11			
Partículas Suspensas		5.0E-6		
Pez		1.0E-6		
Aire			0.2	
Agua			0.3	0.8
Sólidos			0.5	0.2
Densidad (kg/m ³)				
Granel	1.19	1000	1500	1280
Aire puro	1.19			
Aerosol	2000			
Líquido		1000		
Partículas Suspensas		1500		

Pez	1000		
Aire		1.19	
Agua		1000	100
Sólidos		2400	2400

Fuente: EPA (2021). Programas de estimación Interface EPI Suite "LEV3EPI".

1) Procesos de transporte en el modelo

A continuación, se describen los algoritmos necesarios para calcular las rutas de transporte entre los cuatro compartimentos principales del modelo. Estas ecuaciones ilustran los supuestos importantes del modelo que gobiernan el transporte químico con referencia al diagrama conceptual del modelo de fugacidad de destino multimedia representado en la Figura 5.

Transporte aire-agua (D12)

El modelo asume que cuatro procesos gobiernan el transporte de aire a agua y son, difusión, disolución en lluvia (químico en fase de vapor) y deposición húmeda y seca para compuestos en fase particulada. Para la difusión se adopta un enfoque de dos películas y viene dado por la ecuación 11:

$$D_{VW} = \frac{A_w}{\left(\frac{1}{U_1} * Z_1\right) + \left(\frac{1}{U_2} * Z_2\right)} \quad [Ec. 11]$$

Donde:

A_w : área del cuerpo de agua

U_1 : Coeficiente de Transferencia de Masa (MTC) en el lado aire-agua y U_2 es el MTC del lado agua-aire.

Z_1 y Z_2 : capacidades de fugacidad en aire (excluidos aerosoles) y agua (excluidos sólidos en suspensión y biota), respectivamente.

Estas y otras capacidades de fugacidad se definen en la Tabla 13. Las capacidades de fugacidad subcompartimental se utilizan para desarrollar la capacidad de fugacidad a granel para cada uno de los cuatro compartimentos principales.

Tabla 13: Definición de capacidades de fugacidad.

$$\begin{aligned}
 Z_1 &= 1/RT \\
 Z_2 &= 1/H \\
 Z_3 &= [(Z_2) (\rho_3) (f_3) (Koc)]/1000 \\
 Z_4 &= [(Z_2) (\rho_4) (f_4) (Koc)]/1000 \\
 Z_5 &= [(Z_2) (\rho_5) (f_5) (Koc)]/1000 \\
 Z_6 &= [(Z_2) (\rho_6)(L) (Kow)]/1000 \\
 Z_7 &= [(Z_1) (6x10^6)]/P_{sl} \\
 Z_{air} &= [Z_1 + (2x10^{-11})(Z_7)] \\
 Z_{water} &= [Z_2 + (5x10^{-6})(Z_5) + 1x10^{-6}(Z_6)] \\
 Z_{soil} &= [0.2 (Z_1) + 0.3(Z_2) + 0.5(Z_3)] \\
 Z_{sediment} &= [0.8(Z_2) + 0.24(Z_4)]
 \end{aligned}$$

Fuente: EPA (2021). Programas de estimación Interface EPI Suite "LEV3EPI".

Donde:

- R: constante de los gases
- T: temperatura
- H: constante de 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 agua-octanol
- P_{sl} : presión de vapor refrigerada por líquido

La disolución por lluvia de los productos químicos en fase de vapor se calcula a partir de la tasa de lluvia (U_3) que tiene unidades de metros/año y el proceso de transporte viene dado por la ecuación 12:

$$D_{RW} = [(U_3) (A_W)(Z_2)] \quad [Ec. 12]$$

Las deposiciones húmedas y secas dependen de la velocidad de deposición del Coeficiente de Transferencia de Masa (MTC) del aerosol (U_4) y están dadas por la ecuación 13:

$$D_{QW} = [(U_4) (A_W)(Z_7)] \quad [Ec. 13]$$

El transporte total del aire al agua es la suma de las ecuaciones 11-13.

$$D_{12} = [D_{VW} + D_{RW} + D_{QW}] \quad [Ec. 14]$$

Para el transporte de agua a aire, la volatilización es el único proceso considerado y es equivalente a la inversa de la difusión por absorción.

$$D_{21} = D_{VW} \quad [Ec. 15]$$

Transporte aire-suelo (D13)

Los procesos de transporte que gobiernan el flujo de productos químicos hacia y desde el compartimento del suelo al compartimento de aire son similares a los procesos de transporte de aire a agua. El transporte difusivo hacia y desde el suelo viene dado por la ecuación 16:

$$D_{VS} = \frac{1}{\left(\frac{1}{D_s} + 1\right) / (D_w + D_A)} \quad [Ec. 16]$$

$$D_s = U_7 A_s Z_1 \quad [Ec. 17]$$

$$D_w = U_6 A_s Z_2 \quad [Ec. 18]$$

$$D_A = U_5 A_s Z_1 \quad [Ec. 19]$$

Donde:

A_s : área horizontal de la capa de suelo,

U_5 , U_6 y U_7 : son los Coeficientes de Transferencia de Masa (MTC) para difusión suelo-aire, suelo-agua y suelo-aire, respectivamente.

El transporte de una sustancia química a través de la disolución por lluvia de compuestos en fase de vapor se describe mediante la ecuación 20:

$$D_{RS} = U_3 A_s Z_7 \quad [Ec. 20]$$

La deposición húmeda y seca de compuestos en fase particulada en el compartimento del suelo viene dada por la ecuación 21:

$$D_{QS} = U_4 A_s Z_7 \quad [Ec. 21]$$

El transporte total es la suma de estos procesos individuales:

$$D_{13} = D_{VS} + D_{RS} + D_{QS} \quad [Ec. 22]$$

Para el transporte desde el suelo al aire, la volatilización es el único proceso considerado y es equivalente a la inversa de la difusión por absorción.

$$D_{31} = D_{VS} \quad [Ec. 23]$$

Transporte agua-sedimento (D24)

La transferencia de agua a sedimentos se modela mediante dos procesos, difusión y deposición. La difusión de una sustancia química desde la columna de agua al sedimento se caracteriza por un MTC (U_8) equivalente a la difusividad molecular dividida por la longitud de la trayectoria. El caudal de deposición volumétrica en el modelo de fugacidad genérico desarrollado por Mackay et al. (1992) se supone que ocurre a 5000 m³/h, que se utiliza para calcular el MTC (U_9). La transferencia total viene dada por la ecuación 24:

$$D_{24} = U_8 A_W Z_2 + U_9 A_W Z_5 \quad [Ec. 24]$$

Transporte sedimento-agua (D42)

El movimiento del sedimento al agua tiene en cuenta la tasa de resuspensión del sedimento con el MTC apropiado (U_{10}) y está representado en la ecuación 25.

$$D_{42} = U_8 A_W Z_2 + U_{10} A_W Z_4 \quad [Ec. 25]$$

Transporte suelo-agua (D32)

La escorrentía y la erosión de una sustancia química del suelo al agua se describe en la ecuación 26:

$$D_{32} = U_{11} A_W Z_2 + U_{11} A_W Z_3 \quad [Ec. 26]$$

Donde:

U_{11} y U_{12} son los Coeficientes de Transferencia de Masa (MTC), para la escorrentía suelo-agua y suelo-sólidos, respectivamente.

Los valores de cada MTC utilizados en el modelo se proporcionan en la Tabla 14. El usuario no puede cambiar estos valores.

Tabla 14: 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 del 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}

Fuente: EPA (2021). Programas de estimación Interface EPI Suite "LEV3EPI". Valores obtenidos de Mackay et al. 1992

2. Procesos de degradación y advección en el modelo

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

$$DR_1 = V_1 Z_{\text{air}} k_{\text{air}} \quad [\text{Ec. 27}]$$

$$DR_2 = V_2 Z_{\text{water}} k_{\text{water}} \quad [\text{Ec. 28}]$$

$$DR_3 = V_3 Z_{\text{soil}} k_{\text{soil}} \quad [\text{Ec. 29}]$$

$$DR_4 = V_4 Z_{\text{sediment}} k_{\text{sediment}} \quad [\text{Ec. 30}]$$

Donde: cada k es una constante de velocidad de primer orden, V_1 , V_2 , V_3 y V_4 representan los volúmenes del compartimento de aire, agua, suelo y sedimentos, respectivamente.

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

3. Ecuaciones de balance de masa

Se asume que no hay emisiones directas al compartimiento de sedimentos y el compartimiento del suelo no tiene pérdidas por advección. Desarrollar el 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 masa:

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

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

$$\frac{dC_3}{dT} = V_3 Z_3 \frac{df_3}{dT} = E_3 + f_1 D_{13} - f_3 D_{31} - f_3 D_{32} - f_3 DR_3 \quad [Ec. 33]$$

$$\frac{dC_4}{dT} = V_4 Z_4 \frac{df_4}{dT} = f_2 D_{24} - f_4 D_{42} - f_4 DR_4 - f_4 DA_4 \quad [Ec. 34]$$

Donde:

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

f_i : es la fugacidad en el i -ésimo compartimento y

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

Suponiendo condiciones de estado estacionario en las que el cambio en la concentración de la sustancia química en cada compartimento con respecto al tiempo se acerca a cero (el lado izquierdo de las ecuaciones 31-34 se acerca a cero), es posible resolver la fugacidad en cada compartimento. Estas soluciones son:

$$f_1 = \frac{(J_1 + f_2 J_2)}{J_3} \quad [Ec. 35]$$

$$f_2 = \frac{[E_2 + (J_1 J_4 / J_3) + (E_3 D_{32} / DT_3)]}{[DT_2 - (J_2 J_4 / J_3) - (D_{24} D_{42} / DT_4)]} \quad [Ec. 36]$$

$$f_3 = \frac{(E_3 + f_2 D_{13})}{DT_3} \quad [Ec. 37]$$

$$f_4 = \frac{f_2 D_{24}}{DT_4} \quad [Ec. 38]$$

En este conjunto de ecuaciones, los valores de DT_i vienen dados por:

$$DT_1 = DR_1 + DA_1 + D_{12} + D_{13} \text{ [Ec. 39]}$$

$$DT_2 = DR_2 + DA_2 + D_{21} + D_{23} + D_{24} \text{ [Ec. 40]}$$

$$DT_3 = DR_3 + D_{31} + D_{32} + D_{32} \text{ [Ec. 41]}$$

$$DT_4 = DR_4 + DA_4 + D_{42} \text{ [Ec. 42]}$$

y los valores de J_i están representados por:

$$J_1 = \frac{E_1}{DT_1} + \frac{E_3 D_{31}}{DT_3 DT_1} \text{ [Ec. 43]}$$

$$J_2 = \frac{D_{21}}{DT_1} \text{ [Ec. 44]}$$

$$J_3 = 1 - \frac{D_{31} D_{13}}{DT_1 DT_3} \text{ [Ec. 45]}$$

$$J_4 = D_{12} - \frac{D_{32} D_{13}}{DT_3} \text{ [Ec. 46]}$$

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

2.4.1 Criterios para interpretación de resultados

Los compuestos de baja polaridad presentan elevada lipofilidad y son hidrofóbicos, lo que hace que tengan una elevada retención en la materia orgánica, sedimentos y/o biota.

Por otro lado, los compuestos de elevada polaridad presentan baja lipofilidad y son hidrofílicos, lo que indica que el contaminante no se retiene en la materia orgánica y tiende a moverse tanto en las aguas superficiales como subterráneas. (López M, Barceló D, n.d)

La Tabla 15 interpreta los valores del coeficiente de reparto octanol-agua ($\log K_{ow}$) con respecto a su polaridad.

Tabla 15: Clasificación de polaridad según el valor de Log Kow de un compuesto.

Valores de log Kow	Polaridad
Log Kow < 1,5	Compuesto polar
4 > log Kow > 1,5	Compuesto moderadamente polar
Log Kow > 4	Compuesto no polar

Fuente: López M, Barceló D, n.d.

2.4.2 Modelo de Fugacidad multimedia de nivel III de Triclosán -LEV3EPI™

- Las entradas del modelo de fugacidad se seleccionan desde el menú principal de la interfaz EPI como se muestra en la Figura 6:

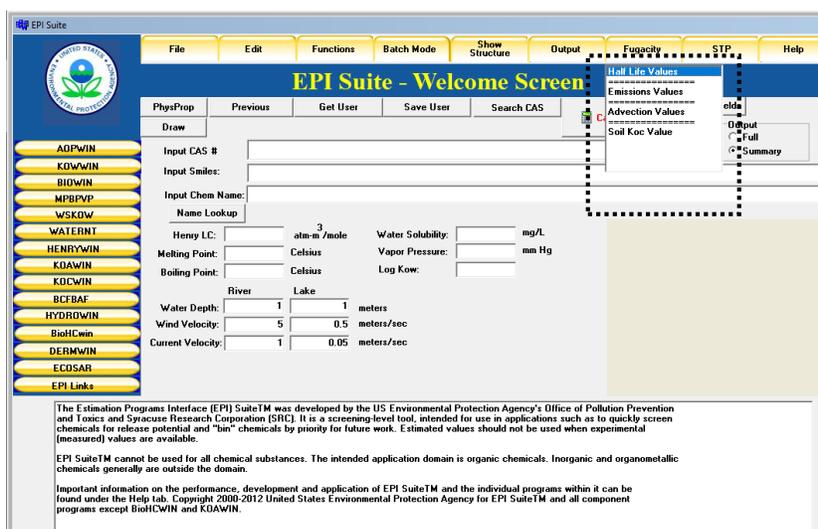


Figura 6: Pantalla de entrada de EPI Suite, para los parámetros de Fugacidad.

- En el recuadro “Fugacity”, se despliega una ventana con los parámetros que se utilizaran para trabajar este modelo, “Half Live Values, Emissions Values”, “Advection Values” y “Soil Koc Value” (Figura 6, recuadro punteado).
- Half Life Values.
 - Se obtendrán los valores de vidas medias, a partir de la siguiente pantalla (Figura 7).

Figura 7: Pantalla de parámetros necesarios para el modelo de fugacidad. A). Opciones para el método de estimación de vidas medias del modelo. B) Valores de vida media predeterminados por la EPA. C) Relaciones de vida media para las estimaciones en BIOWIN. D) Factores de vida media de BIOWIN.

b) En la ventana “selección de vida media” (Figura 7 inciso A), se habilita la opción “Use BIOWIN (Ultimate) and AOPWIN estimates”. BIOWIN para estimar la biodegradabilidad aeróbica y anaeróbica de sustancias químicas orgánicas utilizando 7 modelos diferentes y AOPWIN calcula la velocidad de reacción en fase gaseosa para la reacción entre el oxidante atmosférico más frecuente, los radicales hidroxilos y una sustancia química. A continuación, en la sección “Set BIOWIN Half-Life values” (Figura 7, inciso B) se ejecuta el criterio “EPA Defaults” que establece automáticamente los campos de relación de estimaciones de BIOWIN (Figura 7, inciso C), el programa indica que; 6 vidas medias constituyen una degradación completa. La relación de persistencia en agua, sedimento y suelo (1:2:9), (Figura 7, inciso D), están dados por defecto del programa.

4. Emissions Values

a) Para el valor de emisiones, se trabajará en la pantalla que aparece en la Figura 8.

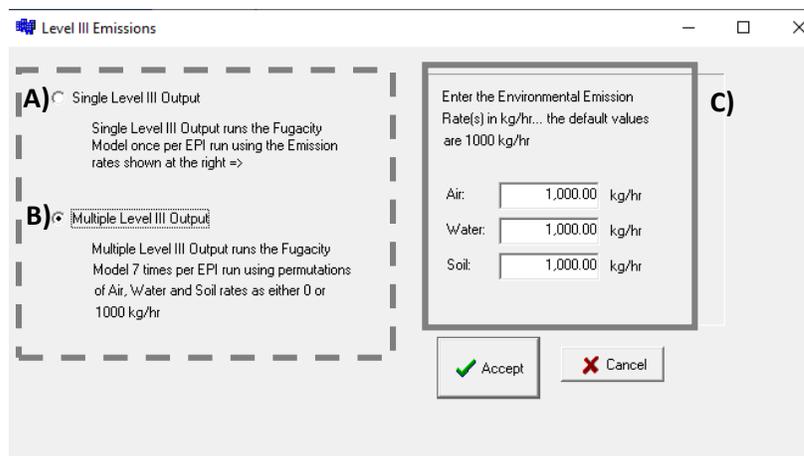


Figura 8: Parámetros necesarios para estimar los valores de emisiones en el modelo de fugacidad. A) y B) Número de ejecuciones de salidas del modelo de nivel III. c) Tasa de emisión ambiental.

- b) “Single Level III Output” (Figura 8, inciso A), ejecutara el programa una vez por ejecución de EPI utilizando las tasas de emisión que se muestran (Figura 8, inciso C).
- c) “Multiple Level III Output”, ejecutará el modelo de Nivel III 7 veces usando todas las permutaciones de tasas de emisión de aire, agua y suelo como 0 o 1000 (excepto donde todas las tasas son 0) (Figura 8, inciso B).
- d) Las tasas de emisión ambiental predeterminadas son 1000 kg / h al aire, al agua y al suelo (el sedimento tiene un valor de cero) (Figura 8, inciso C).

5. Advection Values

- a) El cálculo de advección, se hará en la pantalla que aparece en la Figura 9.

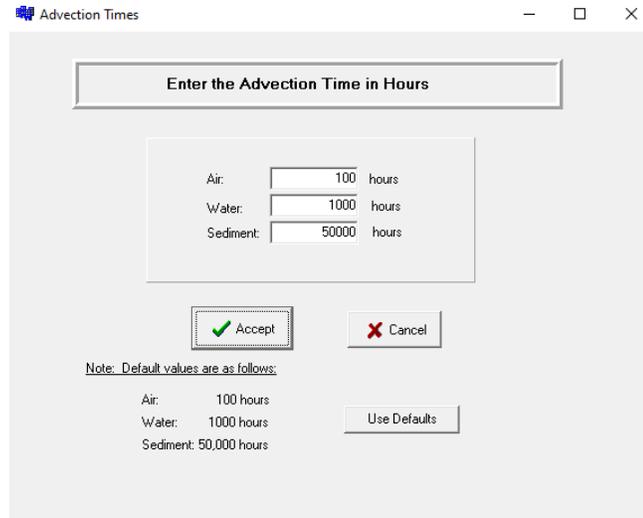


Figura 9: Parámetros de entrada de los valores de advección para el modelo de fugacidad.

- b) Como se muestra en la Figura 9, los valores de entrada de tiempo de advección en horas ya están determinados por el programa, estos no se deberán cambiar, a menos que el usuario este muy familiarizado con el modelo Makay 1992.

6. Soil Koc Value

- a) El valor de Koc del suelo, se obtendrá a partir de la pantalla que se muestra en la Figura 10.

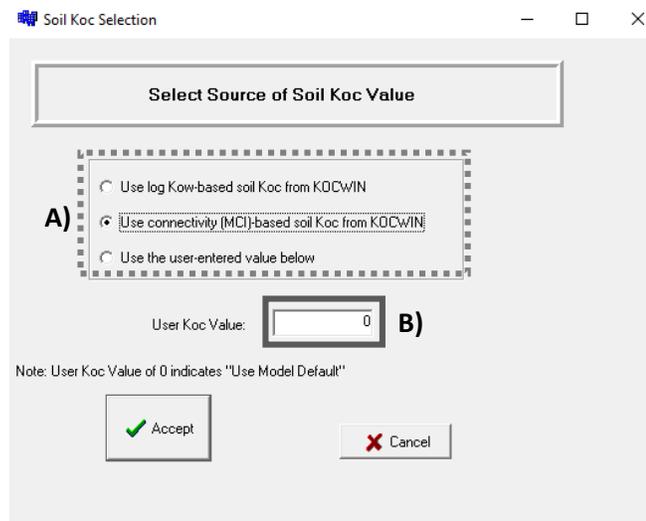


Figura 10: Opciones del modelo de fugacidad para obtener el valor Koc del suelo. A) Valor Koc del suelo basado en el método MCI. B) Valor Koc del suelo introducido por el usuario.

Si se conoce el valor de Koc del suelo del compuesto que se está trabajando, se deberá ingresar el dato en el recuadro indicado en la Figura 10, inciso B.

Si no se conoce el valor, este se obtendrá a partir de la opción “Use connectivity (MCI)-based soil Koc from KOCWIN” (Figura 10, inciso A), basado en conectividad (MCI), ya que se ha demostrado que es más preciso que el valor basado en Kow.

7. Una vez que se tengan todos los datos necesarios, se ejecutará el programa y se mostrarán los resultados estimados.

La metodología de estos programas, fue obtenida de los archivos de ayuda del software EPI Suite™ versión 4.11.

CAPÍTULO III. RESULTADOS Y DISCUSIÓN

En este capítulo se presentan los resultados obtenidos de las estimaciones *in silico* para Triclosán, en primer lugar, se presentan los resultados de la tasa de volatilización a 25°C y a diferentes temperaturas, en seguida los valores del porcentaje de remoción en una planta de tratamiento biológico de aguas residuales. Finalmente se presenta el porcentaje fugacidad en los distintos compartimientos ambientales y su reparto en los diferentes escenarios planteados dando énfasis en el escenario donde la emisión de Triclosán es principalmente en el agua.

3.1 Constante de la ley de Henry

El primer dato estimado es la Constante de la Ley de Henry (HLC) mediante el programa HENRYWIN, el valor de esta constante determina el grado de volatilidad de la sustancia. A continuación, se muestra el resumen de resultados obtenidos en la simulación.

Resultados temperatura normal (25°C)

Los datos que se utilizaron en el modelo de volatilización, para obtener el valor de HLC, son los siguientes (Tabla 16):

Tabla 16: Parámetros para el cálculo de volatilización

Triclosán	
Nombre químico:	5-CHLORO-2-(2,4-dichlorophenoxy) phenol
Número de CAS:	003380-34-5
SMILES:	<chem>O(c(c(O)cc(c1)CL)c1)c(c(cc(c2)CL)CL)c2</chem>
Formula molecular:	C ₁₂ H ₇ CL ₃ O ₂
Peso Molecular:	289.55 g/mol
Solubilidad en agua:	10 ppm

Fuente: EPA (2021). Programas de estimación Interface EPI Suite, "WVOLWIN. Base de datos PHYSPROP.

El valor obtenido para la Constante de Ley de Henry (HLC) es el siguiente:

Constante de Ley de Henry: 2.13E-008 atm-m³/mole (estimada por el método Group).

3.2 Tasa de volatilización del Triclosán en cuerpos de agua.

Con referencia a la Tabla 7, sobre la volatilidad de los productos químicos que se encuentran dentro de los rangos específicos de la HLC, información considerada en el software WVOLWIN de la EPI Suite; de acuerdo al resultado obtenido para el valor de la Constante de Ley de Henry: $2.13E-008 \text{ atm}\cdot\text{m}^3/\text{mol}$, se considera al Triclosán como un compuesto relativamente no volátil. Es decir, en comparación con el agua, el Triclosán es menos volátil y su concentración aumentará a medida que el agua se evapore.

Con respecto a la Tabla 8 el valor de solubilidad de Triclosán 10 mg/L a $25 \text{ }^\circ\text{C}$ lo define como un compuesto ligeramente soluble en agua, con menor probabilidad de volatilizarse y permanecer en el medio acuático.

La volatilización puede ser un destino ambiental importante para los compuestos introducidos tanto en el agua dulce como en el medio marino por derrames inadvertidos, por escorrentía agrícola y por efluentes industriales o introducidos directamente al aire desde procesos de unidades industriales como un biotratador o una torre de enfriamiento. (Smith, Bomberger & Haynes, 1980).

La volatilidad del Triclosán se estimó considerando dos escenarios, en un río y en un lago. Las condiciones se muestran en la Tabla 17 y contemplan profundidad, velocidad de la corriente y velocidad del viento.

Tabla 17: Parámetros de entrada de volatilización y valores de vida media obtenidos para Triclosán.

Parámetro.	Río	Lago
Profundidad del agua	1 m	1 m
Velocidad del viento	5 m/s	0.5 m/s
Velocidad de corriente	1 m/s	0.05 m/s
Vida media		
Horas	46770	510400
Días	1949	21270
Años	5.336	58.23

Fuente: EPA (2021). Programas de estimación Interface EPI Suite, "Resultados WVOLWIN".

Los parámetros por defecto del programa para un río modelo se seleccionaron para producir una vida media que puede ser indicativa de una volatilización relativamente rápida de las aguas ambientales.

Los parámetros por defecto del programa para el lago, calculan una tasa de volatilización mucho más lenta, pues modelan específicamente una masa de agua en condiciones de calma.

En concordancia con el valor de la volatilidad estimado, las vidas medias (Tabla 17), indican que en un río deben transcurrir 5.336 años para que haya reaccionado la mitad del Triclosán de su concentración inicial.

Para el lago, se requieren 58.23 años para que haya reaccionado la mitad del Triclosán de su concentración inicial. Según el programa de volatilización, la baja velocidad del viento y la velocidad de la corriente son indicativas de un estanque (o un lago muy poco profundo) en condiciones relativamente tranquilas.

El cálculo del resultado de volatilización por medio del programa WVOLWIN, fue estimado a 25°C, temperatura ambiente, a la cual el Triclosán no presenta volatilización. Normalmente en un cuerpo de agua natural, no hay un cambio radical de temperatura, por lo cual el tiempo de reacción estimado de este compuesto es prolongado en el río y el lago.

Los contaminantes pueden ser transportados en el agua por diferentes procesos, un factor importante es que los cuerpos de agua en movimiento como ríos y torrentes de agua, transportan por medio de escorrentía superficial gran volumen de este recurso y su contenido a diferentes cuerpos de agua. El agua en calma puede ser almacenada en la superficie, como lagos y embalses superficiales y en el subsuelo en los acuíferos subterráneos. Cabe señalar el proceso de escorrentía, filtración, y almacenamiento en los cuerpos de agua es completamente interactivo ya que existe normalmente un flujo continuo entre todos los sistemas. (Muñoz 2008)

La advección es un proceso de transporte de contaminantes en el agua. Si solo existiera este proceso el contaminante viajaría a la misma velocidad que el agua y la extensión ocupada por esta sustancia sería constante. Tomando en cuenta las velocidades de la corriente utilizadas por el modelo de volatilización, el río presenta mayor capacidad de transportar el Triclosán hacia otros puntos. (Sánchez, 2012)

Con respecto a la vida media del Triclosán en un río y un lago es considerablemente elevada ya que es un compuesto con baja volatilidad e hidrófobo.

Se presenta menor tiempo en un río ya que este cuerpo de agua presenta movimiento, al ser introducido el Triclosán no se mezcla fácilmente con el agua, pero al presentarse movimiento el río, ya sea horizontal o vertical, el contaminante se ve sometido a una serie de procesos que implican su dispersión en el seno de agua y su traslado hacia otros cuerpos de agua, se puede filtrar hacia el subsuelo provocando escorrentía subterránea, también puede ser introducido a la cadena alimenticia provocando la muerte de varias formas de vida necesarias en el balance de algunos ecosistemas tanto de agua dulce como agua salada. Al pasar por estos procesos la concentración inicial del Triclosán en el río, irá disminuyendo ya que este será transportado a otros puntos. (Muñoz 2008)

La prevalencia del Triclosán en un lago es mucho más prolongada ya que es un cuerpo de agua en condiciones tranquilas, la velocidad de corriente es baja, no hay transporte significativo del contaminante, en comparación con las características antes mencionadas para un cuerpo de agua en movimiento.

Los procesos que pueden presentarse son la dispersión del contaminante en el área del lago y filtraciones al subsuelo, pero al ser una sustancia que es constantemente introducida al ambiente y resistente a los procesos de degradación en el agua, la vida media del Triclosán es mayor, pues la concentración se mantiene constante.

Se estimaron los valores de la Constante de la ley de Henry para el Triclosán, en el rango de temperatura de 0°C a 50 °C (Tabla 18), lo cual muestra que el contaminante se sigue considerando relativamente no volátil para dicho rango, de acuerdo a las especificaciones de la Tabla 7, presenta baja facilidad de evaporación y la concentración del Triclosán aumentará a medida que el agua se evapore.

Tabla 18: Valor de HLC a diferentes temperaturas.

Temperatura (°C)	HLC (atm·m ³ /mole)
0	6.78E-010
5	1.04E-009
10	1.57E-009
15	2.34E-009
20	3.44E-009
25	4.99E-009
30	7.15E-009
35	1.01E-008
40	1.42E-008
45	1.96E-008
50	2.69E-008

Fuente: EPA (2021). Programas de estimación Interface EPI Suite, "WVOLWIN".

Los resultados de los valores de la constante de ley de Henry a diferentes temperaturas, fueron obtenidos del método Bond.

Como se observa en la Tabla 18, el cambio de temperatura en el rango estudiado no provoca la volatilización del compuesto en cuestión, al no ser volatilizado la concentración de este compuesto presente en un cuerpo de agua no será afectado por este proceso.

3.3 Porcentaje de remoción de Triclosán en una planta de tratamiento biológico de aguas residuales

El modelo que proyecta la remoción del triclosán se denomina STPWINTM del software EPI Suite, es una versión del modelo de planta de tratamiento de aguas residuales, desarrollado por Mackay en 1995. El modelo estima el destino de una sustancia química presente en el afluente de una planta de tratamiento biológico a medida que se somete a eliminación por evaporación, biodegradación u otros procesos de degradación, sorción a lodos y pérdida en el efluente final.

Debido a que la variable más crítica e incierta es la tasa de biodegradación y su dependencia de la concentración de biomasa, el programa ofrece tres alternativas que contemplan distintos escenarios para la obtención de datos de la tasa de biodegradación. Para la simulación se estimó la remoción tomando en cuenta los escenarios sin biodegradación (Peor de los casos) y vidas medias de BIOWIN/EPA.

3.3.1 Escenario sin biodegradación

Se consideraron valores para indicar que no hay biodegradación, denominado por el programa como un escenario del "peor de los casos", el cual estima la remoción para tiempos de 10 000 horas para el clarificador primario, el tanque de aireación y el tanque de sedimentación secundaria. A continuación, se enlistan algunas propiedades empleadas en la estimación de la remoción del Triclosán por el programa STPWIN.

Modelo STP: destino previsto en una planta de tratamiento de aguas residuales usando 10000 hr para el clarificador primario (Bio P), el recipiente de aireación (Bio A) y el tanque de sedimentación final (Bio S).

Tabla 19: Propiedades para el proceso de tratamiento biológico de Triclosán.

Nombre químico:	5-CLORO-2- (2,4-DICLOROFENOXI) FENOL
Peso molecular:	289.55 g/mol
Solubilidad acuosa:	10 mg/L
Presión de vapor:	0 Pa 0 atm 0 mmHg
Constante de la ley de Henry:	2.13E-008 atm-m ³ / mol
Coefficiente de partición aire-agua:	8.71107E-007
Coefficiente de reparto octanol-agua (Kow):	57544
Log Kow:	4.76
Coefficiente de reparto biomasa-agua:	11509.6
Temperatura:	25 °C

Fuente: EPA (2021). Programas de estimación Interface EPI Suite. Base de datos PHYSPROP.

En un proceso de tratamiento biológico, los procesos de biodegradación se llevan a cabo en reactores biológicos. El diseño y las condiciones de operación de los mismos, buscan mantener en cada momento las condiciones óptimas para el crecimiento microbiano. (Clemente, Chica & Peñuela, 2013) Cabe mencionar que el éxito de eliminación de un contaminante varía mucho en función de sus propiedades particulares. (Gil et al, 2012)

Las propiedades que se presentan en la Tabla 19 son propias del Triclosán, contaminante en estudio de este trabajo.

En cuanto a la temperatura, el modelo STP considera un valor de 25°C (temperatura ambiente), dato que debe tomarse en cuenta, pues las altas temperaturas en un reactor afectan la actividad de los microorganismos, la transferencia de oxígeno y las propiedades de sedimentación de los lodos biológicos principalmente. (Martínez et al, 2005)

Actualmente se considera que los tratamientos biológicos como la tecnología más viable en el tratamiento de aguas residuales domésticas y de algunas industriales, pero cabe señalar que estos sistemas sólo generan una remoción parcial de los Contaminantes Emergentes; siendo la mayoría de los mismos descargados al medio receptor. Se ha revelado que los lodos activos, a pesar de que pueden convertir rápidamente compuestos orgánicos en biomasa, solamente son capaces de eliminar una parte de dichos contaminantes. (Clemente, Chica & Peñuela, 2013)

En la Tabla 20, se muestran los parámetros de configuración de la planta de tratamiento. Como se puede observar no hay biodegradación en ninguna parte del proceso de tratamiento biológico.

Tabla 20: Parámetros de configuración de la planta de tratamiento de aguas residuales.

	Constantes de velocidad de biodegradación (h⁻¹)	vida media en biomasa (h)	2000 mg / L MLSS (h)
Clarificador primario	0	9583.67	10000.00
Recipiente de aireación	0	9583.67	10000.00
Tanque de sedimentación	0	9583.67	10000.00

Fuente: EPA (2021). Programas de estimación Interface EPI Suite, "STPWIN".

La Tabla 21 muestra el balance de masa general de la planta de tratamiento de agua residual biológica, usando 10 000 horas para Bio P, Bio A y Bio S, así como los resultados que se obtuvieron en cuanto a la remoción y biodegradación de Triclosán en esta configuración del programa.

Tabla 21: Balance de masa química general de la planta de tratamiento de agua residual, usando 10000 hr para Bio P, Bio A y Bio S.

	g/h	mol/h	Porcentaje
Influente	10	3.5e-2	100
Lodos primarios	4.18	1.4E-2	41.85
Lodos residuales	2.62	9.1E-3	26.21
Volatilización primaria	3.51E-6	1.2E-8	0
Liquidación de volatilización	8.61E-6	3E-8	0
Aireación de gas	2.12E-5	7.3E-8	0
Biodegradación primaria	1.28E-2	4.4E-5	0.13
Biodegradación por sedimentación	3.44E-3	1.2E-5	0.03
Biodegradación por aireación	4.53E-2	1.6E-4	0.45
Efluente de agua final	3.13	1.1E-2	31.33
Remoción total	6.87	2.4E-2	68.7
Biodegradación total	6.15E-2	2.1E-4	0.61

Fuente: EPA (2021). Programas de estimación Interface EPI Suite, “Resultados STPWIN”.

La concentración inicial de Triclosán en el influente es de 10 g/h. Al someterse al proceso de tratamiento biológico. Como se puede observar, no hay eliminación por evaporación ya que este compuesto es relativamente no volátil.

Al considerar el “peor de los casos”, es decir que no hay biodegradación de Triclosán. Considerando un tiempo de remoción de 10 000 horas para el clarificador primario, el tanque de aireación y el sedimentador secundario, la concentración final de este contaminante en el efluente de agua, es de 3.13 g/h. Por lo que el porcentaje de remoción de Triclosán en la planta de tratamiento biológico en los diferentes procesos del tratamiento es de 68.70%.

Del porcentaje de remoción, solo el 0.61% es biodegradado por la biomasa presente en los lodos activados, es decir la biodegradación es casi nula, esto se debe a que es considerado un contaminante xenobiótico y persistente.

Se obtiene que el 31.33% de la concentración inicial del contaminante será descargado al medio receptor. Los Contaminantes Emergentes, son sustancias que a pesar de que pueden ser biodegradables, son muy peligrosas para el ambiente y el organismo humano debido a su bioacumulación y persistencia. Son capaces de llegar incluso a los reservorios de agua de consumo humano a través de las vertientes residuales y corrientes subterráneas.

Dichos contaminantes acumulados en los ecosistemas tienen la posibilidad de ocasionar componentes de magnificación trófica, razón por la cual los organismos se han observado dañados de distintas modalidades.

Sustancias como el Triclosán (TCS) y sus catabolitos persisten gracias a su bioacumulación en el ambiente tienen la posibilidad de dañar la salud de todos los seres vivos, ocasionando resistencia microbiana, irritaciones dérmicas, alteraciones endocrinas, elevada incidencia de alergias, variación del metabolismo de la hormona tiroidea y el desarrollo de tumores. (Clemente, Chica & Peñuela, 2013& Carrasco, 2017)

3.3.2 Vidas medias BOWIN/EPA

Se consideran estimaciones basadas en la salida de BOWIN, las vidas medias se asignan en base a un método de la EPA que usa la salida de BOWIN. Este método se proporciona en la sección relaciones de Half Life (vida meda) de BOWIN de la ventana Parámetros de Half Life de STP.

Modelo STP: destino previsto en una planta de tratamiento de aguas residuales usando valores proporcionados por BOWIN/ Método de borrador de la EPA

A continuación, en la Tabla 22, se presentan algunas propiedades predeterminadas en la estimación de la remoción del triclosán usando valores proporcionados por BOWIN.

Tabla 22: Parámetros de configuración de la planta de tratamiento de aguas residuales.

	Constantes de velocidad de biodegradación (h⁻¹)	vida media en biomasa (h)	2000 mg / L MLSS (h)
Clarificador primario	0	958.37	1000.00
Tanque de aireación	0.01	95.84	100.00
Tanque de sedimentación	0.01	95.84	100.00

Fuente: EPA (2021). Programas de estimación Interface EPI Suite, "STPWIN".

Con los valores proporcionados por BOWIN para la configuración de la planta de tratamiento, se considera un tiempo de vida media de 1000 horas en el clarificador primario sin presentar biodegradación. Por el contrario, la biodegradación se llevará a cabo en el

tanque de aireación y el sedimentador secundario con un lapso de 100 horas como tiempo de vida media.

En la Tabla 23, se presentan los resultados de remoción y biodegradación del Triclosán obtenidos en la simulación a partir de los valores proporcionados por el programa BIOWIN, así como el balance general de masa de las diferentes etapas del proceso de tratamiento biológico en la planta de tratamiento de aguas residuales.

Tabla 23: Balance de masa química general de la planta de tratamiento de agua residual, usando valores proporcionados por BIOWIN.

	g/h	mol/h	Porcentaje
Influente	10	3.5e-2	100
Lodos primarios	4.14	1.4E-2	41.37
Lodos residuales	1.41	4.9E-3	14.14
Volatilización primaria	2.47E-6	1.2E-8	0
Liquidación de volatilización	4.65E-6	1.6E-8	0
Aireación de gas	1.15E-5	4E-8	0
Biodegradación primaria	1.26E-1	4.4E-4	1.26
Biodegradación por sedimentación	1.85E-1	6.4E-4	1.85
Biodegradación por aireación	2.45	8.5E-3	24.47
Efluente de agua final	1.69	5.8E-3	16.90
Remoción total	8.31	2.9E-2	83.10
Biodegradación total	2.76	9.5E-3	27.59

Fuente: EPA (2021). Programas de estimación Interface EPI Suite, "Resultados STPWIN".

El modelo estima el destino de una sustancia química presente en el afluente a medida que se somete a diferentes procesos de remoción y/o degradación. Los valores son dados para la remoción total y tres procesos que contribuyen a esta (biodegradación, sorción al lodo y aireación). La concentración a la entrada del influente de agua es de 10 g/h.

Como ya se ha mencionado el Triclosán es un compuesto relativamente no volátil. Por esta razón no presenta eliminación por volatilización en el proceso de tratamiento de agua residual con lodos activados.

Al utilizar valores proporcionados por el programa BIOWIN para el proceso de remoción del Triclosán en la planta de tratamiento con lodos activados, el porcentaje de remoción total que se lleva a cabo durante todo el proceso de tratamiento es de 83.10%.

Los lodos activados tienen la capacidad de remover parte de este contaminante pues es parcialmente degradado aeróbicamente por los macroorganismos presentes y parcialmente absorbido por los lodos residuales, en consecuencia, pasan al ambiente directamente cuando se dispone de los lodos. Cabe mencionar que la capacidad de remoción varía y puede verse limitada por muchos factores como la edad del lodo, la temperatura del tanque de lodos activos y el tiempo de retención hidráulico. (Orozco, 2019 & Cuenca, 2019)

El porcentaje de biodegradación de Triclosán que la biomasa presente en los lodos activados es de 27.59% del porcentaje de remoción total, este porcentaje aun sigue siendo bajo en función de los efectos que puede tener este contaminante y se debe a sus características de compuesto xenobiótico y persistente.

La concentración final del efluente es de 1.69 g/h, es decir el 16.9% de la concentración inicial de Triclosán, será vertido al cuerpo receptor, en comparación con el escenario sin biodegradación la concentración de contaminante vertida al medio es relativamente baja, sin embargo, al ser introducida constantemente en el agua residual la concentración de entrada al medio irá aumentando y por ende causar daños en los ecosistemas, la salud humana y todo el ambiente.

Otro factor de contaminación son los lodos generados en las plantas de tratamiento de agua residual. Ya que el uso principal de esos lodos es su aplicación en los terrenos como fuente de nutrientes; tras episodios de lluvia, por ejemplo, este y otros contaminantes contenidos en los lodos pueden absorberse en los suelos y llegar a infiltrarse hasta alcanzar las aguas subterráneas. (Cuenca, 2019)

Es importante mencionar que el Triclosán es un compuesto con una constante de disociación (pK_a) de 7.9, presentando movilidad moderada (Tabla 6), lo que facilita la distribución de este contaminante por el ambiente.

3.4 Evaluación la fugacidad del Triclosán en un entorno evaluativo en cuatro compartimentos.

La partición del Triclosán entre el aire, el suelo, los sedimentos y el agua se estimó a través del programa LEV3EPITM utilizando el Índice de Conectividad Molecular de primer orden

(MCI). El modelo de fugacidad de nivel, III asume condiciones de estado estacionario, pero no de equilibrio.

Los valores que el modelo MCI utiliza para hacer el cálculo de fugacidad del Triclosán son los siguientes (Tabla 24):

Tabla 24: Parámetros y sus valores que el modelo MCI utiliza para hacer el cálculo de fugacidad.

Modelo de Fugacidad Nivel III (Salida completa): Modelo MCI	
Nombre Químico:	5-chloro-2-(2,4-dichlorophenoxy) phenol
Peso Molecular:	289.55 g/mol
HLC (programa Henrywin):	2.13e-008 atm-m ³ /mole)
Presión de Vapor (programa Mpbpwin):	4.65e-006 mm Hg
Presión de vapor -líquido (super-cooled):	9e-006 mm Hg
Punto de Fusión (user-entered):	54 °C
Log Kow (user-entered):	4.76
Koc del suelo (KOCWIN método MCI):	2.34e+004

Fuente: EPA (2021). Programas de estimación Interface EPI Suite. Base de datos PHYSPROP.

La Tabla 25 muestra los resultados de fugacidad obtenidos en la simulación de Triclosán en los diferentes compartimentos ambientales obtenidos. La salida de resultados se hizo a través del método múltiple, es decir el programa ejecuto el modelo de Nivel III siete veces, usando todas las permutaciones de tasas de emisión de aire, agua y suelo como 0 o 1000 (excepto donde todas las tasas son 0).

Tabla 25: Resultados de Fugacidad en los diferentes compartimentos ambientales.

Modelo de fugacidad nivel III (Salida completa): MODELO MCI						
Compartimientos ambientales						
Emisiones [kg/h]	% Aire	% Agua	% Suelo	% Sedimentos	Total	Otros datos
Aire 1000						Tiempo de Persistencia: 2840 hr
Agua 1000						Tiempo de Reacción: 3780 hr
Suelo 1000	0.0718	7.82	78.2	13.9	99.99	Tiempo de Advección: 11300 hr
Sedimento 0						Reacción: 75%
						Advección: 25%

Aire 1000							Tiempo de Persistencia: 2640 hr
Agua 0	0.232	1.64	95.2	2.9	99.97		Tiempo de Reacción: 2950 hr
Suelo 0							Tiempo de Advección: 24900 hr
Sedimento 0							Reacción: 89.4%
							Advección: 10.6%
Aire 0							Tiempo de Persistencia: 1720 hr
Agua 1000	4.62E-	36	0.019	64	100.02		Tiempo de Reacción: 4820 hr
Suelo 0	05						Tiempo de Advección: 2680 hr
Sedimento 0							Reacción: 35.8%
							Advección: 64.2%
Aire 0							Tiempo de Persistencia: 4150 hr
Agua 0	1.65E-	0.0339	99.9	0.0602	99.99		Tiempo de Reacción: 4160 hr
Suelo 1000	05						Tiempo de Advección: 2.83e+006 hr
Sedimento 0							Reacción: 99.9%
							Advección: 0.146%
Aire 1000							Tiempo de Persistencia: 2180 hr
Agua 1000	0.14	15.2	57.6	27	99.94		Tiempo de Reacción: 3480 hr
Suelo 0							Tiempo de Advección: 5820 hr
Sedimento 0							Reacción: 62.6%
							Advección: 37.4%
Aire 1000							Tiempo de Persistencia: 3390 hr
Agua 0	0.09	0.656	98.1	1.16	100.01		Tiempo de Reacción: 3580 hr
Suelo 1000							Tiempo de Advección: 63300 hr
Sedimento 0							Reacción: 94.6%
							Advección: 5.36%
Aire 0							Tiempo de Persistencia: 2940 hr
Agua 1000	2.52E-	10.60	70.60	18.80	100.00		Tiempo de Reacción: 4330 hr
Suelo 1000	05						Tiempo de Advección: 9120 hr
Sedimento 0							Reacción: 67.8%
							Advección: 32.2%

Fuente: EPA (2021). Programas de estimación Interface EPI Suite, "ResultadosLEV3EPI".

Para conocer la distribución de cada contaminante, la cantidad obtenida en cada compartimiento se ha expresado como porcentaje de la cantidad total emitida, así la suma de las distintas distribuciones siempre es el 100%. El compartimiento con mayor porcentaje indica ser el de mayor afinidad para el contaminante analizado. (Delgado, 2016)

En el ambiente los contaminantes pueden ser transportados, incluso a zonas remotas, a través del aire, agua, suelo, sedimentos o a través de los organismos vivos. El potencial de un compuesto orgánico para distribuirse entre compartimentos ambientales está determinado por sus propiedades físico-químicas. Desafortunadamente, varios de estos contaminantes son resistentes a degradarse y capaces de acumularse en los diferentes compartimientos. (Tinsley, 2004) Como se puede observar en la Tabla 25, el mayor porcentaje de fugacidad se presenta en el suelo para los escenarios que se presentan, con referencia a las emisiones en los cuatro compartimientos aire, agua, suelo y sedimentos. Es decir que el Triclosán tiene mayor afinidad a permanecer en el suelo.

La menor afinidad se presenta en el compartimento de aire para todos los escenarios planteados, pues el porcentaje de Triclosán presente en este compartimento es menor al 1%.

Con respecto a la emisión del Triclosán principalmente en el agua (1000 kg/h), escenario que para este trabajo es de mayor relevancia, se puede observar que el compartimento con mayor porcentaje de fugacidad o mayor afinidad a este compuesto son los sedimentos con el 64%, seguido del agua con el 36%. Esto se debe a que el Triclosán es un compuesto no polar (Tabla 15), por lo cual posee una elevada lipofilidad y es hidrofóbico, traduciéndose en una elevada retención en la materia orgánica, sedimentos y biota.

El compartimento con menos presencia de Triclosán en el mismo escenario es el aire, con un valor de 4.62E-05% ya que este compuesto es relativamente no volátil, lo que dificulta su destino a este compartimento ambiental.

El tiempo de persistencia general es una medida de cuánto tiempo permanece la sustancia química en el entorno del modelo, en el escenario de 1000 kg/h vertidos en agua el tiempo de persistencia para Triclosán será de 1720 horas. Es un lapso considerablemente alto por eso la importancia de poner atención en la remoción y biodegradación de este contaminante en su proceso de tratamiento en aguas residuales.

En un tiempo de 2680 horas el 64.2% de Triclosán presente en el cuerpo de agua será transportado por advección. El agua puede ejercer este transporte por dos vías distintas para el Triclosán: arrastre y suspensión. El proceso de arrastre consiste en el transporte irregular de partículas, desplazándose por el fondo del cauce, o a saltos más o menos discontinuos en

función de las irregularidades del fondo y de las posibles turbulencias generadas. El proceso de transporte en suspensión consiste en el desplazamiento de partículas que flotan durante largos periodos en el seno del agua, mientras no cambie algún factor que las haga depositarse en el fondo. (Harrison, 2001)

En el camino hacia los cuerpos de agua se produce filtración al subsuelo, dando como resultado escurrentía subterránea.

El resto del Triclosán, 35.8% puede tener alguna reacción con el medio, puede ser química, fotoquímica, transformación biológica y/o degradación, esto en un periodo de 4820 horas.

El experto español Barceló D. (2008), manifiesta la peligrosidad de los Contaminantes Emergentes contemplando los siguientes parámetros: persistencia a la degradación, bioconcentración; por mayor afinidad con los tejidos que con el agua, bioacumulación; pues su presencia aumenta con el tiempo, biomagnificación; aumentando la concentración al avanzar en los eslabones de la cadena trófica, su toxicología debido a los efectos negativos en la salud humana y animal y la movilidad ambiental; por su capacidad para trasladarse en el medio ambiente y sus transformaciones, lo que provoca que sustancias peligrosas se transformen en otras potencialmente más tóxicas.

CONCLUSIONES

De acuerdo con los resultados del modelo de predicción de destino y riesgo ambiental del Triclosán vertido en cuerpos de agua mediante de los programas WVOLWIN, STPWIN, LEV3EPI de EPI Suite 4.11. de la EPA esta investigación concluye lo siguiente:

1. El valor de la Constante de Ley de Henry: $2.13E-008 \text{ atm}\cdot\text{m}^3/\text{mol}$, para cuerpos de agua en calma y en movimiento considera al Triclosán como un compuesto relativamente no volátil, es decir presenta una tasa de volatilidad baja. En comparación con el agua, el Triclosán es menos volátil y su concentración aumentará a medida que el agua se evapore, al ser un considerado un compuesto con baja volatilidad posee mayor probabilidad de permanecer en agua y el suelo. La emisión de Triclosán a la atmósfera tiene un alcance limitado. Por lo que la vida media de este contaminante en cuerpos de agua es muy prolongada, además de que podrá ser transportado hacia otros medios receptores provocando interferencias en los ecosistemas, flora, fauna y por ende a la salud humana.
2. En el caso de una planta de tratamiento biológico se consideran dos escenarios: sin biodegradación del contaminante se podría remover el 68.70%, y con biodegradación un 83.10%. Sin embargo, el Triclosán al ser una sustancia xenobiótica y persistente presenta baja biodegradación. Por lo cual sería conveniente implementar otro tipo de tecnologías como complemento para asegurar o elevar el porcentaje de biodegradación, y de esta manera reducir las características que hacen al lodo un residuo peligroso y por consiguiente el riesgo ambiental.
3. Los resultados de fugacidad obtenidos en la simulación, indican principalmente que el Triclosán tiene una alta tendencia a migrar y acumularse en el suelo y los sedimento (mayor afinidad), por lo que se debe tener un mayor interés en el monitoreo y tratamiento en la contaminación de estos compartimentos ambientales. La retención de este contaminante en el agua es inferior debido a sus características de lipofílicidad, hidrofóbico y no polar. Al ser un compuesto relativamente no volátil el aire es el compartimento con menor tendencia de fugacidad de Triclosán.

4. Como conclusión general la simulación *in silico* reduce notablemente el recurso tiempo en el análisis del Triclosán en el ambiente, además, aporta datos en conformidad con los reportados en la bibliografía. El transporte del Triclosán inicia al ser introducido al ambiente por medio del agua residual que llega a las plantas de tratamiento, parte de este contaminante es removido por procesos fisicoquímicos y procesos biológicos. El porcentaje presente en el efluente es transportado primordialmente por medio de escorrentía y filtración a otros cuerpos receptores o dispersado y retenido principalmente en los sedimentos en un cuerpo de agua en calma, ya que, suelo, sedimentos y agua son los compartimentos con mayor afinidad al Triclosán y que deben mantenerse en constante vigilancia y prevenir los riesgos ambientales que puede provocar la presencia de este compuesto. La baja volatilidad del compuesto limita su dispersión en el aire por lo que el tiempo de permanencia en el medio acuático es prolongado como lo indica el mayor valor de vida media, 58.23 años. La persistencia de este contaminante promueve la filtración al subsuelo provocando la contaminación de los acuíferos y ser introducido en la cadena alimenticia provocando la muerte de la flora y fauna acuática y la alteración de los ecosistemas. En la salud humana afecta principalmente el sistema endocrino, provoca interferencias en las hormonas naturales y tiene la posibilidad de causar cáncer.

Por lo anterior se acepta la hipótesis planteada en esta investigación ya que el comportamiento y destino ambiental del Triclosán podrían generar impactos negativos en la salud humana y el ecosistema receptor.

RECOMENDACIONES

Es cierto que el uso del Triclosán en la actualidad es muy demandante como compuesto antimicrobiano, pero ante los datos alarmantes sobre este contaminante que se están estudiando recientemente es importante tomar conciencia sobre su uso ya que es un compuesto que no está regulado en muchos países. Aunque se encuentra en bajas concentraciones es introducido constantemente al ambiente y posee características de bioacumulación y permanencia que lo caracteriza como potencial amenazador para todo ser vivo.

Se propone suprimir el uso de productos de uso diario que contengan este y otros compuestos considerados contaminantes emergentes o usarlos de manera excepcional y así disminuir la concentración de contaminante en la descarga de agua residual.

Es necesario incorporar el monitoreo de Triclosán en los procesos de tratamiento de agua residual y mejorar la tecnología de tratamiento de estos contaminantes presentes en agua contaminada y poder evitar en lo mayor posible dañar la flora y fauna acuática del medio receptor.

Para fines de gestión o regulación de contaminantes emergentes, los datos que se puedan rescatar del monitoreo de este contaminante en las plantas de tratamiento y los datos obtenidos del modelo de fugacidad de EPI Suite resultan de gran utilidad para aportar un primer conocimiento sobre el comportamiento del Triclosán como contaminante no regulado, y con estos datos plantear una posible regulación futura en México.

TRABAJOS CITADOS

Acosta H. Karna L. (2010) Biodegradación de contaminantes emergentes en columnas empacadas con suelos del valle de tula (tesis de maestría). Universidad Nacional Autónoma de México. México.

Agencia de Protección Ambiental de Estados Unidos (EPA). (2019). EPI Suite TM: estimation program interface. Recuperado 2021, de Pollution and Toxic Prevention Office Sitio web: <https://www.epa.gov/ingredients-used-pesticide-products/triclosan>.

Agencia de Protección Ambiental de Estados Unidos (EPA). (2020). EPI Suite TM: estimation program interface. 2021, de Pollution and Toxic Prevention Office Sitio web: <https://www.epa.gov/tsca-screening-tools/epi-suitetm-estimation-program-interface>.

Aguilar Guizar Fernando. (2013). Contaminantes Emergentes: Efectos a la salud y medio ambiente, así como los tratamientos para su remoción de las aguas residuales domésticas. Instituto Politécnico Nacional. México D.F.

Barceló, D., Ayora, C., Carrera, J., Castaño, S., Folch, M., García Calvo, E.& Torrens, A. (2008). Aguas continentales. Gestión de recursos hídricos, tratamiento y calidad del agua.

Barnsley, M. J. (2007). Environmental modeling: A practical introduction. CRC Press.

Barreto R. Raúl. (2017). Contaminates Emergentes. (Tesis de pregrado). Universidad Autónoma de México. Cd. Mx.

Baz Sanz Laura. (2019). Contaminantes emergentes. impacto sobre la salud y el medio ambiente. Tesis de grado. Universidad Complutense.

Bermudez Zuluaga Juliana A. & Torres Romero Liz N. (2019). Aplicación de diferentes procesos físico-químicos para la remoción de compuestos emergentes (Triclosán y Cafeína) en aguas para consumo humano. Universidad Militar Nueva Granada. Bogota. DC.

Boethling RS, Howard PH, Meylan WM, Stiteler W, Beauman J, Tirado N. 1994. Group contribution method for predicting probability and rate of aerobic biodegradation. *Environ Sci Technol* 28:459-465.

Buitrón G. et al (2018). Red de Tratamiento y reciclaje de aguas industriales mediante soluciones sostenibles fundamentadas en procesos biológicos. RED TRITÓN 316RT0508. Programa CYTED. ISBN: 978-84-09-06055-9. España.

Carrasco, I. R. Z., & Lozano, J. C. (2017). Controversia por el uso de triclosán en los productos antibacteriales de uso común. *Revista Latinoamericana de Infectología Pediátrica*, 30(3), 93-96.

Carrasco, J. D. C. R., Delgado, C. Y. S., & Cobos, D. F. O. (2017). Contaminantes emergentes y su impacto en la salud. *Emerging contaminants and its impact on the health. Revista de la Facultad de Ciencias Médicas de la Universidad de Cuenca*, 35(2), 55-59.

Cartagena, C. J. (2011). Contaminantes orgánicos emergentes en el ambiente: productos farmacéuticos. *Revista lasallista de investigación*, 8(2), 143-153.

Chen, X., Richard, J., Liu, Y., Dopp, E., Tuerk, J., & Bester, K. (2012). Ozonation products of triclosan in advanced wastewater treatment. *Water Research*, 46(7), 2247-2256.

Clemente, A. R., Chica Arrieta, E. L., & Peñuela Mesa, G. A. (2013). Procesos de tratamiento de aguas residuales para la eliminación de contaminantes orgánicos emergentes. *Revista Ambiente & Água*, 8(3), 93-103.

Cuenca Rompinelli, M. T. (2019). Contaminantes emergentes: origen y destino. Trabajo final master.

Delgado Ortega, H. S. (2016). Análisis de la exposición de compuestos emergentes en varios escenarios de usos del agua (Master's thesis, Universitat Politècnica de Catalunya).

Durán-Álvarez, J. C., Sánchez, Y., Prado, B., & Jiménez, B. (2014). The transport of three emerging pollutants through an agricultural soil irrigated with untreated wastewater. *Journal of Water Reuse and Desalination*, 4(1), 9-17.

Durán-Álvarez, J. C., Prado, B., González, D., Sánchez, Y., & Jiménez-Cisneros, B. (2015). Environmental fate of naproxen, carbamazepine and triclosan in wastewater, surface water and wastewater irrigated soil—results of laboratory scale experiments. *Science of the Total Environment*, 538, 350-362.

ECOLÓGICO, L. G. D. E. (1988). Ley General del Equilibrio Ecológico y la Protección al Ambiente. Extraído de <http://www.diputados.gob.mx/LeyesBiblio/pdf/148.pdf> Última reforma publicada en el DOF del, 4.

Eggen, T., Moeder, M., & Arukwe, A. (2010). Municipal landfill leachates: a significant source for new and emerging pollutants. *Science of the Total Environment*, 408(21), 5147-5157.

EPA de EE. UU. (2021). Programas de estimación Interface Suite TM para Microsoft® Windows, v 4.11. Agencia de Protección Ambiental de los Estados Unidos, Washington, DC, EE. UU.

Estadísticas del agua en México (2011). Capítulo 8 Agua en el mundo. Comisión Nacional del Agua. (CONAGUA).

Estadísticas del Agua en México (2018). Comisión Nacional del Agua- Secretaria de Medio Ambiente y Recursos Naturales.

Fondo para la Comunicación y la Educación Ambiental, A.C., (2015): Visión general del agua en México – Agua.org.mx.

Gaitán Aguilera, L. (2014). Evaluación del desempeño ambiental de los productos formados durante la conversión catalítica del glicerol, como subproducto de la elaboración de biodiesel.

Geissen, V., Mol, H., Klumpp, E., Umlauf, G., Nadal, M., Van der Ploeg, M., ... y Ritsema, CJ (2015). Contaminantes emergentes en el medio ambiente: un desafío para la gestión de los recursos hídricos. *Investigación internacional sobre la conservación del suelo y el agua*, 3 (1), 57-65.

Gil, M. J., Soto, A. M., Usma, J. I., & Gutiérrez, O. D. (2012). Contaminantes emergentes en aguas, efectos y posibles tratamientos. *Producción+ limpia*, 7(2).

Harrison R. M. (2001). "Pollution. Causes, Effects and Control". Roy M. Harrison Ed. 4th Edition.

Herrero, O., Martín, J. P., Freire, P. F., López, L. C., Peropadre, A., & Hazen, M. J. (2012). Toxicological evaluation of three contaminants of emerging concern by use of the *Allium cepa* test. *Mutation Research/Genetic Toxicology and Environmental Mutagenesis*, 743(1-2), 20-24.

HENNEO. (11 de febrero de 2019). ¿Qué es el Triclosán? © 20 Minutos Editora, S.L., Recuperado de: <https://www.20minutos.es/noticia/3559565/0/que-es-triclosan/#:~:text=La%20Uni%C3%B3n%20Europea%20permite%20una,2%25%20para%20los%20enjuagues%20bucales>.

Henríquez Villa, D. (2012). Presencia de contaminantes emergentes en aguas y su impacto en el ecosistema. Estudio de caso: productos farmacéuticos en la cuenca del río Biobío, Región del Biobío, Chile.

Hernández-Quiroz, M., Ruiz-Meza, D., Rojo-Callejas, F., & Ponce de León-Hill, C. (2019). Determinación de la distribución de contaminantes emergentes en agua intersticial en sedimentos de humedal mediante la optimización y validación de un método analítico. *Revista internacional de contaminación ambiental*, 35(2), 407-419.

Hine, J. and Mookerjee, P.K. 1975. The intrinsic hydrophilic character of organic compounds. Correlations in terms of structural contributions. *J. Org. Chem.* 40: 292-298.

Hoja de datos (HDS). Sigma-Aldrich Química S de RL de CV. México. Fecha de actualización: 03/28/2020.

Kosera, VS, Cruz, TM, Chaves, ES y Tiburtius, ER (2017). Degradación de triclosán por fotocátalisis heterogénea utilizando ZnO inmovilizado en biopolímero como catalizador. *Revista de fotoquímica y fotobiología A: Química*, 344, 184-191.

LAS, M. P. D. C. E. (1977). Norma oficial mexicana NOM-001-SEMARNAT-1996, que establece los límites máximos permisibles de contaminantes en las descargas residuales en aguas y bienes nacionales. Norma.

López M. & Barceló D. (s.f.) Fate and behaviour of organic contaminants in the aquatic environment. CSIC. Barcelona, España.

Lozano-Aponte, J., & Scior, T. (2012). ¿Qué sabe Ud. acerca de QSAR? *Revista mexicana de ciencias farmacéuticas*, 43(2), 82-84.

Luján Calp D. (2015). Nuevas tecnologías para el análisis de contaminantes emergentes. (Tesis de Maestría). Máster Universidad de Alicante.

Luna M. María S. (2014) Estudio del tratamiento de aireación prolongada para aguas residuales utilizando como matriz agua residual. (Tesis de maestría). Centro de Ingeniería y Desarrollo Industrial Santiago de Querétaro.

Mackay, D. and Leinonen, P.J. 1975. Rate of evaporation of low solubility contaminants from water bodies to atmosphere. *Environ. Sci. Technol.* 9: 1178-80.

Mackay D., Paterson S., Shiu W.Y. 1992. Generic models for evaluating the regional fate of chemicals. *Chemosphere* 24:695-718.

Martínez-Delgadillo, S. A., Morales-Mora, M. A., Rodríguez-Rosales, M. G., & Aguilar-López, R. (2005). Efecto de la temperatura en el desempeño de un sistema biológico de tratamiento de aguas residuales de una industria petroquímica. *Tecnología y ciencias del agua*, 20(4), 33-43.

McAvoy, D. C., Schatowitz, B., Jacob, M., Hauk, A., & Eckhoff, W. S. (2002). Measurement of triclosan in wastewater treatment systems. *Environmental Toxicology and Chemistry: An International Journal*, 21(7), 1323-1329.

Molina-Andrade, L. (2014). Estudio de la degradación de antimicrobianos en agua mediante el tratamiento con radiación ultravioleta.

Muñoz Cruz, A. (2008). Caracterización y tratamiento de aguas residuales. Trabajo final Licenciatura.

Netzahuatl-Muñoz, A. R., & Rodríguez-Cuamatzi, P. (2020). Revisión sobre la ocurrencia de triclosán en aguas subterráneas y tendencias tecnológicas para su remoción.

Norman Network (2021), ¿Por qué necesitamos abordar las sustancias emergentes?, disponible en: <https://www.norman-network.net/?q=node/19>.

Ordoñez Jairo (2018). Equilibrio Químico Fugacidad Coeficiente de Fugacidad y Ecuaciones. Ministerio Del Poder Popular Para La Educación Superior Ciencia Y Tecnología Instituto Politécnico Santiago Mariño. República Bolivariana De Venezuela.

Orozco, J. A. A. (2019). Sistema combinado de procesos de oxidación avanzada y tratamiento biológico para la remoción de contaminantes emergentes presentes en al agua residual de RTE causados por el uso de humectantes. Trabajo final de máster.

Pal, A., Gin, K. Y. H., Lin, A. Y. C., & Reinhard, M. (2010). Impacts of emerging organic contaminants on freshwater resources: review of recent occurrences, sources, fate and effects. *Science of the total environment*, 408(24), 6062-6069.

Pérez, D. M. G. (2017). Eliminación de xenobióticos de aguas residuales urbanas mediante biorreactores de membrana sumergida (Doctoral dissertation, Universidad de Granada).

Petrucci R., et al. (2003) *Química General*, 8th Edición, Pearson educación S. A., Madrid, España.

Pilato Sanz, M. Á. (2017). Diseño del tratamiento biológico de fangos activos para eliminación de materia orgánica y nutrientes para una población de 60000 HE (Doctoral dissertation, Universitat Politècnica de València).

Robledo Zacarías, V. H., Velázquez Machuca, M. A., Montañez Soto, J. L., Pimentel Equihua, J. L., Vallejo Cardona, A. A., López Calvillo, M. D., & Venegas González, J. (2017). Hidroquímica y contaminantes emergentes en aguas residuales urbano industriales de Morelia, Michoacán, México. *Revista internacional de contaminación ambiental*, 33(2), 221-235.

Rodríguez Clara. (2019). Tipos de aguas residuales: por qué es importante conocerlas. Actualizado en 2020, de HIDROTEC Sitio web: <https://www.hidrotec.com/blog/tipos-de-aguas-residuales/>

Rodríguez, M. D. P. C. (2009). Desarrollo de metodología analítica para determinación de Triclosán y Parabenos. Aplicación al estudio de su distribución y transformación en muestras ambientales. Univ Santiago de Compostela.

Romero Rojas, J. A. (2004). Tratamiento de aguas residuales, teoría y principios de diseño. Bogotá, CO, Escuela Colombiana de Ingenieros.

Rubio D. I. C., Delgado D. R., & Amaya A. O. (2017). Normatividad ambiental dirigida a regular la presencia de los productos farmacéuticos residuales en ambientes acuáticos. *Revista Jurídica Piélagus*, 16(1), 121-130.

Salazar, P. A. A. (2016). Contaminantes emergentes en aguas residuales y de río y fangos de depuradora (Doctoral dissertation, Universitat Rovira i Virgili).

Sánchez San Román, F. J. (2012). Transporte de contaminantes. Dpto. Geología. Universidad de Salamanca. España.

Sandoval Páez, C. A. (2016). Determinación de triclosán en tejido vegetal y evaluación de su fracción bioaccesible.

Secretaría de Medio Ambiente y Recursos Naturales. (SEMARNAT). (2015). Glosario de educación ambiental. Disponible en: <https://www.gob.mx/semarnat/acciones-y-programas/glosario-de-educacion-ambiental>.

Secretaría de Medio Ambiente y Recursos Naturales (SEMARNAT)- Instituto Nacional de Ecología y Cambio Climático (INECC). Desarrollo de rutas de instrumentación de las contribuciones nacionalmente determinadas en materia de mitigación de gases y compuestos de efecto invernadero (GyCEI) del sector Aguas Residuales de México (2018)

Seoane, M. (2018). Efecto tóxico de microcontaminantes acuáticos emergentes sobre microalgas marinas mediante el análisis de biomarcadores de citotoxicidad.

Smith, J. H., Bomberger, D. C., & Haynes, D. L. (1980). Prediction of the volatilization rates of high-volatility chemicals from natural water bodies. *Environmental science & technology*, 14(11), 1332-1337.

Solicitud de lista de contaminantes emergentes de interés para México, con número 1610100215520, CONAGUA 2020.

Song, Z., Wang, N., Zhu, L., Huang, A., Zhao, X. y Tang, H. (2012). Degradación oxidativa eficiente del triclosán mediante el uso de un proceso mejorado similar a Fenton. *Revista de ingeniería química*, 198, 379-387.

Sustainable Futures / P2 Framework Manual 2012 EPA-748-B12-001. C. 2. Pollution Prevention, Risk Assessment and Sustainable Futures (2012).

Tinsley, I. J. (2004). *Chemical concepts in pollutant behavior*. John Wiley & Sons.

Thomas, R. 1990. Volatilization from water. In: *Handbook of Chemical Property Estimation Methods. Environmental Behavior of Organic Chemicals*. Lyman, W.J, Reehl, W.F., and Rosenblatt, D.H. (editors). Washington DC: Amer Chem Soc pp. 15-1 to 15-30.

Toca Torres, C. E., & Carrillo Rodríguez, J. (2013). Environmental model for a capital city. *Civilizar Ciencias Sociales y Humanas*, 13(24), 165-180.

Torres C., & Echeverría S. (2017). Determinación preliminar de triclosán por espectroscopia UV-Vis en aguas residuales de la ciudad de Guatemala. *Cienc. tecnol. salud*, 4(1), 87-130.

Tunkel J, Howard PH, Boethling RS, Stiteler W, Loonen H. 2000. Predicting ready biodegradability in the Japanese Ministry of International Trade and Industry test. *Environ Toxicol Chem* 19:2478-2485.

Undiano, E., Arroyo, N., & Ayala, M. (2017). Contaminantes emergentes, ¿qué son y cómo nos afectan. INVDES. Universidad Autónoma de México.

Vadillo-Perez, I., Jiménez-Gavilán, P., Aranda, J. L., Denguir Bujanow, F., Luque Espinar, J. A., & Benavente Herrera, J. (2018). Presencia y distribución de contaminantes emergentes en cuatro cuencas antropizadas del Sur de la Península Ibérica.

Veetil, P. G. P., Nadaraja, A. V., Bhasi, A., Khan, S., & Bhaskaran, K. (2012). Degradation of triclosan under aerobic, anoxic, and anaerobic conditions. *Applied biochemistry and biotechnology*, 167(6), 1603-1612.

Velasco, F., Molano, A., & Pramparo, L. (2019). Evaluación de un sistema de tratamiento de aguas residuales no domésticas para la remoción de carga orgánica en industria de bebidas no alcohólicas. *Entre Ciencia e Ingeniería*, 13(26), 17-26.

Viloria Soto M. Fernanda. (2020). Contaminantes emergentes en diferentes matrices de aguas y tratamientos alternativos para su eliminación. Universidad de Córdoba. Montería, Córdoba.

Weatherly, L. M., & Gosse, J. A. (2017). Triclosan exposure, transformation, and human health effects. *Journal of Toxicology and Environmental Health, Part B*, 20(8), 447-469.

Yang, Y., Ok, Y. S., Kim, K. H., Kwon, E. E., & Tsang, Y. F. (2017). Occurrences and removal of pharmaceuticals and personal care products (PPCPs) in drinking water and water/sewage treatment plants: A review. *Science of the Total Environment*, 596, 303-320.

Yueh, M. F., & Tukey, R. H. (2016). Triclosan: a widespread environmental toxicant with many biological effects. *Annual review of pharmacology and toxicology*, 56, 251-272.

Zhao, F., Rezenom, YH, Russell, DH y Chu, KH (2012). Biodegradation of triclosan by a wastewater microorganism. *Researchwater*, 46 (13), 4226-4234

4 de junio de (2018). DECISIÓN DE EJECUCIÓN (UE) 2018/840 DE LA COMISIÓN. Diario Oficial de la Unión Europea.