



UNIVERSIDAD DE CHILE – FACULTAD DE CIENCIAS – ESCUELA DE CIENCIAS
AMBIENTALES Y BIOTECNOLOGÍA

**“ESTUDIO DEL COMPORTAMIENTO AMBIENTAL DE
PLAGUICIDAS USADOS EN CHILE MEDIANTE ESTIMACIONES
COMPUTACIONALES”**

Seminario de Título entregado a la Universidad de Chile en cumplimiento parcial de los
requisitos para optar al Título de:

Química Ambiental

CAROLINA MACARENA CONCHA RAMÍREZ

Director del Seminario de Título: Dr. Carlos A. Manzano

Julio, 2021

Santiago – Chile



INFORME DE APROBACIÓN SEMINARIO DE TITULO

Se informa a la Escuela de Pregrado de la Facultad de Ciencias, de la Universidad de Chile que el Seminario de Título, presentado por la **Srta. Carolina Macarena Concha Ramírez**

“Estudio del comportamiento ambiental de plaguicidas usados en Chile mediante estimaciones computacionales”

Ha sido aprobado por la Comisión de Evaluación, en cumplimiento parcial de los requisitos para optar al Título de Química Ambiental

Dr. Carlos A. Manzano D.
Director Seminario de Título

Comisión Revisora y Evaluadora

M. Cs. Sylvia V. Copaja C.
Presidente Comisión

Dr. Manuel A. Leiva G.
Evaluador

Santiago de Chile, Julio, 2021

AGRADECIMIENTOS

Primero que todo me gustaría agradecer a tres de las mujeres que más admiro y que son mi pilar fundamental en esta vida, mi mamá y mis hermanas, Francisca y Paula, gracias por acompañarme y apoyarme en cada decisión que tomo. Especialmente quiero agradecer a mi papá y mi mamá, por darme la oportunidad de seguir mis sueños y por siempre priorizar mi felicidad y bienestar, nada de estos habría sido posible sin ustedes, en verdad que las palabras me quedan cortas para agradecerles todo lo que hacen e hicieron por mí. Mamá, gracias por acompañarme siempre, por siempre creer en mí y por tu apoyo incondicional, por ser mi principal ejemplo en esta vida. Papá, gracias por haberme incentivado las ganas de aprender, cuestionarme las cosas y buscar respuestas, gran parte de este logro es gracias a ti, sé que de igual forma siempre me sigues acompañando en este y en cada paso que doy.

Al profesor Carlos Manzano, por guiar esta tesis. Muchas gracias por su tiempo y dedicación, por estar siempre dispuesto a ayudarme y a resolver mis dudas.

A las amigas que me dejó Juan Gómez Millas. Dina, mi primera amiga cuando llegué a ciencias y que no nos separamos más desde el primer año, Vale, la mejor compañera de laboratorio de la vida, y Sabrina, la hermanita de vida, que me entiende como nadie. Muchas gracias por acompañarme estos años, por los buenos momentos, por tantas risas, consejos y apoyo, conocerlas fue de las mejores cosas que me dio la universidad. Aunque este último año no nos hemos podido ver mucho nunca he dejado de sentir las cerca, las quiero.

A mis amigos de la vida, que me han apoyado en todo este proceso y desde siempre. Javiera, gracias por tanto durante estos 15 años de amistad, gracias por estar presente

en este y en la mayoría de los logros en mi vida. Sergio y Leslie, los mejores amigos y los principales asesores de tesis, gracias por todos los consejos, tanto técnicos como emocionales, y por todo su apoyo siempre.

Por último, agradecer a mi compañero de cuarentena, de risas y de vida, Ignacio, gracias por entregarme tanta paz, amor, contención, apoyo e incontables alegrías durante los últimos años de universidad y especialmente en estos meses de tesis, por aconsejarme, apoyarme y escucharme siempre que lo necesité.

Finalmente, agradecer al proyecto CONICYT-FONDECYT Iniciación 11180151 del Dr. Carlos Manzano por el financiamiento de este seminario de título.

INDICE

AGRADECIMIENTOS	ii
INDICE	iv
INDICE DE TABLAS	vi
INDICE DE FIGURAS	vii
LISTA DE ABREVIATURAS	viii
RESUMEN	ix
ABSTRACT	xi
I. INTRODUCCIÓN	1
1.1 Antecedentes generales.....	1
1.1.1 Comportamiento ambiental de los contaminantes orgánicos	1
1.1.2 Estimación del comportamiento ambiental	3
1.1.3 Contaminantes Orgánicos Persistentes	6
1.1.4 Bifenilos Policlorados (PCB) como estándares de comparación	7
1.1.5 Compuestos orgánicos de uso cotidiano: Casos Internacionales.....	8
1.2 Antecedentes Específicos	10
1.2.1 Plaguicidas	10
1.2.2 Dinámica de los plaguicidas en el medioambiente	15
1.2.3 Plaguicidas Altamente Peligrosos (PAP).....	17
1.2.4 Agricultura y uso de plaguicidas en Chile.....	18
1.2.5 Autorización de plaguicidas en Chile	19
1.2.6 Problemática de los plaguicidas en Chile.....	20
1.3 Objetivos	24
1.3.1 Objetivo General.....	24
1.3.2 Objetivos Específicos.....	24
II. MATERIALES Y MÉTODOS	25
2.1 Programas utilizados y principios de funcionamiento	25
2.1.1 Interfaz EPI <i>Suite</i>	25
2.1.2 OECD Pov & LRTP <i>Screening Tool</i>	30
2.1.3 Otros programas.....	31
2.2 Plaguicidas utilizados en Chile y sus propiedades fisicoquímicas	32
2.3 Puntaje P-B-LRT	33

2.4 Análisis de productos de degradación en plaguicidas con probabilidad de degradación rápida	34
2.5 Generación de lista de plaguicidas prioritarios	34
III. RESULTADOS Y DISCUSIÓN	35
3.1 Base de datos	35
3.2 Resultados EPI Suite y “OECD Pov & LRTP <i>Screening Tool</i> ”	36
3.2.1 Coeficientes de distribución	36
3.2.2 Tiempos de vida media	42
3.2.3 Persistencia Total (<i>Pov</i>)	47
3.2.4 Bioacumulación	49
3.2.5 Eficiencia de Transporte (<i>TE</i>)	51
3.2.6 Puntaje <i>P-B-LRT</i>	53
3.3 Compuestos prioritarios.....	54
3.4 Productos de degradación.....	60
3.5 Comparación con otros estudios	63
3.6 Utilidad, limitaciones y mejoras	67
IV. CONCLUSIONES	69
V. BIBLIOGRAFÍA	71
ANEXOS	78

INDICE DE TABLAS

Tabla 1 Plaguicidas por tipo de organismo controlado (Benitez, 2012)	11
Tabla 2 Clasificación de plaguicidas según familia química (Ramírez, 2001).....	11
Tabla 3 Clasificación de plaguicidas según toxicidad (Ramírez, 2001)	12
Tabla 4 Clasificación de plaguicidas según persistencia (CICLOPLAFEST, 1991)	13
Tabla 5 Clasificación de plaguicidas según su formulación (Sánchez, 1984).....	13
Tabla 6 Clasificación de plaguicidas según aplicación (Cid, 2014)	14
Tabla 7 Rangos de tiempo de biodegradación obtenidos a partir de BOWIN3.....	29
Tabla 8 Resultados logKow	36
Tabla 9 Resultados logKoa.....	38
Tabla 10 Resultados logKaw	39
Tabla 11 Resultados para tiempo de vida media atmosférico	42
Tabla 12 Tiempo de vida media en agua ($t_{1/2w}$) a partir de BOWIN3	44
Tabla 13 Resultados para tiempo de vida media en agua.....	44
Tabla 14 Resultados para tiempo de vida media en suelo	46
Tabla 15 Resultados Pov.....	47
Tabla 16 Resultados logBAF	50
Tabla 17 Resultados TE	51
Tabla 18 Resultados puntaje P-B-LRT.....	53
Tabla 19 Plaguicidas prioritarios	54
Tabla 20 Estructuras plaguicidas con 6 propiedades sobre rango de PCBs	55
Tabla 21 Estructuras plaguicidas con 5 propiedades sobre rango de PCBs	56
Tabla 22 Estructuras plaguicidas con 4 propiedades sobre rango de PCBs	57
Tabla 23 LogKow, logKoa y logKaw para productos de degradación.....	60
Tabla 24 $t_{1/2a}$, $t_{1/2w}$ y $t_{1/2s}$ para productos de degradación.....	61
Tabla 25 Pov, logBAF, TE y puntaje P-B-LRT para productos de degradación.....	61
Tabla 26 Estructura productos de degradación prioritarios	62
Tabla 27 Comparación de puntaje P-B-LRT con Zhang (2020) para plaguicidas prioritarios.....	64
Tabla 28 Comparación con Zhang (2020) por grupo de compuestos.....	65
Tabla 29 Comparación de compuestos sobre PCBs con Zhang (2020)	65

INDICE DE FIGURAS

Figura 1 Estructura PCB	8
Figura 2 Dinámica de plaguicidas en el suelo (Modificado de Cabrera, 2008)	16
Figura 3 Pantalla de entrada de EPI Suite	25
Figura 4 Mecanismos de ingreso y eliminación del compuesto en peces utilizado por BCFBAF (Modificado de Arnot y Gobas, 2006)	27
Figura 5 Parámetros de entrada para "OECD Pov & LRTP Screening Tool", ejemplo tolueno (Scheringer, 2009)	30
Figura 6 a) Distancia de Viaje Característica, b) Eficiencia de Transporte (Modificado de Scheringer, 2009)	31
Figura 7 Distribución de plaguicidas autorizados según uso	35
Figura 8 Distribución de plaguicidas autorizados según tipo de compuestos	36
Figura 9 Histograma de frecuencias de logKow	37
Figura 10 Histograma de frecuencias de logKoa	38
Figura 11 Histograma de frecuencias de logKaw	40
Figura 12 Distribución plaguicidas (Obtenido de: https://environsci.shinyapps.io/ChemicalPartitioningSpace/)	40
Figura 13 Movilidad de plaguicidas según criterio de la FAO	42
Figura 14 Histograma de frecuencias de $t_{1/2a}$	43
Figura 15 Histograma de frecuencias de $t_{1/2w}$	45
Figura 16 Histograma de frecuencias de $t_{1/2s}$	46
Figura 17 Distribución de plaguicidas autorizados según persistencia	48
Figura 18 Histograma de frecuencias de logPov	49
Figura 19 Histograma de frecuencias de logBAF	51
Figura 20 Histograma de frecuencias de logTE	52
Figura 21 Histograma de frecuencias de puntaje P-B-LRT	54

LISTA DE ABREVIATURAS

- AFC:** Método de Contribución átomo/fragmento.
- BAF:** Factor de Bioacumulación.
- COP:** Contaminante Orgánico Persistente.
- CTD:** Distancia de Viaje Característica.
- DL50:** Dosis Letal Media.
- EPA:** Agencia de Protección Ambiental de Estados Unidos.
- EPI Suite:** Interfaz de Programas de Estimación.
- FAO:** Organización de las Naciones Unidas para la Agricultura y Alimentación.
- GHS:** Sistema Globalmente Armonizado de Clasificación de Productos Químicos.
- GUS:** Índice de ubicuidad en aguas subterráneas (*Groundwater Ubiquity Score*).
- t_{1/2}:** Tiempo de Vida Media.
- LRTP:** Potencial Transporte a Gran Distancia.
- OECD:** Organización para la Cooperación y el Desarrollo Económico.
- P-B-LRT:** Persistencia-Bioacumulación-Transporte a Gran Escala.
- PAP:** Plaguicida Altamente Peligroso.
- PCB:** Bifenilos policlorados.
- Pov:** Persistencia Total.
- REACH:** Registro, Evaluación y Restricción de Sustancias Químicas.
- Res. Ext N°1557/2014:** Resolución 1557 Exenta Establece exigencias para la autorización de plaguicidas y deroga resolución N°3670/1999.
- SAG:** Servicio Agrícola Ganadero.
- TE:** Eficiencia de Transporte.

RESUMEN

En las últimas décadas ha empezado a surgir un mayor interés en conocer el comportamiento ambiental de ciertos compuestos orgánicos aprobados para su uso cotidiano, principalmente debido a que se han ido conociendo sus riesgos asociados y el daño que pueden generar tanto a la salud de las personas como al medioambiente. Debido al alto número de compuestos que se han sintetizado se hace difícil un análisis experimental de todos estos, por lo que resulta de utilidad el uso de estimaciones computacionales para evaluar su potencial persistencia, bioacumulación y transporte. El principal objetivo de este estudio es la estimación del comportamiento ambiental de los plaguicidas utilizados en Chile, con el fin de encontrar aquellos que presente un riesgo potencial para el medioambiente.

La metodología de trabajo consistió en la generación de una base de datos de plaguicidas autorizados por el Servicio Agrícola Ganadero (SAG), la utilización del programa “EPI Suite” para estimar sus coeficientes de distribución, tiempos de vida media y bioacumulación, a partir de sus estructuras moleculares, y la utilización del programa “Pov & LRTP Screening Tool” para estimar su persistencia total y eficiencia de transporte en el medioambiente. Además, se obtuvo un puntaje que considera en conjunto persistencia, bioacumulación y transporte (puntaje P-B-LRT). Todos los datos fueron evaluados teniendo como criterio de referencia el valor reportado para un grupo de bifenilos policlorados (PCB), compuestos químicos reconocidos como Contaminantes Orgánicos Persistentes, con el fin de obtener una lista de plaguicidas prioritarios cuyas propiedades superan las de los PCB.

Los resultados mostraron que la distribución ambiental de los plaguicidas se da principalmente entre la materia orgánica y el agua, donde además presentaron los mayores tiempos de vida media y potencial transporte, lo que podría asociarse a una alta movilidad en suelo y lixiviaciones hacía aguas subterráneas. Algunos plaguicidas presentaron valores altos de bioacumulación, lo que también puede ser importante al encontrarse en un medio acuático. Basándose en estos análisis, se obtuvo una lista de 21 plaguicidas prioritarios comercializados en Chile, a los que se les pudo evaluar semejanzas en su estructura y sobre los cuales se propone un análisis experimental más detallado. Es importante tener en cuenta que estos análisis utilizan distintas aproximaciones y dan una idea general del comportamiento de los compuestos, sin embargo, en este no se consideran características particulares presentes en el medio ambiente de emisión.

ABSTRACT

In recent decades a greater interest has emerged in knowing the environmental behavior of some organic compounds approved for daily use, mainly because their associated risks and the damage they can cause to people's health and to the environment have become known. Due to the high number of compounds that have been synthesized an experimental analysis results difficult, making the use of computational estimates to evaluate potential persistence, bioaccumulation and transport very useful.

The main objective of this study is the estimation of the environmental behavior of pesticides used in Chile, in order to find those that have a potential risk for the environment. The methodology of work consisted on the generation of a database of pesticides authorized by the *Servicio Agrícola Ganadero* (SAG), the use of the "EPI Suite" program to estimate their distribution coefficients, half-life times and bioaccumulation from their molecular structures, and the use of the "Pov & LRTP Screening Tool" to estimate their overall persistence and transport efficiency in the environment. In addition to this, the P-B-LRT score was obtained, which considers equitably persistence, bioaccumulation and transport. All data were evaluated using as reference the value reported to Polychlorinated Biphenyls (PCB), a chemical group of compounds recognized as Persistent Organic Pollutants, in order to find a list of priority pesticides whose properties exceed that reference value.

The results showed that the environmental distribution of pesticides occurs mainly between organic matter and water, where they also had the longest half-life times and potential transport, which could indicate a high mobility in soil and possible leaching to groundwaters. Some pesticides showed a high bioaccumulation, which may be especially important if they are in an aquatic environment. From the analysis a list was obtained of

21 priority pesticides marketed in Chile that present similarities in their structures, which require a more detailed experimental analysis. It is important to consider that these analyses use approximations and are useful to have an idea of the behavior of the compounds, however, they do not consider particular characteristics present in the emission environment.

I. INTRODUCCIÓN

1.1 Antecedentes generales

1.1.1 Comportamiento ambiental de los contaminantes orgánicos

Una vez que un contaminante orgánico es emitido al medioambiente, este va a interactuar con los seres vivos y con otros compuestos presentes en el agua, suelo o atmósfera. Este comportamiento va a depender de distintos factores propios del contaminante: su estructura, solubilidad, coeficientes de distribución y presión de vapor; así como de factores propios del medioambiente: temperatura, humedad, luminosidad, entre otras. De esta forma, cada compuesto orgánico tendrá una dinámica propia (Verschueren, 1983). El estudio sobre este comportamiento ambiental sirve para anticipar su posible destino ambiental, es decir, dónde se encontrarán preferentemente una vez se muevan hacia el equilibrio después de haber sido emitidos (Verschueren, 1983). Existen ciertas características de los compuestos orgánicos que son útiles para poder evaluar su destino: la persistencia, bioacumulación y potencial transporte a gran distancia son algunos ejemplos.

La **persistencia ambiental** de un compuesto orgánico se define en términos de su biodegradabilidad en diferentes compartimientos del ecosistema como: agua, suelo o atmósfera (Goldenman, 2017). Esta corresponde a la capacidad de un compuesto de mantenerse en el medioambiente por un largo período de tiempo una vez emitido, debido principalmente a su resistencia a la degradación química y/o biológica. El principal problema asociado a la persistencia es que los compuestos orgánicos se pueden acumular en el medioambiente, llegando a alcanzar altos niveles de concentración y pudiendo convertirse en un factor de riesgo importante. Esta es una importante

característica por considerar ya que, si bien un compuesto orgánico puede no generar riesgos a bajas concentraciones, si es persistente en el medioambiente podría llegar a generar un alto impacto luego de acumularse progresivamente en el tiempo (Goldenman, 2017).

La **bioacumulación** corresponde a la acumulación de un compuesto en organismos vivos. Específicamente corresponde al consumo neto y retención de una sustancia química en un organismo considerando todas las vías de exposición (ingesta, dérmica, inhalatoria), todas las fuentes (agua, sedimentos, alimentos) y las vías de eliminación (excreción, metabolismo) (Weisbrod, 2007). La bioacumulación de un contaminante orgánico se encuentra ligada con su lipofilia, es decir, su afinidad por los lípidos, en donde a mayor lipofilia el compuesto presentará una mayor tendencia a bioacumularse en los tejidos grasos de diferentes organismos (Santos, 2016). Al bioacumularse, los compuestos orgánicos pueden llegar a incrementar sus niveles de concentración dentro de organismos vivos, así como también pueden ingresar a la cadena alimenticia y generar un efecto de biomagnificación (aumentar su concentración al avanzar en la cadena trófica), pudiendo llegar incluso hasta los seres humanos (Spacie, 1995). La bioacumulación de cada compuesto se indica a partir del Factor de Bioacumulación (*BAF*), el que compara su concentración en el organismo y su concentración en el medio ambiente, a partir de la fórmula en la ecuación (1)

$$BAF = \frac{C_{organismo}}{C_{agua}} = \frac{\text{masa compuesto orgánico } [\mu\text{g}] / \text{masa organismo } [\text{Kg}]}{\text{masa compuesto orgánico } [\mu\text{g}] / \text{volumen agua } [\text{L}]} \quad (1)$$

Donde $C_{organismo}$ corresponde a la concentración del compuesto orgánico dentro del organismo y C_{agua} la concentración del compuesto en el medio acuático, obteniendo un valor final en unidades de L/kg. Un valor $BAF > 1$ L/kg indica que la acumulación del compuesto orgánico en el organismo es mayor a la del medio (Garber, 2009).

El **Potencial Transporte a Gran Distancia** corresponde a la capacidad de un compuesto orgánico de trasladarse de un lugar a otro. Aquellos con un alto potencial de transporte pueden llegar a encontrarse en lugares lejanos a su fuente de emisión. Es importante considerar este factor ya que, si bien un contaminante orgánico podría no generar un impacto en su lugar de emisión, este podría afectar otros ambientes con distintas condiciones ambientales. Este transporte ocurre principalmente a través de la atmósfera, donde los compuestos orgánicos pueden viajar libremente adheridos a las partículas, lo que en muchos casos facilita su desplazamiento. Sin embargo, algunos pueden presentar un importante transporte a través de agua, en especial aquellos con baja presión de vapor (Scheringer, 2009). En general esta característica se encuentra ligada a la persistencia del compuesto, especialmente en la atmósfera, ya que un compuesto persistente, tendrá una mayor predisposición al traslado (Goldenman, 2017).

1.1.2 Estimación del comportamiento ambiental

Las propiedades mencionadas anteriormente se pueden estimar a partir de distintas propiedades fisicoquímicas asociadas a la estructura molecular de los compuestos orgánicos. Dos parámetros especialmente útiles para esto son los coeficientes de partición entre fases inmiscibles y sus correspondientes tiempos de vida media.

El **coeficiente de partición** corresponde a la relación de las concentraciones en equilibrio de una sustancia disuelta en un sistema bifásico de dos disolventes considerablemente inmiscibles (Verschueren, 2001). Este permite conocer la distribución del compuesto orgánico entre ambas fases, entregando una medida cuantitativa sobre su distribución preferente. En general se entrega su valor como logaritmo, debido a que el rango de valores puede ser muy amplio. Resultan de gran utilidad ambiental los

coeficientes de partición entre octanol y agua (K_{ow}), octanol y aire (K_{oa}), aire y agua (K_{aw}) y el coeficiente de distribución en suelo normalizado a su contenido de carbono orgánico (K_{oc}), ya que a partir de estas variables es posible tener una buena representación de la distribución de los compuestos orgánicos entre las principales matrices ambientales y, a su vez, entre las distintas fases presentes en estas. Estos coeficientes se representan como la concentración de un compuesto determinado en una matriz dividida para su concentración en la otra, como se muestra en las ecuaciones (2-5).

$$K_{ow} = \frac{\text{concentración en octanol}}{\text{concentración en agua}} \quad (2)$$

$$K_{aw} = \frac{\text{concentración en aire}}{\text{concentración en agua}} \quad (3)$$

$$K_{oa} = \frac{\text{concentración en octanol}}{\text{concentración en aire}} \quad (4)$$

$$K_{oc} = \frac{\text{coeficiente de distribución (Kd)}}{\% \text{ carbono orgánico}} \times 100 \quad (5)$$

El K_{ow} , que considera la distribución entre una matriz orgánica (representada por el octanol) y el agua, es de gran utilidad para evaluar si un compuesto orgánico en un medio acuático tendrá una mayor preferencia a permanecer disuelto en el agua o a acumularse en fases orgánicas (tejidos de los organismos o adherirse a partículas orgánicas). Además, será útil para evaluar la afinidad general del compuesto por matrices orgánicas y ayudará a conocer su comportamiento en el suelo y sus sedimentos (Baird, 2004). El K_{oa} estima si el compuesto orgánico permanecerá preferentemente en la fase gaseosa o se adherirá a partículas disponibles, lo que lo puede ayudar a estar disponible para

procesos de oxidación o de transporte de largas distancias (EPA, 2017). De *Kaw* se puede obtener información sobre el medio de transporte principal del compuesto orgánico (agua o aire), así como también sobre su tasa de volatización. Por último, *Koc* permite saber si al estar en suelo un compuesto estará fijo en este o si estará disponible para ser distribuido a otras matrices (Alfaro, 2013).

El **tiempo de vida media ($t_{1/2}$)** se define como el tiempo en el que un compuesto ha disminuido su concentración a la mitad de su valor inicial. Este tiempo va a depender de la matriz en la que se encuentre el compuesto orgánico, por lo que cada uno presentará un $t_{1/2}$ distinto en el aire, agua y suelo. En cada una de estas matrices el tiempo de vida media va a depender de factores como: la luz solar que es capaz de romper enlaces químicos, la microbiota presente que es capaz de degradar algunos compuestos orgánicos, el metabolismo de plantas y animales presentes que pueden incorporar al compuesto orgánico, la presencia de agua que puede reaccionar con los compuestos (hidrólisis) o disolverlos, fenómenos de oxidación atmosféricos, etc (Ney, 1995), al mismo tiempo estos factores van a afectar de distinta manera a cada compuesto según las características propias de estos, por ejemplo, su estructura, la que determinará su estabilidad en los distintos medios. El $t_{1/2}$ atmosférico de un compuesto orgánico se estima basándose en la tasa de reacción con el radical hidroxilo presente en la atmósfera. Por otro lado, el $t_{1/2}$ en el agua dependerá de la capacidad del compuesto orgánico de hidrolizarse, su degradación por bacterias presentes en el medio y su captura por los organismos vivos. En suelo va a depender de su absorción por parte de las plantas, su degradación bacteriana, su capacidad de adsorberse a la materia orgánica y arcillas presentes, entre otras (Goldenman, 2017). En cada caso hay que considerar que la degradación, además de la matriz, va a depender de las condiciones

particulares presentes como la ubicación geográfica, la temperatura, humedad, tipo de suelo, presencia de otros compuestos, entre otras. Por lo tanto, un $t_{1/2}$ obtenido experimentalmente en ciertas condiciones no va a ser necesariamente representativo a todas las condiciones posibles. Este valor nos dará pistas sobre la persistencia total del compuesto orgánico, así como también nos permite estimar dónde el compuesto podría presentar un efecto a largo plazo, ya que en las matrices en las que los compuestos presenten un alto $t_{1/2}$, su acumulación se verá favorecida.

1.1.3 Contaminantes Orgánicos Persistentes

Considerando los parámetros de persistencia, bioacumulación y potencial transporte, el Convenio de Estocolmo, que entró en vigor en 2004, creó la categorización de Contaminantes Orgánicos Persistentes (COPs), definidos por la Agencia de Protección Ambiental de Estados Unidos (EPA) como: *“...químicos tóxicos que generan un efecto adverso en la salud humana y en el medioambiente, y que al poder ser transportados por el aire y agua, pueden afectar a personas y al medio ambiente de lugares lejanos a su lugar de emisión y que son capaces de persistir por largos períodos de tiempo en el medio ambiente, pudiendo acumularse y pasar de una especie a otra, avanzando de esa forma en la cadena alimenticia...”* (EPA, 2009).

En este convenio se establecieron ciertos criterios que debe cumplir un compuesto para ser considerado como COP (ONU, 2017):

- i) Criterio de persistencia: $t_{1/2}$ agua > 2 meses;
 $t_{1/2}$ suelo > 6 meses;
 $t_{1/2}$ sedimentos > 6 meses.

- ii) Criterio de bioacumulación: *BCF* o *BAF* en especies acuáticas > 5000 L/kg;
En ausencia de lo anterior: $\log K_{ow} > 5$.
- iii) Criterio de transporte: $t_{1/2 \text{ aire}} > 2$ días.

Inicialmente se establecieron 12 compuestos orgánicos como prioritarios, debido a sus efectos dañinos, su presencia en el medioambiente y su persistencia en el cuerpo humano, a los que se les denominó como la “docena sucia”; con el tiempo se han ido añadiendo compuestos en modificaciones al Convenio. Estos compuestos se clasifican en 3 categorías: (1) Compuestos prohibidos, se busca eliminar su producción y uso; (2) Compuestos de uso restringido, los que se busca restringir su producción y uso y; (3) Producción inintencionada, los que se busca reducir, y si es posible eliminar (ONU, 2017). De los 12 contaminantes iniciales considerados como COPs, 8 corresponden a compuestos usados en la agricultura como plaguicidas, como por ejemplo el mirex o el dicloro difenil tricloroetano (más conocido como DDT), ambos prohibidos desde la década de los 70s (García, 2018). Si bien estos criterios son los decretados por el Convenio para determinar que un compuesto es un COP, existen otros criterios para evaluar su persistencia y potencial contaminación, como el Potencial de Bioacumulación y Contaminación Ártica (ACBAP) o el criterio del Reglamento de Registro, Evaluación y Restricción de Sustancias Químicas (REACH), desarrollado por la Unión Europea, para evaluar sustancias persistentes, bioacumulables y tóxicas (ECETOC, 2014).

1.1.4 Bifenilos Policlorados (PCB) como estándares de comparación

Los bifenilos policlorados (PCBs) son un grupo de compuestos aromáticos sintéticos con fórmula general $C_{12}H_{10-R}Cl_R$, y conformado por 209 compuestos individuales obtenidos

por la cloración del bifenilo en diferentes posiciones de su estructura (Fig. 1), pudiendo contener desde 1 hasta 10 átomos de cloro (CONAMA, 2004).

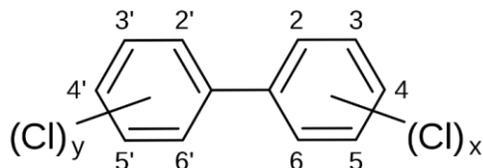


Figura 1 Estructura PCB

Los PCBs corresponden a productos químicos orgánicos sintéticos, es decir, no se producen naturalmente en el medioambiente. Fueron sintetizados por primera vez a mediados del siglo XIX, comenzando a producirse más extensamente en la década de los 50 (CONAMA, 2004). Dentro de sus principales usos están los líquidos dieléctricos en transformadores y condensadores, líquidos de traspaso térmico, líquidos hidráulicos, retardadores de llama en aceites lubricantes, entre otros (CONAMA, 2009). Los PCBs se encuentra dentro de la clasificación de COP, específicamente en el anexo A del Convenio de Estocolmo, debido a su alta persistencia, bioacumulación, y alta capacidad de transporte (CONAMA, 2004). Debido a sus características, los PCBs han sido utilizados como parámetros de comparación para evaluar la persistencia de otros compuestos orgánicos, siendo además utilizados como estándar de comparación entre diferentes estudios.

1.1.5 Compuestos orgánicos de uso cotidiano: Casos Internacionales

En las últimas décadas ha empezado a surgir un mayor interés en conocer el comportamiento ambiental de los cientos de compuestos orgánicos aprobados para su uso cotidiano, debido principalmente a que se han ido conociendo sus potenciales riesgos y daños ambientales asociados (Muir, 2006). Al mismo tiempo, cada vez se han

ido sintetizando nuevos compuestos orgánicos para ser usados industrialmente y en productos comerciales, una prueba de esto es que en los últimos 5 años el número de compuestos químicos registrados en el Servicio de Resumen Químico (CAS: *Chemical Abstract Service*) se ha duplicado y actualmente excede los 160 millones de sustancias registradas (Zhang, 2020). En países como Canadá, Estados Unidos y China existen ya estudios con el fin de estimar el comportamiento de los compuestos orgánicos que se encuentren en uso. El alto número de compuestos hace difícil un análisis experimental, por lo que en general todos estos estudios tienen en común la utilización de herramientas computacionales que permiten estimar sus propiedades, coeficientes de distribución y tiempos de vida media. A partir de estos datos se puede anticipar su comportamiento y evaluar sus potenciales riesgos de acumulación, transporte o persistencia.

A partir de este tipo de análisis, Zhang (2020) encontró que un 10% del total de 14 938 compuestos orgánicos estudiados, que se encuentran autorizados para su comercialización, presentaron un valor elevado para bioacumulación, persistencia y potencial de transporte a gran distancia. Además, se encontró que un 4%, 16% y 35% obtuvieron valores de persistencia, bioacumulación y potencial transporte, respectivamente, iguales o mayores a los PCBs, llegando a la conclusión que un número importante de compuestos utilizados comúnmente estarían sobrepasando los niveles de un COP. Sumado a este estudio se encuentra Howard (2010) y Muir (2006), en los que también se estima el comportamiento de una serie de compuestos de uso común a partir de estimaciones computacionales. Todos estos estudios han demostrado entregar una buena primera aproximación para la priorización de compuestos antes de un estudio experimental más detallado.

1.2 Antecedentes Específicos

1.2.1 Plaguicidas

Los plaguicidas sintéticos corresponden a uno de los mayores contaminantes de origen antrópico presentes en el medioambiente (Konstantinou, 2006). Su uso más frecuente es en el sector agrícola (85% del total), sin embargo, también son utilizados en otros sectores como en salud pública, uso doméstico, ganadería, tratamiento de estructuras y mantenimiento de áreas verdes, entre otros (Ramírez, 2001).

La Organización de las Naciones Unidas para la Agricultura y Alimentación (FAO) define un plaguicida como una *“sustancia, o mezcla de ellas, destinada a prevenir, destruir o controlar plagas”*, incluyendo dentro de esta definición a reguladores de crecimiento de plantas, defoliantes, desecantes, agentes para reducir la densidad de la fruta, agentes para evitar la caída prematura de la fruta y sustancias aplicadas a los cultivos antes o después de la cosecha, para proteger el producto contra el deterioro, durante el almacenamiento y transporte (Benitez, 2012). Asociado a estos beneficios en la agricultura, hay que considerar que estos compuestos corresponden a sustancias tóxicas, creadas para interferir en algún sistema biológico en particular y que, en su mayoría, presentan una baja selectividad, afectando no solo a la especie objetivo, sino que simultáneamente y en mayor o menor grado, a otros seres vivos presentes en el medioambiente (Ramírez, 2001). Además, su uso indiscriminado puede provocar la contaminación de suelo, aire y agua, alterando el equilibrio ecológico. (Benitez, 2012). Un plaguicida cuenta con un ingrediente activo, encargado de generar el efecto deseado al interactuar con la especie de interés, y con otros ingredientes agregados correspondientes a diluyente, aditivos e impurezas, los que constituyen una gran porción

del producto y sus efectos nocivos podrían superar a los del propio ingrediente activo (Ramírez, 2001). Un ejemplo es el uso como aditivo de tetracloruro de carbono y cloroformo (Benitez, 2012).

Los plaguicidas se clasifican en función a diversos criterios, por ejemplo, según el tipo de organismo que controla, el grupo químico que presenta, toxicidad, persistencia, formas de aplicación y formulación. Los tipos de plaguicidas clasificados según el tipo de organismo que controla se presentan en la Tabla 1.

Tabla 1 Plaguicidas por tipo de organismo controlado (Benitez, 2012)

Tipo de Plaguicida	Organismo que busca controlar
Insecticida	Insectos
Acaricida	Ácaros, garrapatas
Nematicida	Nemátodos
Molusquicida	Moluscos
Rodenticida	Roedores
Avicida	Aves
Bacteriostáticos y bactericida	Bacterias
Fungicida	Hongos
Herbicida	Plantas indeseadas

La clasificación por composición química considera diversas familias de compuestos orgánicos e inorgánicos. En la tabla 2 se muestran las familias de compuestos más comunes en los plaguicidas, sus características generales y algunos ejemplos.

Tabla 2 Clasificación de plaguicidas según familia química (Ramírez, 2001)

Familia química	Características	Ejemplos plaguicidas
Organoclorados	Hidrocarburos clorados, alta estabilidad física y química, insolubles en agua, no volátiles, solubles en soluciones orgánicas. Altamente persistente, baja biodegradabilidad	DDT, aldrín, endosulfán, endrín

Organofosforados	Esteres, amidas o tioles derivados de ácidos fosfóricos. Se degradan por oxidación e hidrólisis. Solubles en agua, poco acumulables en el organismo.	Paratión, diclorvos, malatión
Carbamatos	Derivados del ácido carbámico. Relativamente inestables, tiempo corto de persistencia ambiental, cuentan con cierta selectividad. Se degradan por oxidación.	Carbarilo, metomilo, propoxur
Piretroides	Obtenidos por el secado, molienda y pulverización de la flor del crisantemo. Selectividad relativa, baja toxicidad en organismos no blancos. Rápidamente degradables en el medio ambiente, poca tendencia a acumularse en tejidos	Cipermetrina, fenvalerato, permetrina

La clasificación toxicológica fue establecida por la Organización Mundial de Salud (OMS) en 1978 y se refiere al grado de peligrosidad de un plaguicida, es decir, su capacidad de producir un daño agudo a la salud cuando se dan una o múltiples exposiciones en un tiempo relativamente corto (CEPIS, 2016). Esta clasificación se basa principalmente en la Dosis Letal Media (DL50), definida como la cantidad de sustancia que es necesario ingerir de una sola vez para producir la muerte del 50% de los animales de ensayo (Benitez, 2012). Hay que mencionar que la DL50 mide solo la toxicidad aguda de los plaguicidas, no su toxicidad crónica (la que surge de pequeñas exposiciones diarias a lo largo del tiempo). La clasificación por toxicidad de los plaguicidas se muestra en la tabla 3.

Tabla 3 Clasificación de plaguicidas según toxicidad (Ramírez, 2001)

Clase	Toxicidad
Clase IA	Extremadamente peligrosos
Clase IB	Altamente peligrosos
Clase II	Moderadamente peligrosos
Clase III	Ligeramente peligrosos

La clasificación según su persistencia ambiental, la que se mide en función del tiempo de vida media de efectividad, se muestra en la tabla 4.

Tabla 4 Clasificación de plaguicidas según persistencia (CICLOPLAFEST, 1991)

Persistencia	Vida Media
Ligeramente persistente	Menos a 4 semanas
Poco persistente	De 4 a 26 semanas
Moderadamente persistentes	De 27 a 52 semanas
Altamente persistente	De 1 a 20 años
Permanente	Mayor a 20 años

En el caso de la persistencia, complementariamente al tiempo de vida media, es necesario considerar también la frecuencia de aplicación, ya que, si esta última es menor a su persistencia, estos van a tender a acumularse tanto en suelos como en la biota (CICLOPLAFEST, 1991).

La clasificación según su formulación se refiere al estado de presentación del plaguicida, donde los grupos que se consideran y sus principales características se muestran en la tabla 5.

Tabla 5 Clasificación de plaguicidas según su formulación (Sánchez, 1984)

Formulación	Características
Polvos para espolvoreo y humectables	Productos finamente divididos constituidos por el plaguicida mezclado con un material inerte.
Granulados	Productos preparados con materias inertes en forma de granos de pequeño tamaño, pueden aplicarse directamente al suelo
Líquidos para pulverizar o diluir	Preparaciones en las que el plaguicida líquido está disuelto, generalmente, en un disolvente derivado del petróleo

Líquidos emulsionables	Preparaciones en las que el plaguicida líquido está disuelto junto con los emulgentes que hacen posible la formación de una emulsión estable cuando se diluye o se agita en agua
Emulsiones	Productos preparados en forma de emulsión que se aplica directamente previa disolución en agua

Por último, las formas más comunes de aplicación de plaguicidas se muestran en la tabla

6.

Tabla 6 Clasificación de plaguicidas según aplicación (Cid, 2014)

Aplicación	Característica
Fumigación	El producto se aplica en forma de gas, así como también un tipo de líquido que en contacto con la humedad produce la liberación de un gas.
Espolvoreo	El producto se aplica en forma de polvo. Presenta dificultades para distribuirse homogéneamente
Nebulización	Generación de gotas muy pequeñas para que queden suspendidas en el aire
Inyección	Aplicación de un líquido al suelo mediante inyectores
Aplicación por contacto	Dispositivos de cuerda son embebidos con el producto que mojan las malezas sin tocar el cultivo
Pulverización	El caldo de pulverización se divide mediante un proceso mecánico en millones de gotas que son colocadas sobre el cultivo

1.2.2 Dinámica de los plaguicidas en el medioambiente

El comportamiento de un plaguicida en el medioambiente depende de sus propiedades fisicoquímicas, mecanismos de transporte, mecanismos de acumulación, degradación, así como de las características y geografía del lugar en el que sea emitido (INECC, 2007). Dentro de las propiedades de los plaguicidas que se han encontrado útiles para predecir su destino ambiental se encuentra la solubilidad, presión de vapor, constante de Henry, estructura química, coeficiente de carbono orgánico (K_{oc}) y K_{ow} . Por otro lado, las características del medio ambiente que influirán en su comportamiento son, entre otras, el pH, la actividad química, la presencia de microorganismos, el clima y el contenido de materia orgánica. El plaguicida puede presentar distintos comportamientos en función de la magnitud de estas características (INECC, 2007).

Una vez aplicado, el plaguicida puede sufrir tres tipos de procesos: de transferencia, de acumulación y de transformación (Cabrera, 2008). Dentro de los procesos de transferencia se encuentra el paso a distintas matrices ambientales (suelo, agua, aire, plantas y animales), formando parte de un sistema dinámico donde intervienen fenómenos físicos, químicos y biológicos, que regulan su movilidad (Mora, 2017), dentro de estos procesos se encuentra la lixiviación, escorrentía y volatización. Los procesos de acumulación ocurren ya que al aplicarse un plaguicida este va dejando residuos, los que dependen principalmente de la dosis de aplicación anual del plaguicida y de su persistencia anual (Besnier, 1970) donde si esta aplicación se realiza de forma constante en el tiempo la cantidad de residuos va aumentando en el tiempo, acumulándose en el suelo y pudiendo alcanzar niveles peligrosos (Besnier, 1970). Dentro de estos procesos se encuentra la adsorción – desorción, absorción y persistencia (Mora, 2017). Los mecanismos de transformación implican un cambio en la estructura química del

plaguicida debido a procesos como fotodegradación, hidrólisis y biodegradación (Narvaez, 2012). Es importante considerar que cerca de un 50% de los productos de transformación de los plaguicidas presentan una toxicidad similar o mayor al compuesto parental (Raymond, 2001).

La figura 2 muestra un resumen de los distintos procesos que puede sufrir el plaguicida una vez emitido al medioambiente.

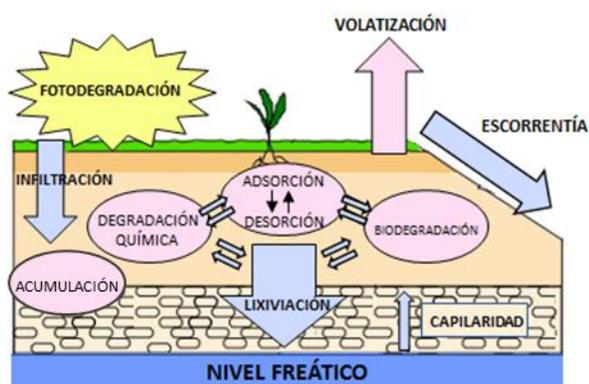


Figura 2 Dinámica de plaguicidas en el suelo (Modificado de Cabrera, 2008)

Con relación a los daños medioambientales asociados, Climent (2019) señala que cuando un plaguicida es aplicado en un cultivo menos de un 1% alcanza el organismo objetivo mientras que la fracción restante se distribuye por el follaje de las plantas, por el suelo, atmósfera, biota y sistemas acuáticos. Además, se ha estudiado que la precipitación presenta un rol importante en la entrada de plaguicidas a los cuerpos de agua, favoreciendo su movilidad (Palma, 2004). Sumado a esto, se ha visto que en las ciudades con un alto desarrollo agrícola los niveles de contaminación por plaguicidas en las aguas subterráneas van en aumento (CEPAL, 1990), pudiendo alcanzar distintos cuerpos de agua durante su aplicación, por escorrentía, lixiviación o por vertidos directos (lavado de maquinaria y eliminación de residuos) (Arias-Estévez, 2008).

1.2.3 Plaguicidas Altamente Peligrosos (PAP)

A partir de los años 70 se comenzaron a investigar los plaguicidas y a conocer sus efectos nocivos sobre la salud de las personas y el medioambiente, generando una nueva conciencia sobre el efecto de los agrotóxicos en la salud y el ambiente. Prohibiéndose en esta época una serie de plaguicidas que se encontraban en uso, como el caso del DDT, uno de los primeros plaguicidas sintetizado y que en sus inicios mostraba una alta efectividad como insecticida para el control de la malaria, la fiebre amarilla, el tifus y otras infecciones causadas por insectos, sin embargo, después se empezaron a conocer sus efectos adversos para el medio ambiente y la salud de las personas.

En los años 80, investigadores comienzan a denunciar los efectos tanto agudos como crónicos de los plaguicidas (Rozas, 2019). Donde en el año 2004, en el Convenio de Estocolmo, 8 plaguicidas entraron a formar parte de la “docena sucia” de COP prohibidos, correspondientes a: aldrín, clordano, dieldrín, endrín, heptacloro, mirex, toxafeno y el DDT. El año 2007 se agregaron nuevas sustancias, incorporando los plaguicidas lindano y clordecona.

Considerando sus características intrínsecas, propiedades físicas y químicas, mecanismo de acción y de transporte, además de su capacidad de provocar daño a corto o mediano plazo, la *Pesticide Action Network* (PAN Internacional) ha llegado a reconocer una nueva categoría de contaminantes emergentes: los Plaguicidas Altamente Peligrosos (PAP). La FAO define a los PAP como *“plaguicidas que presentan particularmente altos niveles de peligro agudo o crónico para la salud o el medioambiente... o están listados en acuerdos o convenciones internacionales*

vinculantes. Además, plaguicidas que figuren causando severo o irreversible daño a la salud o el medio ambiente bajo las condiciones de uso en un país". (Rozas, 2019).

Las organizaciones encargadas de las estrategias para tratar el problema de los PAP son principalmente la FAO, el Programa de las Naciones Unidas para el Medio Ambiente (PNUMA) y la OMS. Estos grupos formulan criterios para determinar si un plaguicida cumple con las características para ser considerado como PAP, basados principalmente en la clasificación de la OMS (clases IA o IB), los criterios tóxicos para la reproducción, carcinogenicidad y mutagenicidad (categorías 1A y 1B) del Sistema Globalmente Armonizado de Clasificación y Etiquetado de productos químicos (GHS), así como también si se encuentran considerados entre los plaguicidas enumerados en el Convenio de Estocolmo, en el Convenio de Rotterdam o en el Protocolo de Montreal. Además, se considera un criterio flexible para incluir plaguicidas que causen un daño severo o irreversible a la salud o al medioambiente bajo las condiciones de uso en un país.

1.2.4 Agricultura y uso de plaguicidas en Chile

En Chile la actividad agrícola es una importante actividad económica que ha tenido un gran aumento en los últimos 25 años, convirtiéndose en potencia mundial de la agroindustria (FEDEFruta, 2015). La agricultura corresponde a la segunda actividad económica con uso intensivo de recursos naturales que más aportan al producto interno bruto nacional (PIB) (3,1%), siendo solo superada por la minería (9,8%) (Zúñiga-Venegas, 2020). Esta actividad es especialmente importante en algunas regiones al centro-sur del país, como la VI y VII región, donde su aporte en el PIB agrícola nacional es de 18,7% y 13,9%, según datos obtenidos del año 2019 (ODEPA, 2019).

Ligada a esta actividad se encuentra inevitablemente un uso de plaguicidas. Según el último registro de ventas de plaguicidas del año 2012, en Chile se comercializaron aproximadamente 40 toneladas de plaguicidas, incluyendo funguicidas y bactericidas (47%), herbicidas (21%) e insecticidas (19%), entre otros (Zúñiga-Venegas, 2020). Además, la Agencia Chilena para la Calidad e Inocuidad Alimentaria (ACHIPIA), comisión asesora presidencial administrada por el Ministerio de Agricultura, estimó en el año 2017 que la fabricación nacional de plaguicidas es aproximadamente de 33 mil toneladas al año, mientras que el uso en el mismo año alcanzó un valor aproximado de 63 617 toneladas, considerando producción, exportación e importación (Cornejo, 2019). En Chile la organización encargada de controlar el uso, fabricación, importación y exportación de los plaguicidas es el Servicio Agrícola Ganadero (SAG), dependiente del Ministerio de Agricultura. Este organismo es el encargado de apoyar en el desarrollo de la agricultura, los bosques y la ganadería, a través del mejoramiento y protección de la salud de los animales y vegetales.

1.2.5 Autorización de plaguicidas en Chile

En Chile, la evaluación y autorización de los plaguicidas se encuentra regulado legalmente a través de la Resolución Exenta N°1557/2014 del Ministerio de Agricultura. Además, el SAG cuenta con una “Guía Orientadora sobre Requisitos y Procedimientos de la Resolución SAG N°1557/2014”, donde se resumen y explican los requisitos y procedimientos para llevar a cabo la autorización, la última versión actualizada de esta guía es del año 2018. En la resolución se indica que un plaguicida será autorizado si “*se demuestra que es efectivo para el fin que se destina y no entraña un riesgo inaceptable para la salud humana, animal ni para el medio ambiente*” (Res. Ext N°1557, 2014).

Para autorizar un plaguicida se debe enviar una solicitud de autorización, donde el proceso de evaluación consta de 3 etapas: (1) Verificación de documentación y verificación analítica; (2) Evaluación técnica de la información presentada y; (3) Revisión de etiqueta y resolución de autorización. Dentro de los estudios requeridos para la evaluación de las sustancias activas se encuentran: su identidad, sus propiedades fisicoquímicas, su utilidad, métodos analíticos, residuos en productos tratados, información respecto a su seguridad, toxicología, efectos sobre el medioambiente y efectos ecotoxicológicos (SAG, 2018). Dentro de los estudios de impacto sobre el medioambiente la resolución establece que se deben presentar estudios tanto para metabolitos como para productos de degradación, estos deben incluir: comportamiento en el suelo (considerando 3 tipos de suelos patrones), adsorción, desorción y movilidad de la sustancia activa y metabolitos, magnitud y naturaleza de los residuos remanentes, y comportamiento en el agua y en el aire (SAG, 2018). Actualmente la lista de Plaguicidas Autorizados del SAG cuenta con más de 400 productos autorizados, la que se encuentra actualizada al año 2021 y esta se encuentra disponible en su sitio web (www.sag.gob.cl).

1.2.6 Problemática de los plaguicidas en Chile

Si bien el SAG cuenta con normativas y un protocolo de autorización para plaguicidas, se han realizado estudios independientes en los que se presentan casos de contaminación en el medioambiente y de agro toxicidad asociados a su uso. En 2019, un informe de la Red de Acción de Plaguicidas y sus Alternativas para América Latina (RAP-AL) mostró que 102 de los plaguicidas autorizados en Chile se encuentran en la categoría de altamente peligrosos, considerando sus efectos en la salud de las personas y el medioambiente, según los sistemas de clasificación de la Unión Europea (UE) y de

la EPA. Además, 28 no están aprobados para su uso en la UE, 46 no lo están en otros países y 29 se encuentran registrados como cancerígenos según la EPA (Rozas, 2019). Sumado a esto, se han realizado estudios en los que se ha detectado la presencia de pesticidas en cuerpos de agua. Dutka (1996) detectó presencia de 4 plaguicidas (triazina, atrazina, metolacloro y benomilo) en aguas superficiales y sedimentos en Temuco y en la Cuenca del Río Rapel. Palma (2004) detectó simazina, hexazinona, ácido 2,4-diclorofenoxiacético (2,4-D), picloram y carbendazima en las aguas del Río Traiguén, en la Región de la Araucanía. Cooman (2005) reportó la presencia de atrazina en el Río Chillán. Giordano (2011) encontró residuos de diazinon, lindano, clorpirifos, cialotrina, cipermetrina y fenvalerato en el Río Itata, en la región del Ñuble. Retamal (2013) evaluó la presencia de 9 plaguicidas en el agua del Río Maipo, donde encontró que 7 de estos en concentraciones mayores a 0,1 µg/L, correspondiente al límite máximo establecido por la UE para plaguicidas en agua. Climent (2018) evaluó la presencia de 11 plaguicidas y 5 productos de degradación en la Cuenca del Río Cachapoal, donde se encontró la presencia de un 87% de estos en aguas superficiales, destacando los Ríos Cabras y Tahuilla, demostrando la vulnerabilidad de las fuentes de agua a la contaminación por plaguicidas y la necesidad de programas de monitoreo.

Por otro lado, otros estudios han mostrado efectos toxicológicos asociados a plaguicidas en distintos grupos poblaciones, como en trabajadores agrícolas (Muñoz-Quezada, 2017), trabajadores no agrícolas con residencia en sectores agrícolas (Muñoz-Quezada, 2017), mujeres embarazadas (Márquez, 2005), escolares (Muñoz, 2010), mujeres trabajadoras agrícolas de temporada (Zúñiga, 2007), recién nacidos (Rojas, 2000) y casos de aborto espontáneo (Contreras-Levicoy, 2005), entre otros. Corral (2017) estudió la discapacidad cognitiva en trabajadores agrícolas y en residentes cercanos a zonas agrícolas expuestos a plaguicidas en la Región de Coquimbo, específicamente en

el Valle del Elqui y Valle del Limarí. Sumado a este estudio, Muñoz-Quezada (2019) analizó la orina de 48 niños de una escuela en Talca, para medir la presencia de plaguicidas organofosforados y productos de degradación, detectando para-nitrofenol, un metabolito del paratión, metil-paration y nitrobenceno.

Además, a partir del 2005, año en que pasó a ser obligatoria la notificación por intoxicación aguda por plaguicidas, la Red de Vigilancia Epidemiológica de Intoxicaciones Agudas por Plaguicidas (REVEP) registra un promedio de 700 casos de intoxicación aguda al año. Sin embargo, se estima que por cada caso notificado hay al menos cinco sin notificar, por lo que en el país habría aproximadamente 3 500 casos de intoxicaciones anuales, los que tienen una mayor incidencia entre los meses de septiembre a marzo, correspondiente al período de mayor utilización de plaguicidas en el sector agrícola (Rozas, 2019). En el año 2017 se registraron un total de 672 casos de intoxicación aguda por plaguicidas, incluyendo casos de todas las edades y tipos de intoxicación. Involucrados a estos casos de intoxicación se encuentran 21 plaguicidas, destacando entre estos bromadiol (81 casos) y lamdacihalotrina (43 casos). De estos 21 plaguicidas, 8 se encuentran prohibidos en la Unión Europea (carbofurano, paraquat, permetrina, tetrametrina, metamidofos, brodifacoum, fenitrotion y cianamida). El mismo año se presentaron 25 brotes de intoxicación, es decir, intoxicaciones agudas que involucran a más de 2 personas, con un total de 230 personas afectadas, donde el 65,2% de los casos fue de origen accidental no laboral (Rozas, 2019).

A partir de toda esta información se puede ver que, si bien en Chile existe toda una normativa y procedimientos sobre la autorización y regulación en el uso de plaguicidas esta podría estar autorizando sustancias que generan efectos nocivos. Así como también es posible ver una falta de fiscalización, puesto que hay estudios donde se comprueba que existe un uso indiscriminado de plaguicidas en dosis mayores a las recomendadas

(Corral, 2017). Frente a todo esto, se hace interesante el análisis de los plaguicidas que se están utilizando en nuestro país para estudiar su comportamiento ambiental, predecir su destino ambiental y así sentar las bases para futuros trabajos experimentales.

1.3 Objetivos

1.3.1 Objetivo General

Identificar compuestos químicos utilizados en Chile en el sector agrícola que presenten potencial persistencia, bioacumulación y potencial transporte a gran distancia, pudiendo generar un alto impacto en el medio ambiente.

1.3.2 Objetivos Específicos

- Generar una base de datos de compuestos activos de las sustancias utilizadas como plaguicidas en el sector agrícola chileno.
- Caracterizar los plaguicidas en base a sus propiedades fisicoquímicas, utilizando sus coeficientes de distribución, tiempos de vida media y factor de bioacumulación.
- Obtener un valor para la persistencia total y para el potencial de transporte a gran distancia de cada uno de los plaguicidas.
- Generar una lista de plaguicidas prioritarios y de interés ambiental que se estén utilizando actualmente en Chile en el sector agrícola.

II. MATERIALES Y MÉTODOS

2.1 Programas utilizados y principios de funcionamiento

En este estudio se utilizaron dos programas computacionales: la Interfaz de Programas de Estimación (EPI) Suite y el “OECD Pov & LRTP Screening Tool” cuyos principios de funcionamientos son los siguientes:

2.1.1 Interfaz EPI Suite

EPI Suite corresponde a una interfaz desarrollada por la EPA y la Corporación de Investigación Syracuse (SRC). Está constituida por 14 programas de estimación de propiedades fisicoquímicas de compuestos orgánicos, utilizando como parámetro de entrada su estructura molecular (número CAS o notación SMILE) (EPA, 2020). La figura 3 muestra la pantalla de entrada de EPI Suite, con los distintos programas que lo conforman (al costado izquierdo) y los parámetros de entrada (sector superior).



Figura 3 Pantalla de entrada de EPI Suite

Dentro de los programas de estimación pertenecientes a EPI Suite que se utilizarán en este estudio se encuentra: KOWIN; KOAWIN; BCFBAF; AOPWIN; y BIOWIN, los que estiman los valores de $\log Kow$, $\log Kaw$ y $\log Koa$, BAF , $t_{1/2}$; y el rango de degradabilidad

del compuesto en agua. Cada uno de estos cuenta con una metodología de funcionamiento diferente, las que se explican en detalle a continuación.

KOWIN estima el logaritmo del coeficiente de distribución octanol-agua ($\log K_{ow}$), utilizando para esto el método de contribución átomo/fragmento (AFC). En esta metodología se divide la estructura de cada compuesto orgánico en fragmentos de átomos o grupos funcionales con valores conocidos de $\log K_{ow}$, a partir de los cuales se estima un $\log K_{ow}$ total (EPA, 2017). La metodología además considera un factor de ponderación para cada átomo/fragmento dentro de la molécula y un factor de corrección, cuyo valor viene dado a partir de las diferencias estudiadas entre $\log K_{ow}$ medido y estimado para cada compuesto orgánico.

KOAWIN estima el valor logaritmo del coeficiente de partición aire-agua ($\log K_{aw}$) y del coeficiente de partición octanol-aire ($\log K_{oa}$) en compuestos orgánicos. Para esto utiliza K_{ow} y la constante de Henry (H), ambos valores estimados automáticamente por EPI Suite a través de KOWIN y HENRYWIN, respectivamente. El valor de K_{aw} , también conocido como constante de Henry adimensional, se obtiene a partir de la relación: (Meylan, 1991)

$$K_{aw} = \frac{H}{RT}$$

Donde R corresponde a la constante de los gases ideales (0,082 L atm/mol K), T a la temperatura en condiciones normales en K (298 K) y H a la constante de Henry de cada compuesto en unidades de mol/atm L. Una vez estimado el valor K_{aw} , se estima K_{oa} a partir de la relación entre los 3 coeficientes de partición, como:

$$K_{oa} = \frac{K_{ow}}{K_{aw}}$$

BCFBAF estima el valor de *BAF* de compuestos orgánicos utilizando su $\log K_{ow}$. Este programa utiliza como metodología el modelo Arnot-Gobas, el que estima el valor de *BAF* en [L/kg] para compuestos químicos orgánicos no iónicos en peces, considerando 3 niveles tróficos: bajo, medio y alto. El modelo considera condiciones generales asociadas a cada nivel trófico, derivadas de condiciones ambientales representativas. Este modelo considera como mecanismos de bioacumulación al consumo y eliminación del compuesto por el pez en la superficie de sus branquias, su dieta, la eliminación fecal, la dilución por crecimiento y la biotransformación metabólica, así como también la biodisponibilidad del compuesto en cada nivel de la columna de agua (Fig. 4). Además de $\log K_{ow}$, el modelo utiliza en su estimación una constante de biotransformación metabólica normalizada al cuerpo de un pez de 10 gramos.

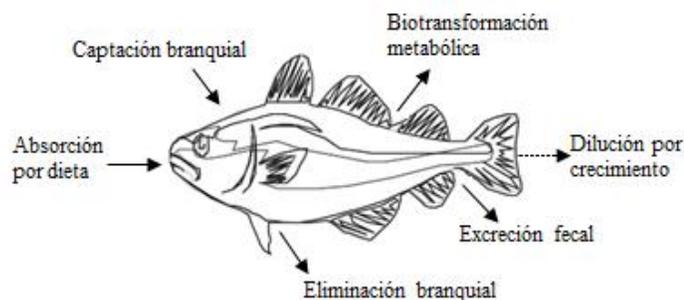


Figura 4 Mecanismos de ingreso y eliminación del compuesto en peces utilizado por BCFBAF (Modificado de Arnot y Gobas, 2006)

AOPWIN estima el tiempo de vida media atmosférico para un compuesto orgánico, basándose en la constante de reacción atmosférica con el radical hidroxilo. La estimación de la constante de reacción se basa en los métodos de relación estructura-actividad (SAR) propuestos por Atkinson (1987), los que se le aplican a los tiempos de reacción encontrados para cada fragmento del compuesto, según la base de datos de

AOPWIN. Como en general la concentración del compuesto en la tropósfera es muy baja y la concentración del radical hidroxilo, producido por la luz solar, se encuentra en un estado estable, esta última puede ser considerada como una constante y la reacción se puede considerar como una reacción de pseudo primer orden (Buerkle, 2001), donde el tiempo de vida media atmosférico viene dado por (EPA, 2017):

$$t_{1/2} = \frac{0,693}{k_{OH} [OH]}$$

Donde k_{OH} corresponde a la tasa de reacción estimada con el radical OH en $[\text{cm}^3/\text{moléculas s}]$, $[OH]$ a la concentración de moléculas de radical OH/ cm^3 y el valor 0,693 corresponde al valor de $\ln 2$, asociado al tipo de reacción. Los valores de concentración del radical OH utilizados por defecto por AOPWIN varían según el hemisferio, con un valor de 1.5×10^6 moléculas/ cm^3 para el hemisferio sur. Es importante mencionar que, ya que el radical OH necesita luz solar para su formación, AOPWIN considera días de 12 horas en la estimación del tiempo de vida media, en donde, por ejemplo, si entrega un tiempo de vida media de un compuesto de 24 horas, al transformar las unidades este equivaldrá a 2 días.

BIOWIN estima la probabilidad de una biodegradación rápida, aeróbica y anaeróbica, de un compuesto orgánico en la presencia de poblaciones de microorganismos mixtas. Se conforma por 7 modelos distintos (de BIOWIN1 a BIOWIN7), siendo BIOWIN2 y BIOWIN3 utilizados para evaluar la biodegradación y tiempo de vida media en agua de los compuestos, respectivamente. BIOWIN2 corresponde a un modelo de probabilidad no lineal de biodegradación en condiciones aeróbicas, sin considerar un medio en particular, entregando un valor que da información sobre la probabilidad del compuesto de no biodegradarse rápidamente. Este utiliza la metodología de coeficientes por fragmentos, sumando el valor del coeficiente individual de todos los fragmentos

presentes en el compuesto multiplicado por el número de veces cada uno de estos se presenta y, sumándole un valor constante de 3,0087 obteniendo un valor total igual a:

$$total = 3,0087 + \sum_{i=1}^k CF_k n_k$$

Donde CF_k corresponde al coeficiente del fragmento y n_k al número de veces en que el fragmento se presenta en la molécula (EPA, 2017). El valor final que entrega BIOWIN2 corresponde al resultado de la regresión no lineal, obtenida a partir de la exponencial del valor total según la fórmula:

$$Probabilidad = \frac{e^{total}}{(1 + e^{total})}$$

Si el valor de probabilidad obtenido es menor a 0,5 indica una alta probabilidad de que el compuesto no se degrade rápidamente, y viceversa.

BIOWIN 3 estima el rango de biodegradación completa del compuesto, es decir, su biodegradación a CO₂ y agua, en un medio acuático, utilizando también el método de fragmentación molecular. Como resultado BIOWIN3 entrega un número que representa el rango temporal de biodegradación, los que se muestran en la tabla 7

Tabla 7 Rangos de tiempo de biodegradación obtenidos a partir de BIOWIN3

Valor calculado por BIOWIN3	Tiempo de degradación total esperado
>4,75	Horas
>4,25-4,75	Horas a días
>3,75-4,25	Días
>3,25-3,75	Días a semanas
>2,75-3,25	Semanas
>2,25-2,75	Semanas a meses
>1,75-2,25	Meses
<1,75	Recalcitrante

2.1.2 OECD Pov & LRTP Screening Tool

Corresponde a un modelo desarrollado por la Organización para la Cooperación y el Desarrollo Económico (OCDE) y consiste en una representación global de 3 compartimientos: agua, aire y suelo, entregando información sobre la persistencia total de los compuestos orgánicos y su potencial de transporte a gran distancia. El modelo utiliza como valores de entrada los valores de $\log K_{aw}$, $\log K_{ow}$ y los $t_{1/2}$ atmosférica, en agua, y en suelo. La figura 5 muestra la ventana de entrada de datos en el programa, donde a la derecha de cada valor ingresado se encuentra una celda que representa si dicho valor se encuentra dentro de los rangos en los que es posible, para el modelo, realizar los cálculos correspondientes (color verde).

Single Chemical	
Name	Toluene
Molecular Mass	92.14
Log K_{aw}	-0.8
Log K_{ow}	2.8
Half Life in Air (h)	5.00E+01
Half Life in Water (h)	1.80E+02
Half Life in Soil (h)	5.40E+02
Reset	
Chemical Status:	<input checked="" type="checkbox"/>

Figura 5 Parámetros de entrada para "OECD Pov & LRTP Screening Tool", ejemplo tolueno (Scheringer, 2009)

Para sus cálculos, el modelo cuenta con un algoritmo que combina los $t_{1/2}$ en cada uno de los compartimientos con los coeficientes de distribución de cada compuesto orgánico. El modelo mide un tiempo de referencia en función a los procesos de degradación que este va sufriendo en cada escenario, la remoción física de cada compuesto orgánico y el intercambio entre compartimientos (Scheringer, 2009). Para todos los cálculos se

consideran tres escenarios de emisión: en suelo, en agua o en aire, y se entrega un resultado para cada parámetro asociado a cada uno de estos escenarios.

El modelo entrega el valor de la persistencia total (P_{ov}) del compuesto orgánico en unidades de días, lo que corresponde al tiempo de residencia total en el sistema, considerando los 3 compartimientos, los $t_{1/2}$ y su distribución. Además, se obtiene el potencial transporte a gran escala de dos formas: como distancia de viaje característica (CTD), correspondiente a la distancia que recorre un compuesto hasta reducir su concentración a aproximadamente un 37% de su concentración inicial; y como Eficiencia de Transporte (TE), correspondiente al porcentaje del compuesto que es depositado en la superficie luego de ser transportado desde su lugar de emisión (Fig. 6).

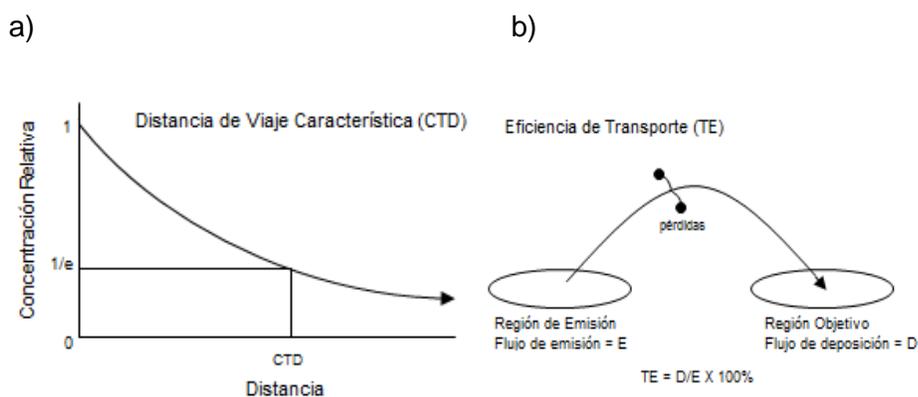


Figura 6 a) Distancia de Viaje Característica, b) Eficiencia de Transporte (Modificado de Scheringer, 2009)

2.1.3 Otros programas

Sumado a los programas mencionados, también se utilizó el software Microsoft Excel de Office para crear la base de datos, realizar cálculos y generar gráficos. Además, se utilizó la herramienta online elaborada por Zhang et. al. (2018) (<https://environsci.shinyapps.io/>)

ChemicalPartitioningSpace/), la que permite generar mapas de distribución de compuestos a partir de sus coeficientes de partición.

2.2 Plaguicidas utilizados en Chile y sus propiedades fisicoquímicas

Utilizando como fuente de información el “Listado de Plaguicidas Autorizados”, actualizados para el año 2020, del Servicio Agrícola Ganadero (SAG) de Chile, disponible en su sitio web, se obtuvo un listado de los productos plaguicidas que se encuentran autorizados para su uso en el país. A partir de esta información, se obtuvo los distintos compuestos presentes en cada formulación y se generó una planilla en Excel con todos los compuestos encontrados, eliminándose en caso de haber duplicados. Esta lista fue completada con información experimental sobre sus propiedades de utilidad (coeficientes de partición, tiempos de vida media y factor de bioacumulación), además de otras propiedades tales como su masa molar, densidad y solubilidad. Para esto se utilizó como fuente principal de información el sitio web PubChem (<https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/>) correspondiente a una base de datos del Instituto Nacional de Salud (NIH) de Estados Unidos creada el año 2004 y que contiene información de más de 10 millones de compuestos (Kim, 2016). En caso de no encontrarse registradas experimentalmente, se utilizó la plataforma EPI Suite para estimar dichas propiedades, particularmente KOWIN, KOAWIN, KOCWIN, BCFBAF, AOPWIN, y BIOWIN2, BIOWIN3, que fueron complementadas con las estimaciones sobre *Pov* y *TE*, obtenidos a partir de “*Pov & LRTP Screening Tool*”.

Se realizó un análisis estadístico de los datos, con el fin de ver el principal uso de los plaguicidas autorizados y las principales familias de compuestos que están siendo

utilizadas. Además, se analizó la dispersión, desviación estándar, máximos y mínimos para cada propiedad identificada o estimada.

2.3 Puntaje P-B-LRT

Para cada plaguicida estudiado se obtuvo un puntaje global que considera equitativamente tanto la persistencia, bioacumulación y potencial transporte a gran distancia, denominado puntaje *P-B-LRT*, propuesto por Muir (2019). Según este método, se debe obtener el valor logaritmo de *Pov*, *BAF* y *TE*, con el fin de evitar una ponderación muy elevada de alguno de ellos (Muir, 2019). Para el valor log de cada variable ($\log P_{ov}$, $\log BAF$ y $\log TE$) se calculó un valor z asociado, es decir, un valor que indica que tan alejado se encuentra cada valor del valor promedio para los plaguicidas, representado por la fórmula:

$$z_x = \frac{X - \mu_x}{\theta_x}$$

Donde X corresponde al valor logaritmo de la variable en cada caso, μ_x corresponde al valor promedio del logaritmo para los plaguicidas de estudio y σ_x a su desviación estándar. Se utiliza el valor z con el fin de identificar los compuestos que presentan un comportamiento más alejado al promedio. El puntaje *P-B-LRT* final para cada compuesto corresponde a la suma de los valores z obtenidos para cada uno de los 3 factores, según la fórmula obtenida de Muir (2019):

$$\text{Puntaje } P - B - LRT = z_{Pov} + z_{BAF} + z_{TE}$$

De la misma forma también se obtuvo un puntaje *P-B-LRT* para un grupo de PCBs, con el fin de utilizarlo como valor referencial estándar de comparación, basándose en el estudio realizado por Zhang (2020).

2.4 Análisis de productos de degradación en plaguicidas con probabilidad de degradación rápida

A partir de los datos entregados por BIOWIN2 se determinaron los plaguicidas que presentan una alta probabilidad de biodegradarse rápidamente, siendo importante en estos casos evaluar sus productos de degradación, con los que se generó una nueva base de datos y se aplicó la misma metodología de estudio.

2.5 Generación de lista de plaguicidas prioritarios

Para cada plaguicida, se evaluó el número de propiedades estudiadas que superan el valor referencial de los PCBs. Aquellos plaguicidas que superaron a los PCBs en al menos 4 propiedades fueron seleccionados para integrar una lista de plaguicidas de interés prioritario, a los que se les analizaron sus estructuras y sus características fisicoquímicas. Además, se buscó específicamente información de estudios realizados sobre estos compuestos.

III. RESULTADOS Y DISCUSIÓN

3.1 Base de datos

La base de datos obtenida cuenta con un total de 367 plaguicidas autorizados por el SAG para el año 2020, la lista completa de plaguicidas está disponible en el Anexo 1 y en la página web del grupo de investigación de la Universidad de Chile.

Su clasificación por uso se presenta en la figura 7, siendo en su mayoría herbicidas (32,44%), fungicidas (27,08%) e insecticidas (18,50%).

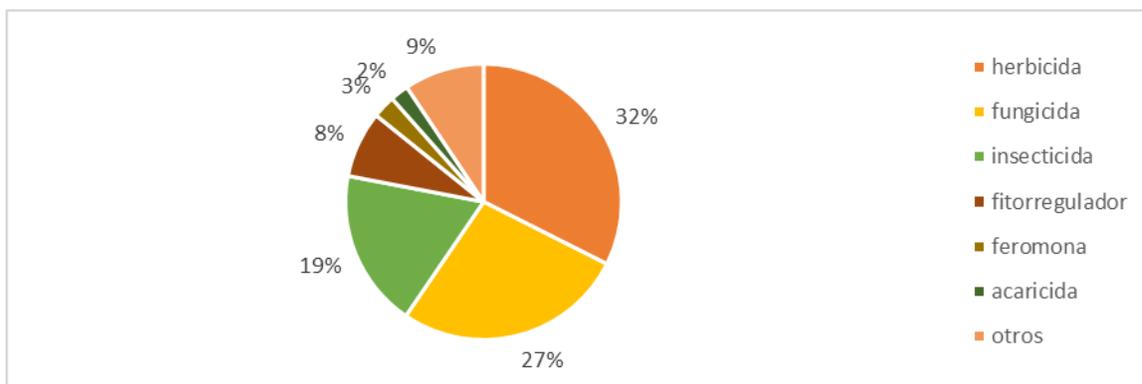


Figura 7 Distribución de plaguicidas autorizados según uso

Clasificados por tipo de compuestos predominan los carbamatos (5,72%), pesticidas organofosforados (5,72%), los piretroides (4,36%) y triazoles (4,09%). Sin embargo, se presenta una alta variabilidad de “otro” tipo de compuestos (Figura 8). Esta alta variabilidad puede indicar también una alta variabilidad en sus comportamientos, ya que esto depende de su estructura molecular.

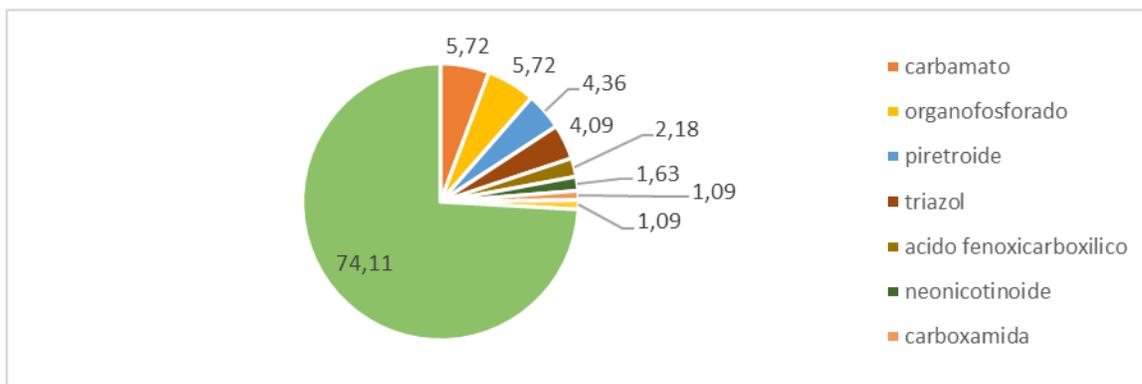


Figura 8 Distribución de plaguicidas autorizados según tipo de compuestos

3.2 Resultados EPI Suite y “OECD Pov & LRTP Screening Tool”

3.2.1 Coeficientes de distribución

Los resultados de los coeficientes de distribución obtenidos a partir de KOWIN y KOAWIN fueron los siguientes:

Kow: En la tabla 8 se muestran los resultados obtenidos para $\log Kow$. Se puede ver que en promedio los plaguicidas presentaron un valor positivo de $\log Kow$, es decir, una mayor preferencia por la materia orgánica frente al agua. Sin embargo, el rango de valores abarca tanto valores positivos como negativos, por lo que también se presentaron compuestos con una mayor afinidad por el agua. Además, el coeficiente de variación (0,94), que indica una alta variabilidad en los datos.

Tabla 8 Resultados $\log Kow$

Promedio	2,81
Desviación estándar	2,64
Máximo	8,61
Mínimo	-10,24
Mediana	3,03

Coefficiente de Variación	0,94
Valor referencia PCB	4,79

Los plaguicidas que presenten un $\log K_{ow}$ positivo, al estar presentes en agua, tendrán una tendencia a bioacumularse o a adherirse a las partículas presentes. Por otro lado, los plaguicidas que presenten un $\log K_{ow}$ negativo tendrán una mayor afinidad por el agua en comparación a la materia orgánica y, al estar en suelo, se encontrarían como parte de la solución suelo, estando más disponibles para transportarse, pudiendo lixiviar y escurrir. Comparando los valores obtenidos con el valor referencial para el grupo de los PCBs, 77 plaguicidas presentaron un valor mayor, correspondiente a un 20,98% del total. Esto se puede observar en la figura 9, que muestra la frecuencia de compuestos por rango de $\log K_{ow}$, señalando en color oscuro los plaguicidas que se encuentran sobre el valor mínimo de los PCB de 4,79.

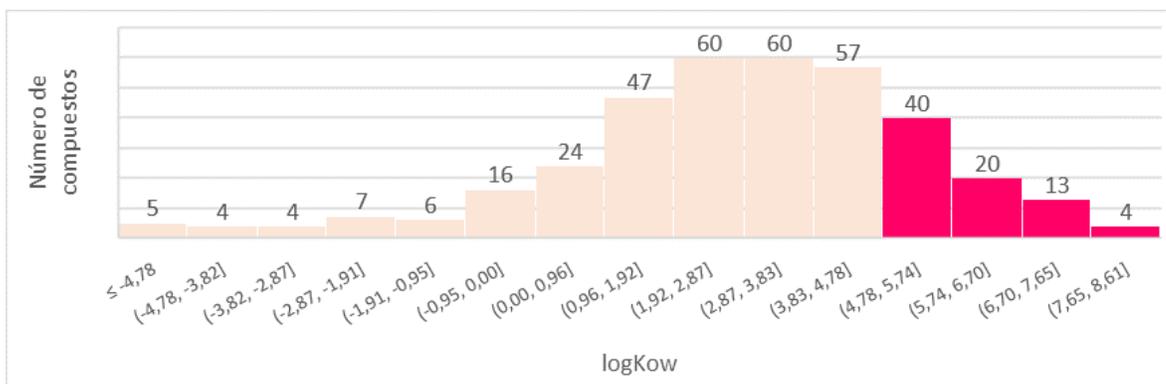


Figura 9 Histograma de frecuencias de $\log K_{ow}$

Como se puede ver a partir del histograma la mayor parte de los plaguicidas tendrá una menor afinidad por la materia orgánica que los PCBs, en comparación con el agua, lo que se puede asociar a una mayor movilidad de los plaguicidas y un menor potencial de bioacumulación, en comparación con los PCBs.

Koa: Para $\log K_{oa}$, el promedio obtenido por los plaguicidas fue de 11,22 con una desviación estándar de 4,63. Los resultados obtenidos se muestran en la tabla 9.

Tabla 9 Resultados $\log K_{oa}$

Promedio	11,22
Desviación estándar	4,63
Máximo	47,70
Mínimo	4,91E-4
Mediana	10,64
Coefficiente de Variación	0,41
Valor referencia PCB	6,79

El rango de valores obtenido indica que todos los plaguicidas presentaron un valor $\log K_{oa}$ positivo, es decir, todos tendrán una mayor afinidad por la materia orgánica en comparación a la atmósfera. Esto indica que, al estar presentes en la atmósfera probablemente se encuentren adheridos a las partículas, favoreciendo su transporte. La figura 10 muestra la frecuencia de compuestos por rango de $\log K_{oa}$, mostrando en color más oscuros los que se encuentran sobre el valor mínimo para los PCBs de 6,79.

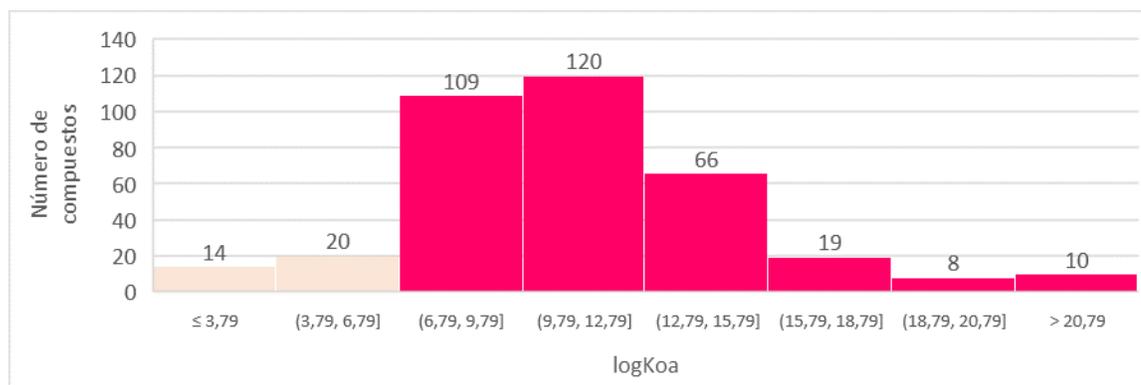


Figura 10 Histograma de frecuencias de $\log K_{oa}$

Comparando los valores obtenidos, 333 plaguicidas presentaron un $\log K_{oa}$ mayor a los PCBs, correspondiente a un 90,37% del total, indicando que la afinidad de los PCBs por la fase gaseosa será mayor, por lo que se esperaría que el transporte atmosférico de los plaguicidas se encuentre asociado al material particulado.

Kaw: Finalmente, para el $\log K_{aw}$, el promedio obtenido fue de -8,47 con una desviación de 5,32. La tabla 10 muestra los resultados obtenidos.

Tabla 10 Resultados $\log K_{aw}$

Promedio	-8,47
Desviación estándar	5,32
Máximo	3,14
Mínimo	-50,06
Mediana	-7,55
Coefficiente de Variación	0,63
Valor referencia PCB	-2,75

Se puede ver que la mayoría de los plaguicidas presenta un $\log K_{aw}$ negativo, presentando una mayor afinidad por el agua en comparación a la atmósfera, lo que se asocia a una baja volatilización. Además, como se mencionó anteriormente, los principales medios de transporte de los compuestos orgánicos ocurren por agua o por la atmósfera, por lo que de los valores obtenidos para $\log K_{aw}$ se puede inferir que en la mayoría los plaguicidas su principal medio de transporte será a través del agua. Al comparar con el valor de referencia de los PCBs, 28 plaguicidas presentaron valor de $\log K_{aw}$ mayor, correspondiente a un 7,63%.

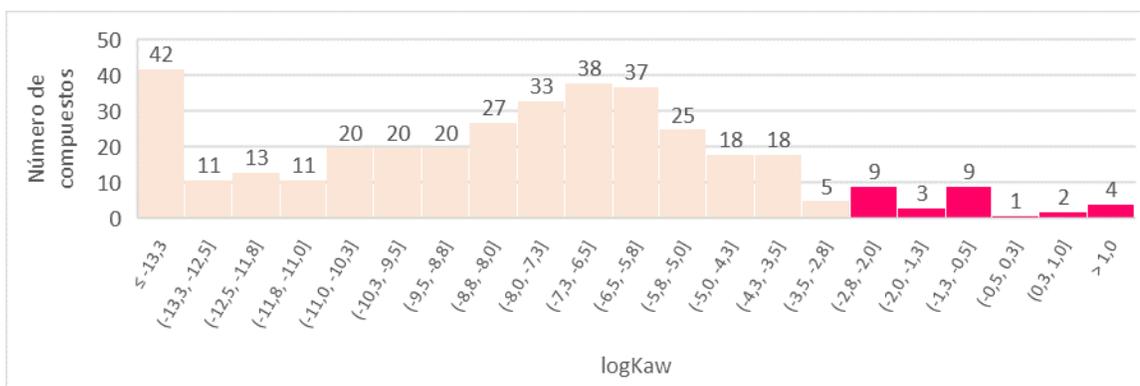


Figura 11 Histograma de frecuencias de logKaw

La figura 12 representa de manera conjunta lo mencionado anteriormente, mostrando la distribución de los plaguicidas entre las 3 matrices.

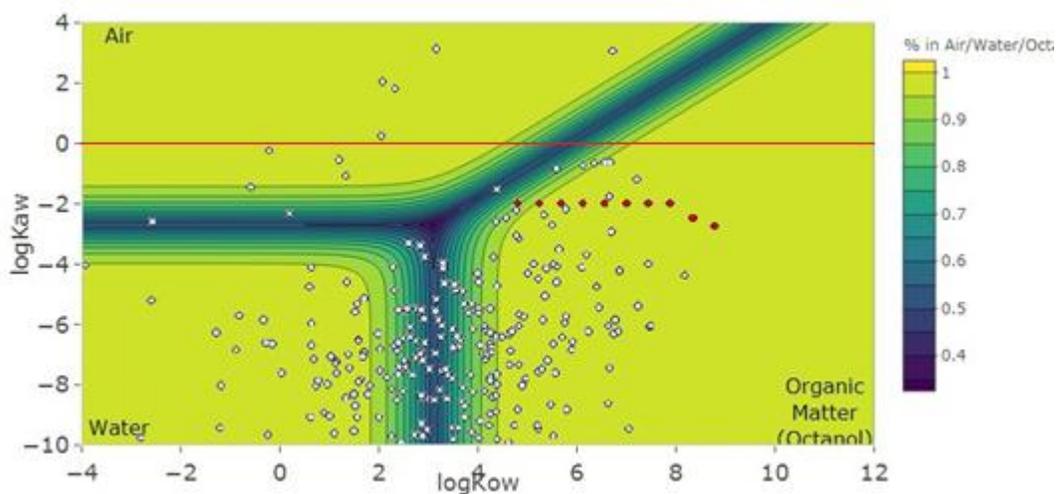


Figura 12 Distribución plaguicidas (Obtenido de: <https://environsci.shinyapps.io/ChemicalPartitioningSpace/>)

En la figura 12, cada compartimiento ambiental está representado en una esquina y el color de fondo corresponde a la abundancia relativa de cada plaguicida según lo indicado en la escala del costado derecho. Los puntos de color gris corresponden a los plaguicidas analizados y los puntos de color rojo representan a los PCBs utilizados como referencia. A partir del gráfico, se ve que la mayoría de los plaguicidas se encuentran

distribuidos en el agua y la materia orgánica, presentándose una menor parte en el aire, lo que también se comprobó al analizar los valores de $\log K_{oa}$ y $\log K_{aw}$.

Considerando que se está trabajando con plaguicidas, los que en general son emitidos al suelo, es importante considerar esta distribución ya que nos da información sobre la probabilidad de encontrar estos compuestos en solución en el suelo, pudiendo transportarse a cuerpos de agua cercanos, generando potenciales episodios de contaminación. Hay que considerar que un número importante de plaguicidas se encuentra en un punto intermedio entre ambos compartimientos, por lo que en estos casos estos estarán distribuidos en ambas fracciones del suelo. Para el grupo de los PCBs se puede ver que presentan una alta preferencia por la materia orgánica y, al contrario de los plaguicidas, presentan una mayor afinidad por la matriz atmosférica. Además, se puede observar que un grupo importante de los plaguicidas analizados presenta una distribución similar, lo que podría indicar un comportamiento ambiental similar a los PCBs.

Para ampliar el estudio sobre la distribución de los plaguicidas, se estimaron sus valores de K_{oc} , correspondiente a la adsorción del plaguicida asociado al carbono orgánico del suelo (a mayor K_{oc} , mayor retención por la materia orgánica, desfavoreciendo su movilidad) (Alfaro, 2013). Para la estimación de K_{oc} se utilizó KOCWIN de EPI Suite. Los valores obtenidos fueron analizados a partir de 2 criterios de estimación de lixiviación, el índice GUS (*Groundwater Ubiquity Score*) y el criterio de lixiviación de la FAO. Bajo el índice de GUS el 100% de los plaguicidas presentó un valor mayor a 2,8 y se encuentran en la categoría de probable lixiviación. Bajo el criterio de la FAO, un 31,6% y 25,6% de los plaguicidas se encuentran dentro del rango de moderada y ligeramente móvil, respectivamente, mientras que solo un 3% de estos se encuentra en la categoría

de inmóvil (Figura 13). Estos resultados indican que los plaguicidas estudiados van a presentar una potencial lixiviación, con riesgo de impactar las aguas subterráneas.

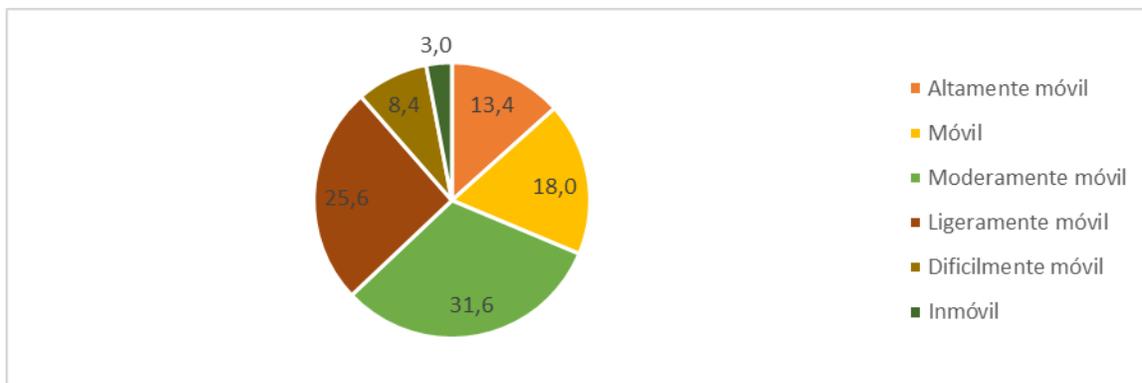


Figura 13 Movilidad de plaguicidas según criterio de la FAO

3.2.2 Tiempos de vida media

Los resultados de los tiempos de vida media atmosférica, en agua y suelo, obtenidos a partir de APOWIN y BIOWIN3 fueron los siguientes:

Atmósfera: La estadística de los resultados obtenidos a partir de EPI *Suite* para el tiempo de vida media atmosférico ($t_{1/2a}$) se muestra en la tabla 11.

Tabla 11 Resultados para tiempo de vida media atmosférico

Promedio	7,32 días
Desviación estándar	91,98 días
Máximo	1 731 días
Mínimo	0,0165 días
Mediana	0,31 días
Coefficiente de Variación	12,57
Valor referencia PCB	4,88 días

El valor promedio para los tiempos de vida media $t_{1/2a}$ fue de 7,32 días, siendo mayor al valor de referencia de los PCBs, de 4,88 días. Sin embargo, el valor de la mediana fue de 0,31 días, estando muy por debajo del promedio. Esto indica que la mayor cantidad de plaguicidas presenta un tiempo de vida media menor al del promedio y que solo hay un número pequeño de plaguicidas con tiempo de vida media atmosférica muy elevado que elevan el valor promedio. Esto se relaciona además con el alto valor obtenido para la desviación estándar y del coeficiente de variación que indican una alta dispersión en los valores obtenidos.

Un ejemplo de esto es el elevado valor del máximo, de 1 731 días, correspondiente al clorotalonil, además también se destacan el bromuro de metilo (280,88 días), fluazinam (114,12 días), cloropicrina (82,28 días) y dicloran (77,44 días). La figura 14 muestra la frecuencia de plaguicidas por horas de $t_{1/2a}$, donde se puede apreciar lo mencionado anteriormente, mostrando que solo 17 plaguicidas (4,63%) presentaron tiempos de vida media muy elevados y por sobre los PCBs, mientras que la mayoría presentó valores bajo los 2 días.

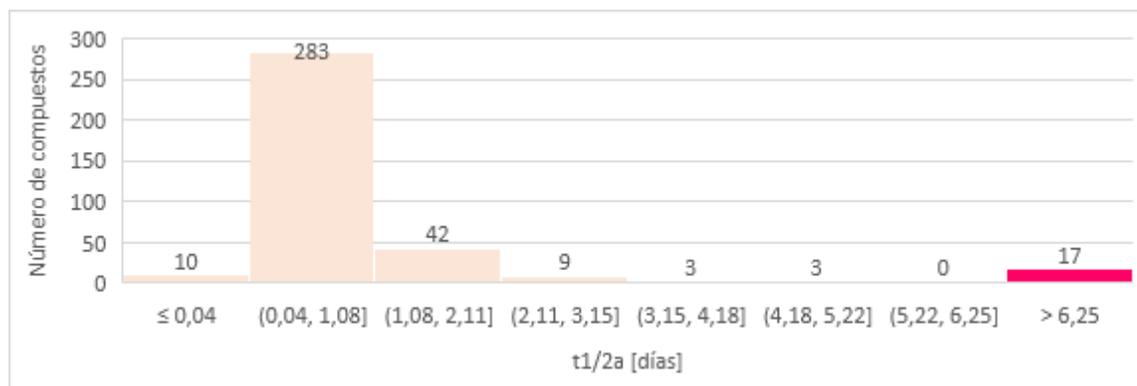


Figura 14 Histograma de frecuencias de $t_{1/2a}$

El Convenio de Estocolmo en su criterio de transporte, considera como referencia un $t_{1/2a}$ mayor a 2 días para considerar un compuesto con potencial transporte, el que fue superado por 33 de los plaguicidas (un 8,99% del total).

Aguas. A partir de los rangos de tiempo de degradación entregados por BIOWIN3 es posible obtener un valor de vida media en agua para cada plaguicida (Boethling, 1994). La conversión utilizada fue la propuesta por la EPA (Tabla 12), y ha sido comprobada experimentalmente en Aronson (2006).

Tabla 12 Tiempo de vida media en agua ($t_{1/2w}$) a partir de BIOWIN3

Valor BIOWIN3	Rango de degradación	Tiempo de vida media en agua [días]
>4.75	Horas	0,17
4.25-4.75	Horas-días	1,25
3.75-4.25	Días	2,33
3.25-3.75	Días-semanas	8,67
2.75-3.25	Semanas	15
2.25-2.75	Semanas-meses	37.5
1.75-2.25	Meses	120
<1.75	Recalcitrante I	180
1.25-1.75	Recalcitrante II	240
<1.25	Recalcitrante III	720

Para el tiempo de vida media en agua ($t_{1/2w}$) la estadística de los resultados se muestra en la tabla 13.

Tabla 13 Resultados para tiempo de vida media en agua

Promedio	137,99 días
Desviación estándar	173,59 días
Máximo	720 días

Mínimo	8,67 días
Mediana	120 días
Coefficiente de Variación	1,26
Valor referencia PCB	229,17 días

En este caso el promedio fue de 137,99 días, el que se encuentra por bajo el valor referencial de los PCB (229,17 días). Sin embargo, hay que considerar que la alta desviación estándar indica que habrá una gran variabilidad en los datos, y el valor máximo de 720 días, indica que se presentaron compuestos con $t_{1/2w}$ por sobre los PCBs. En la figura 15 se muestra la frecuencia de plaguicidas por rango de tiempo de vida media en agua en horas y su comparación con los PCBs. En este caso, como los $t_{1/2w}$ se obtuvieron a partir de una aproximación, solo se presentaron ciertos rangos de valores.

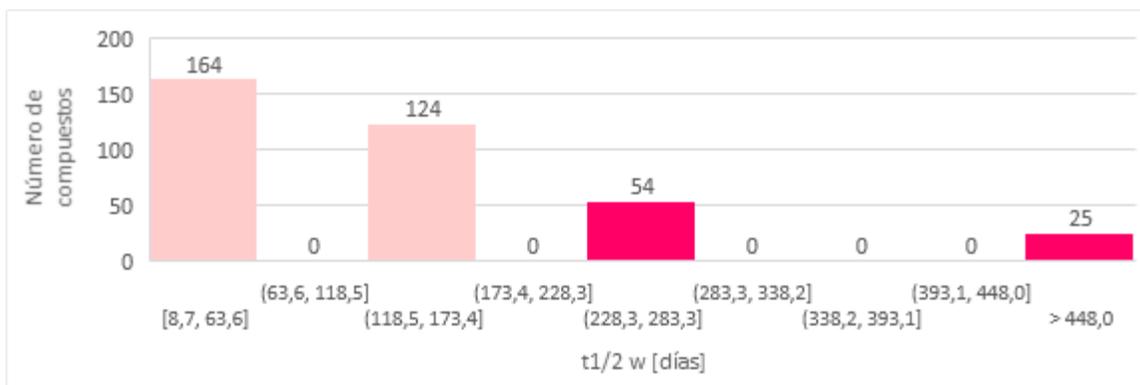


Figura 15 Histograma de frecuencias de $t_{1/2w}$

En este caso fueron 79 los compuestos que presentaron una vida media en agua mayor a la de los PCBs, correspondiente a un 21,53% del total los que, al no estar degradándose en agua, estarán mayor tiempo disponibles para ser ingeridos por los organismos, bioacumulándose, o siendo transportados.

Suelo: La EPA, en su Marco de Prevención de la Contaminación del año 2005, menciona que a partir del $t_{1/2w}$ se puede obtener el tiempo de vida media del en suelo ($t_{1/2a}$) (el doble). Los resultados de $t_{1/2s}$ se muestran en la tabla 14.

Tabla 14 Resultados para tiempo de vida media en suelo

Promedio	275,97 días
Desviación estándar	347,19 días
Máximo	1 440 días
Mínimo	17,34 días
Mediana	240 días
Coeficiente de Variación	1,26
Valor referencia PCB	708,33 días

En este caso, al igual que en el $t_{1/2w}$, el valor promedio, de 275,97 días, se encuentra bajo el valor referencial de los PCBs (708,33 días). Sin embargo, también presentaron una alta dispersión, demostrado por su alta desviación estándar. La figura 16 muestra la frecuencia por rango de $t_{1/2s}$.

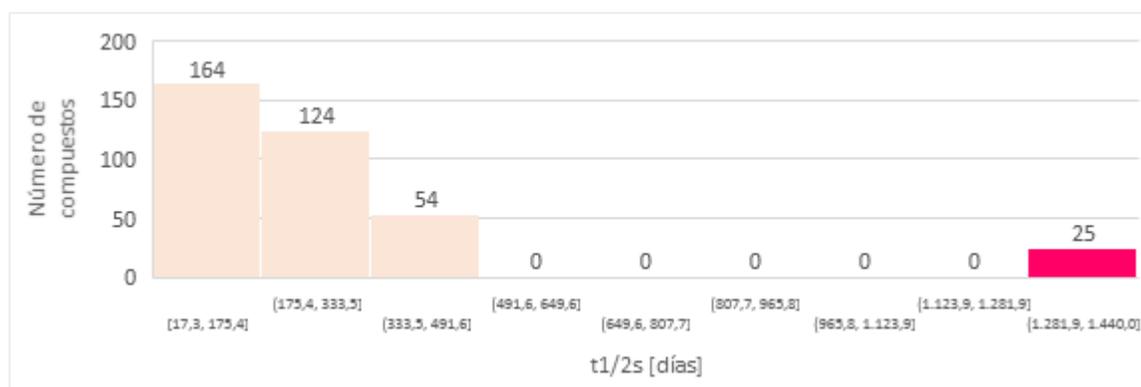


Figura 16 Histograma de frecuencias de $t_{1/2s}$

En este gráfico se ve que 25 plaguicidas presentaron un tiempo mayor de vida media en comparación a los PCBs, los que al mismo tiempo presentan un valor muy elevado en

comparación al resto: por sobre los 1250 días, es decir mayor a 3 años. La mayoría de los plaguicidas presenta un tiempo de vida media menor a 200 días, es decir, menor a 7 meses aproximadamente. Considerando los valores establecidos por el Convenio de Estocolmo es su criterio de persistencia ($t_{1/2w}$ mayor a 2 meses o $t_{1/2s}$ mayor a 6 meses), este fue superado por 203 plaguicidas, correspondiente a un 55,31%, los que estarían presentando un comportamiento persistente bajo los criterios establecidos internacionalmente. Además, considerando en conjunto el análisis de los coeficientes de distribución con el de los tiempos de vida media, las matrices donde principalmente se van a encontrar distribuidos los plaguicidas (agua y suelo) son las mismas donde se presentaron los mayores sus tiempos de vida media.

3.2.3 Persistencia Total (*Pov*)

Los resultados de la persistencia total de los compuestos, obtenidos a partir de “OECD *Pov & LRTP Screening Tool*” se muestran en la tabla 15.

De los 367 compuestos analizados, el promedio de persistencia total fue de 326,7 días, encontrándose dentro del rango de moderadamente persistente, con una desviación estándar igual a 435,72 días.

Tabla 15 Resultados Pov

Promedio	326,70 días
Desviación estándar	435,72 días
Máximo	2 074,66 días
Mínimo	12,19 días
Mediana	189,52 días
Coefficiente de Variación	1,33
Valor referencia PCB	727,37 días

De la tabla 15 se puede ver que el compuesto que presentó una mayor persistencia tuvo un valor de 2 074,66 días, mientras que el mínimo de persistencia fue de 12,19 días, lo que nos habla de un amplio rango de persistencias. De acuerdo con la clasificación de persistencia de plaguicidas, la mayoría de los compuestos analizados se encuentra dentro de la categoría de poco persistentes (42,51%), es decir, su persistencia se encuentra en el rango de 4 a 26 semanas. Un 33,51% se encuentra en el rango de moderadamente persistente, con una persistencia entre 27 a 52 semanas, y un 20,44% corresponde a compuestos altamente persistentes, con una persistencia entre 1 a 20 años. Ningún compuesto se encuentra en la categoría de permanente (figura 17).

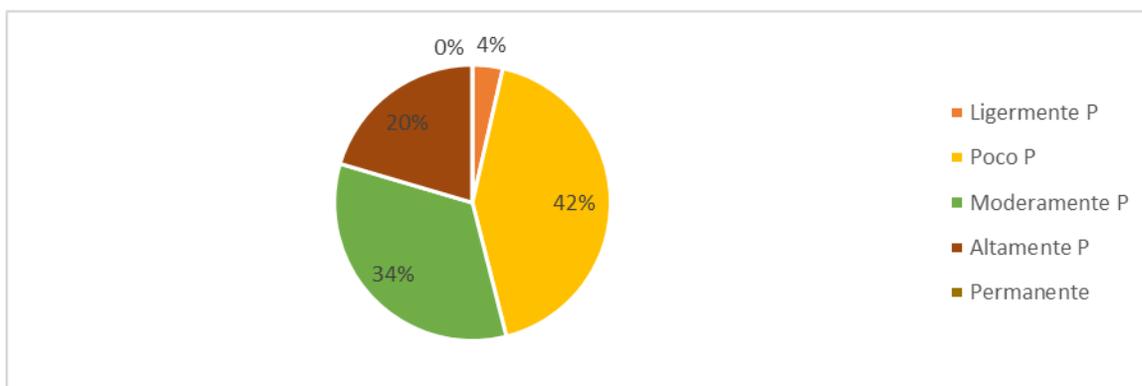


Figura 17 Distribución de plaguicidas autorizados según persistencia

La figura 18 muestra la frecuencia de compuestos vs. $\log P_{ov}$. En color oscuro se señalan los compuestos con persistencia total en el rango de los PCBs.

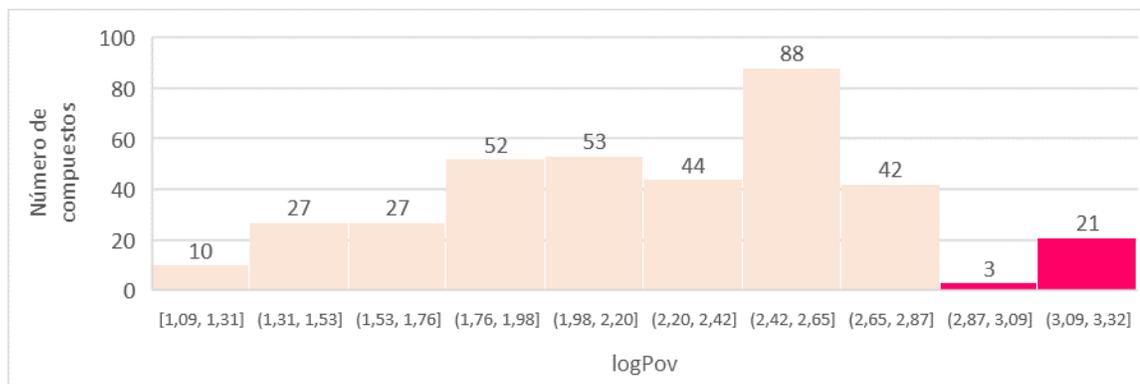


Figura 18 Histograma de frecuencias de logPov

De los 367 compuestos analizados, un total de 24 presentaron un valor de persistencia dentro del rango de los PCBs, es decir, mayor a 727,4 días, los que corresponden a un 6,54% del total. Esto es importante de mencionar ya que indica que 24 plaguicidas que se encuentran autorizados por el SAG están presentando una persistencia total similar a la de un grupo de compuestos considerado de preocupación mundial. Estos 24 plaguicidas se encuentran dentro del rango de altamente persistentes, siendo el compuesto que obtuvo el mayor valor de persistencia la metaflumizona con una persistencia total de 2 074,7 días. También destacan con valores elevados: acrinatrina (2 069,5 días), ciflufenamida (2 056,4 días), oxatiapirolina (2 055,8 días), novaluron (2 045,5 días), lufenuron (2 040,2 días), florpirauxifeno bencilo (2 037,2 días), benzoato de emamectina (2 034,6 días), fluopiram (2 020,5 días), diflufenican (2 009,0 días) y abamectina (1 987,0 días). Hay que destacar que 5 de estos plaguicidas hasta el año 2016 se encontraban en la Lista de Plaguicidas Altamente Peligrosos (PAN, 2016).

3.2.4 Bioacumulación

El resumen estadístico de los datos obtenidos para el factor de bioacumulación (*BAF*) a partir de *BCFBAF* de EPI Suite para los 367 plaguicidas se muestra en la tabla 16.

Tabla 16 Resultados log BAF

Promedio	1,61
Desviación estándar	1,29
Máximo	6,53
Mínimo	-0,05
Mediana	1,64
Coefficiente de Variación	0,80
Valor referencia PCB	3,37

El promedio obtenido fue de 1,61, correspondiente a un BAF de 40,74 L/kg, presentando un grado de bioacumulación bajo en promedio, con un valor mucho menor al valor de referencia para Contaminantes Orgánicos Persistentes utilizado en el Convenio de Estocolmo (5 000 L/kg). Sin embargo, al igual que en el caso de la persistencia, su desviación estándar indica que puede haber compuestos con una importante bioacumulación, mucho mayor a la obtenida por el promedio. Considerando este valor referencial establecido por el Convenio, 17 plaguicidas presentan un valor mayor, siendo considerados bioacumulables según el Convenio de Estocolmo, correspondientes a un 4,63% del total. Del total de 367 plaguicidas, 27 (7,36%) presentaron un log BAF dentro del rango obtenido por el grupo de los PCB, es decir, mayor a 3,365 (equivalente a 2 317,4 kg/L). Esto se ve representado en la figura 19, donde se muestra la frecuencia para cada rango de log BAF , y en color oscuro se muestran los compuestos que se encuentran dentro del rango de los PCB.

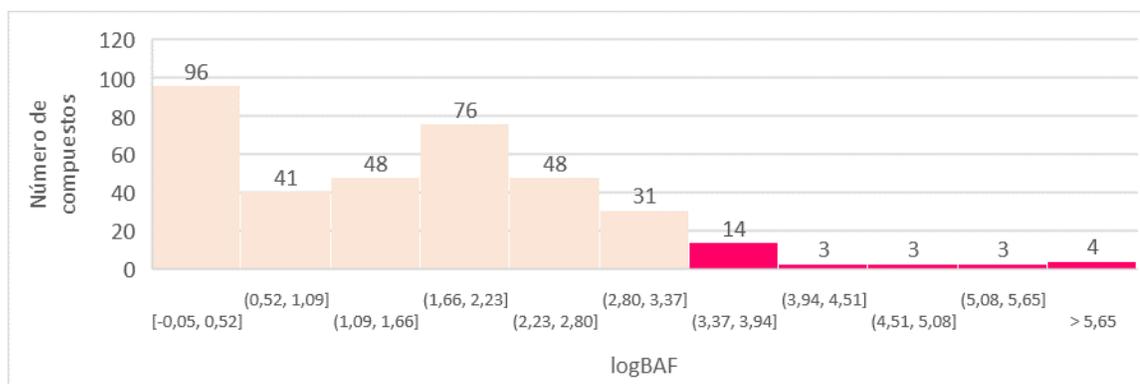


Figura 19 Histograma de frecuencias de logBAF

En este caso, el compuesto que presentó un mayor logBAF corresponde a brodifacum, con un valor de 6,529. Es importante destacar que este plaguicida corresponde a un raticida de uso común y doméstico, pudiendo ser fácilmente ingerido por especies no objetivos, ya sea por forma directa o indirecta, y debido a su alta bioacumulación presenta un riesgo potencial de intoxicación (Clear, 2003). Sumado a este también presentaron valores elevados de logBAF los compuestos flocumafeno (5,945), metaflumizona (5,410), etoxazol (5,354), etofenprox (5,138) y milbemectina (4,997).

3.2.5 Eficiencia de Transporte (TE)

Los resultados estadísticos obtenidos para la eficiencia de transporte (TE) a partir de "OECD Pov & LRTP *Screening Tool*" para los 367 plaguicidas se muestran en la tabla 17.

Tabla 17 Resultados TE

Promedio	0,65%
Desviación estándar	2,21%
Máximo	17,03%
Mínimo	1,91E-15%
Mediana	0,02%

Coefficiente de Variación	3,40
Valor referencia PCB	0,15%

En promedio los plaguicidas presentan una baja eficiencia de transporte, sin embargo, al igual que en los casos anterior de persistencia y bioacumulación, su desviación estándar nos indica una alta variabilidad de los datos. Además, se puede ver que el valor máximo (17,03%), correspondiente al bromuro de metilo, se encuentra muy sobre el valor referencial obtenido por los PCBs. También presentaron valores altos de TE los compuestos diclobenilo (15,67%), clorotalonil (12,98%), flocumafeno (12,66%), brodifacum (12,65%), metaflumizona (12,58%) y bromadiolona (12,22%). Del total de 367 compuestos, 101 (un 27,52%) presentaron un TE sobre el valor referencial del grupo de los PCB. Esto se ve representado en la figura 20, donde se muestra la frecuencia para cada rango de TE, en color más oscuro se muestran los compuestos que se encuentran dentro o sobre el rango de los PCB.

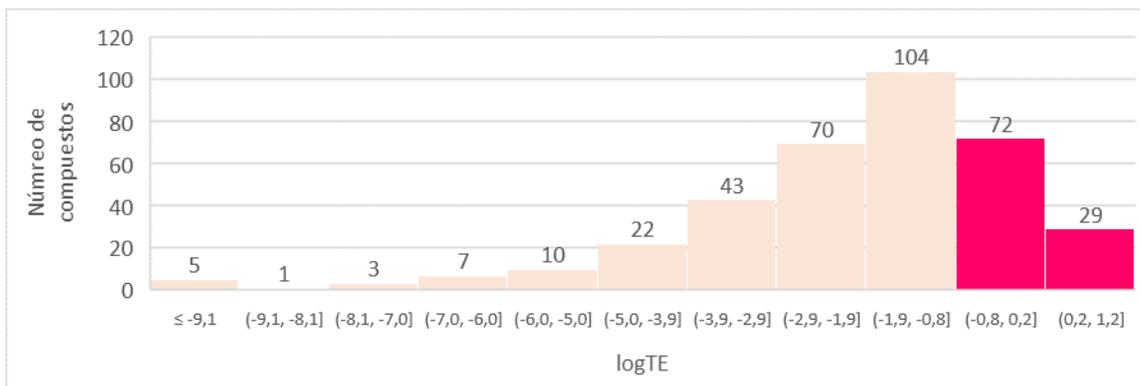


Figura 20 Histograma de frecuencias de $\log TE$

3.2.6 Puntaje *P-B-LRT*

Los resultados obtenidos para el puntaje *P-B-LRT* de los plaguicidas, considerando en conjunto persistencia, bioacumulación y potencial transporte se muestran en la tabla 18.

Tabla 18 Resultados puntaje P-B-LRT

Promedio	$-4,6 \times 10^{-16}$
Desviación estándar	2,41
Máximo	6,635
Mínimo	-9,351
Mediana	0,103
Coefficiente de Variación	$-5,23 \times 10^{15}$
Valor referencia PCB	3,19

De la tabla 18 se puede ver que el promedio obtenido fue muy cercano a 0, así como también su mediana, lo que indica en general una distribución simétrica entre valores positivos o negativos. Esto es importante de mencionar ya que, como este puntaje corresponde a una suma de valores *z*, indica que tan desviado estarán estos valores del promedio. El máximo valor obtenido para el puntaje *P-B-LRT* fue de 6,635 correspondiente a metaflumizona, destacando también con valores elevados el flocumafeno (6,094), brodifacum (5,942), novaluron (4,977), lufenuron (4,911), milbemectina (4,673), etofenprox (4,653), abamectina (4,563), ciflufenamida (4,553) y benzoato de emamectina (4,503). La figura 21 muestra la frecuencia de compuestos por rango de puntaje y su comparación con el valor referencial de los PCBs.

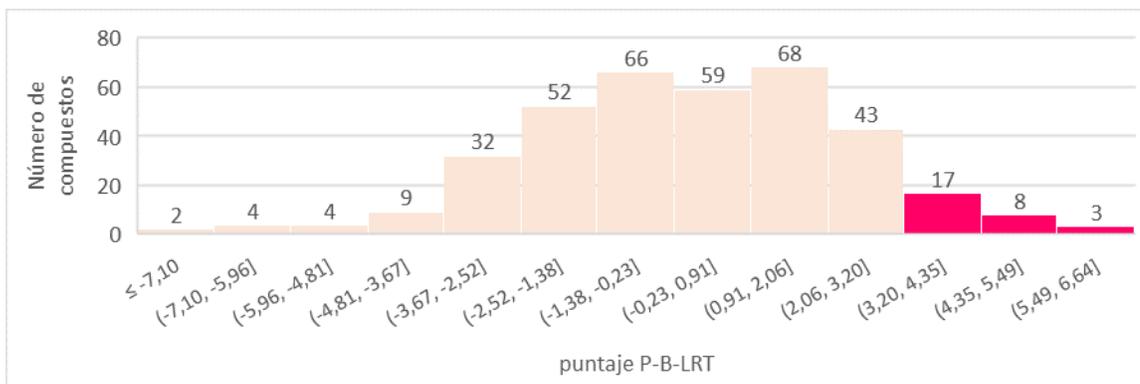


Figura 21 Histograma de frecuencias de puntaje P-B-LRT

Del total de 367 compuestos analizados, 28 obtuvieron un puntaje *P-B-LRT* dentro del rango del grupo de PCB, correspondiente a un 7,63%. Esto es importante, ya que indica que 28 plaguicidas van a sobrepasar a los PCBs considerando en conjunto 3 factores que generan un potencial impacto en el medioambiente.

3.3 Compuestos prioritarios

A partir de los datos obtenidos por EPI Suite y por “OECD Pov & LRTP *Screening Tool*” se generó una lista de plaguicidas prioritarios, donde se consideró a los plaguicidas que superaran en mayor número de propiedades el valor de los PCBs. En este caso se consideraron los plaguicidas que superaran a los PCBs en más de 4 propiedades, obteniendo un total de 21 plaguicidas, los que se muestran en la tabla 19.

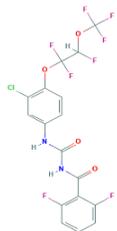
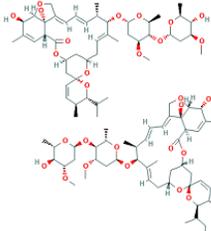
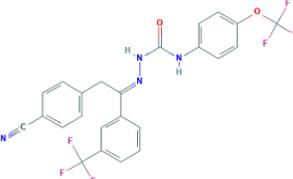
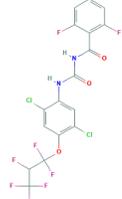
Tabla 19 Plaguicidas prioritarios

Compuesto	N° CAS	Compuesto	N° CAS
Novaluron	116714-46-6	Pidilfumetofeno	1228284-64-7
Lufenuron	103055-07-8	Diflufenican	83164-33-4
Metaflumizona	139968-49-3	Tritosulfuron	142469-14-5
Abamectina	65195-55-3	Indoxacarb	173584-44-6
Acrinatrina	101007-06-1	Fluopicolida	239110-15-7
Benzoato de emamectina	155569-91-8	Fluazinam	79622-59-6
Ciflufenamida	180409-60-3	Fluopiram	658066-35-4

Oxatiapirolina	1003318-67-9	Flubendiamida	272451-65-7
Florpirauxifeno bencilo	1390661-72-9	Flocumafeno	90035-08-8
Alfa cipermetrina	67375-30-8	Espinosad	168316-95-8
Clorfenapir	122453-73-0		

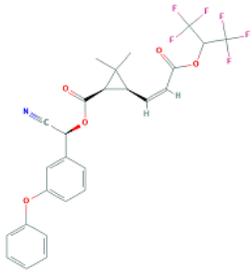
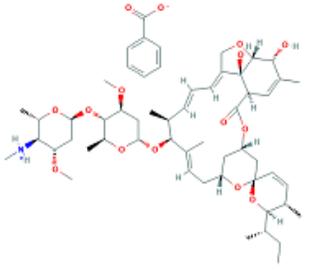
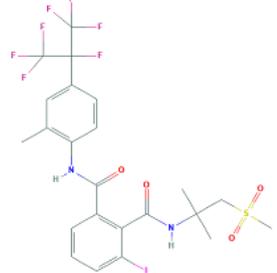
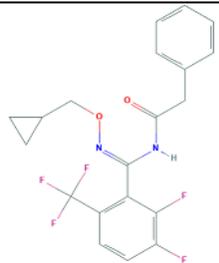
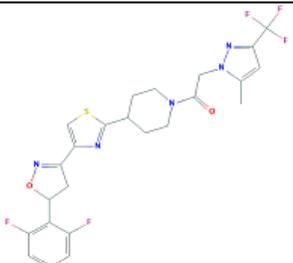
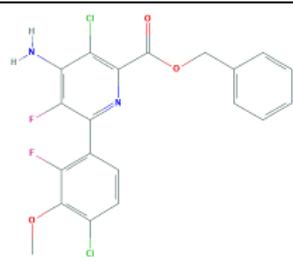
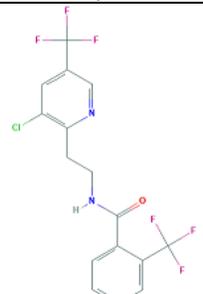
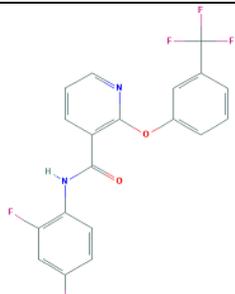
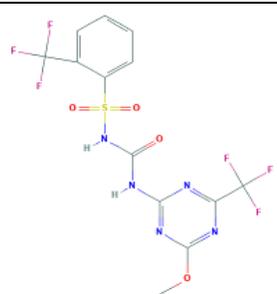
Según su clasificación por uso la mayoría de estos plaguicidas prioritarios corresponde a insecticidas (11) y fungicidas (5), presentándose en menor medida herbicidas (3), rodenticidas (1) y nematocida (1). De estos 21 plaguicidas, 4 presentaron un total de 6 propiedades por sobre los PCBs: novaluron, abamectina, metaflumizona y lufenuron, cuyas estructuras se muestran en la tabla 20.

Tabla 20 Estructuras plaguicidas con 6 propiedades sobre rango de PCBs

Novaluron	Abamectina
	
Metaflumizona	Lufenuron
	

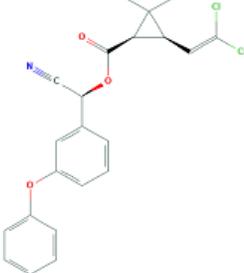
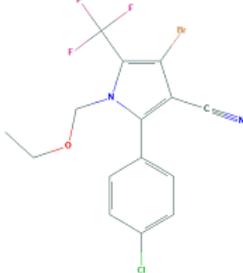
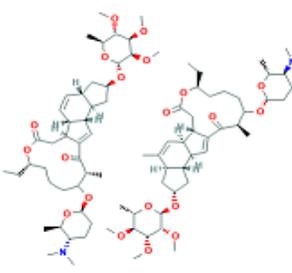
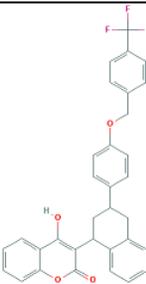
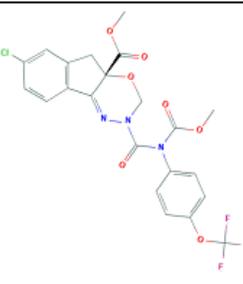
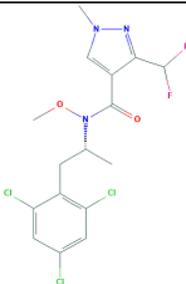
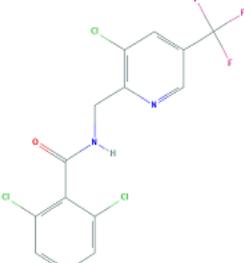
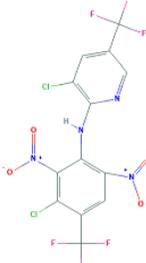
Sumado a estos, 9 plaguicidas sobrepasaron a los PCBs en 5 propiedades: acrinatrina, benzoato de emamectina, flubendiamida, ciflufenamida, oxatiapirolina, florpirauxifeno de bencilo, fluopiram, diflufenian y tritosulfuron, los que se muestran en la tabla 21.

Tabla 21 Estructuras plaguicidas con 5 propiedades sobre rango de PCBs

Acrinatrina	Benzoato de Emamectina	Flubendiamida
		
Ciflufenamida	Oxatiapirolina	Florpirauxifeno de Bencilo
		
Fluopiram	Diflufenican	Tritosulfuron
		

Finalmente, 8 superaron a los PCBs en 4 propiedades: alfa-cipermetrina, clorfenapir, espinosad, flocumafeno, indoxacarb, pidilflumetofeno, fluopicolida y fluazinam, cuyas estructuras se muestran en la tabla 22.

Tabla 22 Estructuras plaguicidas con 4 propiedades sobre rango de PCBs

Alfa-Cipermetrina	Clorfenapir	Espinosad
		
Flocumafeno	Indoxacarb	Pidilfumetofeno
		
Fluopicolida	Fluazinam	
		

Si analizamos las estructuras moleculares, 18 son compuestos halogenados: 9 clorados, 17 fluorados, 1 bromado y 1 yodado. Además, 3 son sulfurados: 2 presentan grupo sulfato y 1 corresponde a un tiazol. La mayoría presentan anillos aromáticos en su estructura, los que en algunos casos incorporan nitrógeno. La presencia de estructuras aromáticas indica una baja reactividad en las moléculas, dada por la alta estabilidad de los grupos aromáticos (Ouellette, 2015). La mayoría de los compuestos halogenados contienen flúor, que se asocia a un aumento de su lipofilia, en especial si estos están unidos a sistemas aromáticos (Ojima, 2009), debido a su alta electronegatividad que

reduce la capacidad de formar puentes de hidrógeno y, por lo tanto, disminuyendo su hidrofiliidad (López, 2011). Con los otros halógenos presentes, como cloro o bromo, se generará un efecto similar, pero en menor medida, debido a su menor electronegatividad.

Dentro de estos compuestos un gran número presenta en su estructura grupos trifluorometilo (C-F₃) donde, debido a la alta fuerza de los enlaces C-F₃ (127,5 kcal/mol), también entregaran a las moléculas una baja reactividad, siendo un enlace difícil de romper (Lemal, 2004). Este último corresponde a un grupo que además ha comenzado a utilizarse ampliamente en síntesis médicas debido a su alta estabilidad, alta lipofiliidad y su alta demanda estérica (López, 2011). En algunos casos, como metaflumizona y fluopiram, este tipo de enlace se presenta más de una vez dentro de la molécula, por lo que este efecto debería potenciarse aún más. Además, tanto lufenuron como novaluron, ambos compuestos con mayor prioridad, esta estructura se encuentra asociada a más átomos de F, donde se esperaría que se genere un mayor efecto electronegativo y aumente aún más su lipofiliidad. Esto es importante de mencionar ya que, si bien resulta útil en el campo de la medicina, para un plaguicida nos indica que si llegan a entrar a nuestro organismo estos tendrán facilidad para entrar a nuestros tejidos y de persistir en nuestro cuerpo y bioacumularse. En los casos de las moléculas que no presentan grupo C-F₃, es posible observar estructuras con un alto grado de impedimento estérico, favoreciendo de igual manera su persistencia en el ambiente al favorecer su estabilidad.

Por otro lado, la presencia de nitrógeno en las estructuras se encuentra en general asociada a estructuras aromáticas. Al formar parte de estructuras aromáticas, en los anillos de 6 miembros, se generaría una distribución de cargas dentro del anillo aromático, originándose una deficiencia de carga (π -deficiencia) asociado a una menor reactividad y favoreciendo su estabilidad (Quin, 2010). Esta clase de plaguicida

heterocíclicos ha comenzado a utilizarse el último tiempo debido a que su principal mecanismo de reacción es inhibiendo la fotosíntesis, siendo poco tóxicos para mamíferos, son estables y poco solubles en agua (Sanz, 2015). Además, al estar en el suelo se enlazan a las arcillas presentes irreversiblemente incrementando su persistencia (Isern, 2018). También, 4 de estos plaguicidas presentan grupo nitrilo en su estructura, el que actúa inhibiendo la germinación de semillas, sin embargo, se ha visto asociada a una mayor toxicidad (Sanz, 2015).

Revisando normativa y clasificación asociada a estos 21 plaguicidas prioritarios se encontró que 8 de estos se encuentran en la lista de Plaguicidas Altamente Peligrosos (PAN, 2016), 2 se encuentran en la Lista de Plaguicidas en Vigilancia de la Unión Europea y 2 se encuentran en la Lista de Plaguicidas Prohibidos en la Unión Europea (UTZ, 2015). Sumado a esto, según la clasificación de peligrosidad de la OMS, 1 se encuentran en la categoría IA de extremadamente peligrosos, 2 se encuentran en la categoría II de moderadamente peligrosos y 2 en la categoría III de levemente peligrosos (OMS, 2009). Esto indica que un número no menor de plaguicidas que se encuentran actualmente autorizados por el SAG pueden estar generando un impacto importante tanto en el medioambiente como en nuestra salud.

Complementariamente se buscó estudios previos realizados en Chile sobre el efecto medioambiental de estos plaguicidas prioritarios, sin embargo, solo fue posible encontrar estudios asociados a 3 de estos, correspondientes a cipermetrina, benzoato de emamectina y acrinatrina. Para el plaguicida cipermetrina, se encontraron 3 estudios, el primero evalúa los efectos de su residuo en hojas de vegetales sobre la salud de la personas en el norte de Chile (Elgueta, 2016). El segundo estudia los riesgos de distintos plaguicidas utilizados en la industria salmonera en Chile (Tucca, 2020) y el tercero

analiza la presencia de plaguicidas en sedimentos de la Patagonia chilena (Tucca, 2017). En este último estudio también se analizó la presencia de benzoato de emamectina. Para el plaguicida acrinatrina solo se encontró un estudio que estudia su efecto en abejas chilenas (Balsebre, 2018).

3.4 Productos de degradación

Del análisis de la probabilidad de degradación aeróbica de los plaguicidas se encontró un total de 89 productos de degradación, la lista completa de los productos encontrados junto con sus propiedades se encuentra detallado en el Anexo 3. Los resultados estadísticos obtenidos para sus coeficientes de distribución se muestran en la tabla 23.

Tabla 23 LogKow, logKoa y logKaw para productos de degradación

	LogKow	logKoa	logKaw
Promedio	1,68	10,52	-8,83
Desviación estándar	1,99	4,24	3,92
Máximo	8,96	20,50	-1,05
Mínimo	-4,55	2,92	-20,90
Mediana	1,54	10,08	-8,62
Coefficiente de variación	1,18	0,40	0,44
PCBs	4,79	6,79	-2,75

A partir de los datos obtenidos se puede ver que, en promedio, los productos de degradación seguirán la misma tendencia de distribución que los plaguicidas originales, presentando una mayor afinidad por materia orgánica y agua en comparación a la atmósfera. La principal diferencia se presenta en logKaw, donde en el caso de los productos de degradación solo se presentaron valores negativos, es decir, todos estos productos van a presentar una mayor afinidad por el agua. Comparando con los valores

de los PCBs, 4 productos de degradación presentaron un $\log K_{ow}$ mayor, 68 un $\log K_{oa}$ mayor y 6 un mayor $\log K_{aw}$. Para los tiempos de vida media, los resultados estadísticos obtenidos se muestran en la tabla 24.

Tabla 24 $t_{1/2a}$, $t_{1/2w}$ y $t_{1/2s}$ para productos de degradación

	$t_{1/2a}$	$t_{1/2w}$	$t_{1/2s}$
Promedio	1,99 días	42,71 días	85,43 días
Desviación estándar	7,14 días	46,14 días	92,27 días
Máximo	55,42 días	240 días	480 días
Mínimo	0,033 días	8,67 días	17,34 días
Mediana	0,37 días	37,5 días	75 días
Coeficiente de variación	3,58	1,08	1,08
PCBs	4,88 días	229,17 días	708,33 días

Al comparar con los valores obtenidos por los plaguicidas, para todos los tiempos de vida media disminuyó tanto el promedio como el valor máximo. Por otro lado, al comparar con los PCBs, 5 productos de degradación presentaron un $t_{1/2a}$ mayor, 2 presentaron un mayor $t_{1/2w}$ y ninguno presentó un mayor $t_{1/2s}$. Los resultados obtenidos para Pov , $\log BAF$, TE y el puntaje final $P-B-LRT$ se muestran en la tabla 25.

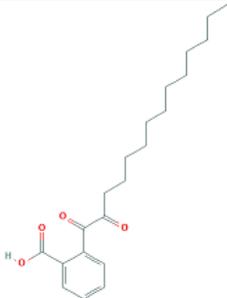
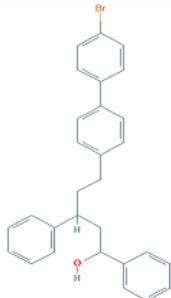
Tabla 25 Pov , $\log BAF$, TE y puntaje $P-B-LRT$ para productos de degradación

	Pov	$\log BAF$	TE	Puntaje P-B-LRT
Promedio	98,30 días	0,82	0,53%	-1,50
Desviación estándar	113,73 días	1,03	2,14%	1,77
Máximo	640,38 días	5,54	12,66%	3,35
Mínimo	11,59 días	-0,05	9,34E-10%	-4,64
Mediana	58,02 días	0,38	0,01	-2,05
Coeficiente de variación	1,16	1,26	4,05	1,18
PCBs	727,37 días	3,37	0,15%	3,19

En este caso se puede ver que en promedio los productos de degradación van a presentar una menor persistencia, bioacumulación y transporte en comparación a los plaguicidas iniciales, sumado a una disminución del valor máximo en todos los casos. Por lo que se puede esperar que estos sean menos persistentes, bioacumulables y presenten un menor transporte que los plaguicidas. Al compararlos con los PCB, ningún producto de degradación presentó una persistencia mayor, pero 3 presentaron una mayor bioacumulación, 18 presentaron una mayor eficiencia de transporte y 2 presentaron un mayor puntaje *P-B-LRT*.

Al igual que para los plaguicidas, se hizo una lista de productos prioritarios según el número de propiedades que superaron el valor de los PCB, obteniendo un total de 3 productos prioritarios, los que presentaron 5 y 4 propiedades sobre el valor de los PCBs, correspondientes a: acequinocil-OH, ácido 2-(2-oxotetradecanoil) benzoico (AKM-18) y 5-[4-(4-bromofenil)fenil]-1,3-difenilpentan-1-ol (Tabla 26).

Tabla 26 Estructura productos de degradación prioritarios

Acequinocil-OH	AKM-18	5-[4-(4-bromofenil)fenil]-1,3-difenilpentan-1-ol
		

El compuesto Acequinocil-OH y AKM-18 corresponden a los principales productos de degradación de acequinocilo, a los que se les ha estudiado su generación en suelos no estériles y en agua y sedimentos (EFSA, 2013). En un estudio realizado el año 2013 por

la Autoridad Europea de Seguridad Alimentaria (EFSA) se señala que ambos productos son más bioacumulables que su compuesto parental, algo que también es posible observar en los resultados obtenidos, donde el valor de $\log BAF$ obtenido para acequinocil fue de 3,225, mientras que el valor obtenido para sus productos de degradación, acequinocil-OH y AKM-18, fue de 5,542 y 3,402, respectivamente. Por otro lado, el tercer compuesto corresponde al principal producto de degradación del plaguicida bromadiolona, para el que estudios han comprobado su formación por fotólisis en suelo (Völkl, 1992), siendo el segundo principal metabolito de formación.

En este caso llama especialmente la atención la estructura de los productos de degradación prioritarios (Tabla 26), ya que en general sus estructuras son muy diferentes a las obtenidas para los plaguicidas prioritarios. En el caso de los productos de degradación destaca la presencia de cadenas alifáticas, como en el caso de acequinocil-OH y AKM-18, lo que de igual manera se puede asociar a una baja hidrofiliidad. Por otro lado, el producto de degradación obtenido de la bromadiolona destaca una alta presencia de estructuras aromáticas, un alto grado de impedimento estérico y la presencia de un átomo halógeno, donde al igual que para los plaguicidas, todo esto se asocia a una mayor estabilidad.

3.5 Comparación con otros estudios

La metodología presentada ha sido utilizada en otros estudios, donde se ha evaluado el comportamiento ambiental de compuestos de distintos tipos. Uno de estos corresponde a Zhang (2020), en donde se analizaron inventarios de sustancias de uso común en China, Canadá y Estados Unidos. En este estudio se analizó un total de 14 938 compuestos químicos, dentro de los que estaban 131 de los plaguicidas presentados en este documento, 3 de estos además pertenecientes a la lista final de plaguicidas

prioritarios, correspondientes a: alfa-cipermetrina, clorfenapir y flocumafeno. Debido a que se utilizaron los mismos programas para estimar las propiedades fisicoquímicas de los compuestos los valores obtenidos para estas fueron coincidentes entre ambos estudios, solo variando el puntaje final P-B-LRT ya que este se obtiene considerando el valor promedio de todos los compuestos analizados. La tabla 27 muestra la comparación de este resultado para los 3 plaguicidas prioritarios comunes entre ambos estudios.

Tabla 27 Comparación de puntaje P-B-LRT con Zhang (2020) para plaguicidas prioritarios

	Zhang (2020)	Este trabajo
Alfa-cipermetrina	4,21	3,95
Clorfenapir	3,90	3,87
Flocumafeno	5,56	6,09

En ambos estudios los valores obtenidos para el puntaje P-B-LRT superaron al de los PCBs para estos 3 plaguicidas. Sin embargo, en Zhang (2020) estos no se encuentran en la lista de compuestos prioritarios debido a que evaluaron adicionalmente 2 criterios: el Potencial de Contaminación y Bioacumulación Ártica y el del Reglamento de Registro, Evaluación, Autorización y Restricción de Sustancias Químicas (REACH), los que no fueron cumplidos para estos plaguicidas. A partir de este estudio es posible, además, hacer una comparación entre los plaguicidas, como grupo de compuestos, frente a compuestos utilizados en otras áreas. Los resultados promedios obtenidos por Zhang (2020) fueron comparados con el promedio de los plaguicidas autorizados en Chile. La tabla 28 muestra los resultados promedios obtenidos para persistencia, bioacumulación y transporte en ambos casos.

Tabla 28 Comparación con Zhang (2020) por grupo de compuestos

	Promedios obtenidos en este trabajo	Zhang (2020)
Promedio <i>Pov</i>	327 días	104 días
Promedio <i>logBAF</i>	1,61	2,20
Promedio <i>TE</i>	0,65%	0,04%

De la tabla es posible ver que los valores obtenidos para *Pov* y *TE* fueron menores en el caso de Zhang (2020) que los obtenidos para los plaguicidas, de lo que se podría inferir que los plaguicidas, como grupo de compuestos, presentaran una mayor persistencia y un mayor transporte en comparación a otros compuestos. Por otro lado, el promedio para la bioacumulación fue mayor en el caso de Zhang (2020). En este mismo estudio, al comparar sus resultados con los PCB, un 4% presentó una persistencia dentro de su rango, un 16% una bioacumulación y un 35% una eficiencia de transporte (Tabla 29).

Tabla 29 Comparación de compuestos sobre PCBs con Zhang (2020)

	Porcentajes obtenidos en este trabajo	Zhang (2020)
Porcentaje de compuestos con <i>Pov</i> sobre PCBs	6,54%	4%
Porcentaje de compuestos con <i>logBAF</i> sobre PCBs	7,36%	16%
Porcentaje de compuestos con <i>TE</i> sobre PCBs	27,52%	35%

A partir de la tabla se puede ver que un mayor porcentaje de los plaguicidas mostraron una persistencia comparable o mayor a los PCB, esto es importante ya que, no solo el valor promedio de persistencia de los plaguicidas fue mayor, sino que también el número

proporcional de compuestos. Para el caso de la bioacumulación, el porcentaje de compuestos sobre los PCB fue menor en el caso de los plaguicidas en comparación a los compuestos estudiados por Zhang (2020). Esto indica que, como grupo, los plaguicidas no presentan una bioacumulación mayor que otro tipo de compuestos. Sin embargo, como se puede ver de los resultados obtenidos, hay de todas formas un número de compuestos utilizados como plaguicidas con una importante bioacumulación, con altos efectos en el medio ambiente, especialmente en animales.

Finalmente, comparando la *TE*, el porcentaje de plaguicidas que supera a los PCBs fue menor en comparación al obtenido por la lista de Zhang (2020). Sin embargo, el promedio obtenido fue alto para los plaguicidas, lo que indica que, si bien porcentualmente es menor el número de plaguicidas con un *TE* mayor a los PCB, los que la presenten será en un grado mayor en comparación a los compuestos de todo tipo. En Zhang (2020), 109 compuestos presentaron un puntaje *P-B-LRT* mayor al obtenido por los PCB, correspondientes a un 0,73% del total en este estudio. Este porcentaje es mucho menor al obtenido para el caso de los plaguicidas, lo que indica que, considerando los 3 factores de análisis (persistencia, bioacumulación y transporte) en el caso de los plaguicidas una mayor proporción de estos podría representar un problema. Además, al comparar con otros estudios similares, como Muir (2006) y Howard (2010), en los que también se encontró una lista de contaminantes prioritarios a partir de los coeficientes de distribución, se encontró patrones comunes en las estructuras de los compuestos encontrados con la de los plaguicidas prioritarios, donde la mayoría corresponden a compuestos halogenados. Sin embargo, en estos casos se encontró compuestos clorados, bromado y fluorados en proporciones similares, a diferencia del caso de los plaguicidas donde predominaron los compuestos fluorados. En Howard (2010) los compuestos obtenidos como prioritarios que se clasifican como fluorados

presentaron altos tiempos de vida media atmosférica, en escala de semanas-meses, alta bioacumulación, valores medios para $\log K_{ow}$ y relativamente altos para $\log K_{oa}$. Estos dos últimos concuerdan con los valores obtenidos para los plaguicidas ($\log K_{ow}$ y $\log K_{oa}$), sin embargo, los tiempos de vida media atmosférica fueron relativamente bajos, en escala de horas, siendo menores a los observados en otro tipo de compuestos.

3.6 Utilidad, limitaciones y mejoras

Los resultados obtenidos en este estudio permiten tener una primera aproximación sobre qué plaguicidas autorizados en Chile presentan un potencial efecto contaminante en el medioambiente. Esto resulta de gran utilidad si se desea hacer un análisis más detallado y evaluar sus abundancias, distribuciones e impactos a escala local y regional. La lista prioritaria presentada en este documento puede ayudar a enfocar esfuerzos y diseñar trabajos a futuro.

Por otro lado, la metodología utilizada es una buena herramienta que permite obtener una idea general del comportamiento de compuestos a partir de su estructura molecular. Esta metodología puede ser aplicada a otras listas más comprensivas de compuestos aprobados para ser utilizados en el país y así ampliar el conocimiento sobre estos.

El estudio también presentó ciertas limitaciones, especialmente en la obtención de la información, donde en su mayoría se utilizaron valores obtenidos de estimaciones a partir de las estructuras de las moléculas, dadas por EPI Suite, y no valores comprobados experimentalmente. Esto pudo generar ciertos errores en los valores, en especial en casos como en la vida media en agua y en suelo, ya que el programa BIOWIN3 entrega un rango de tiempo con una baja precisión. Esto puede llegar a provocar tanto una sub como sobre estimación en los tiempos de vida media en agua y

en suelo. Además, hay que considerar que EPI Suite solo considera ciertas características ambientales, que no se pueden modificar, y tampoco considera interacciones intermoleculares con otras moléculas presentes en el medio ambiente. Sin embargo, si resulta útil como método comparativo ya que se están recreando las mismas condiciones para todos los compuestos analizados.

La metodología utilizada no logra hacer un estudio detallado que considere las características del medio ambiente. Por ejemplo, en este caso particular, al evaluar plaguicidas, habría sido interesante analizar distintos tipos de suelo y otras condiciones medio ambientales que no son posibles a partir de los programas utilizados. Especialmente en el programa de la OECD, que es donde se genera la estimación del comportamiento por matriz, y para el caso de suelo lo considera como materia orgánica a pesar de la existencia de distintos tipos de suelos, con distintas proporciones de materia orgánica. Por lo tanto, los resultados obtenidos podrían variar considerablemente en la práctica según el tipo de suelo en el que nos encontremos.

Como mejora al estudio, un elemento que sería bueno considerar corresponde al volumen de uso de cada plaguicida. Si bien podrían haber compuestos que presentan una persistencia o bioacumulación relativamente baja, si se usan en volúmenes muy elevados podrían de igual forma estar generando un impacto significativo.

Como propuesta para complementar este estudio se sugiere una evaluación más detallada de los 21 compuestos prioritarios presentados, recreando distintos tipos de suelo, dosis y condiciones ambientales.

IV. CONCLUSIONES

Se encontró que 21 plaguicidas autorizados en Chile por el SAG, presentan una potencial de afectación al medioambiente comparable a la de los PCBs, un grupo de compuestos considerado como Contaminantes Orgánicos Persistentes. Siendo de especial interés estudios experimentales más detallados sobre estos, que incluyan muestreos en terreno y el análisis de sus impactos en el medioambiente. En general se vio que estos 21 plaguicidas presentaban similitudes en sus estructuras, lo que les da una estimación similar de su comportamiento en el medioambiente.

Del estudio de estimación del comportamiento ambiental de los plaguicidas autorizados en Chile se vio que su distribución será preferentemente entre materia orgánica y agua, donde además se presentaron los mayores tiempos de vida media. Dada esta distribución y los valores obtenidos para *K_{oc}* se puede concluir que algunos plaguicidas podrían estar llegando de manera importante a fuentes de agua subterránea y superficial. Además, siendo afectados por las lluvias que afectan la movilidad de los plaguicidas (Palma, 2004), un fenómeno común en nuestro país, especialmente en la zona Sur y en las estaciones de otoño e invierno.

Algunos plaguicidas presentan una tendencia a bioacumularse en organismos (los que presentaron valores elevados de $\log BAF$). Por otro lado, no se vio un transporte atmosférico importante, por lo que se esperaría que los mayores efectos atmosféricos se den en sectores cercanos al lugar de emisión. Los resultados del puntaje *P-B-LRT* indican que se presenta un grupo menor de plaguicidas que van a presentar en conjunto valores importante de persistencia, bioacumulación y transporte.

Según los resultados obtenidos en el estudio se puede ver que los productos de degradación de los plaguicidas autorizados presentan un menor efecto potencial en el medio ambiente, presentado menores niveles de persistencia, bioacumulación y transporte en promedio en comparación a sus compuestos iniciales.

Si bien se logró obtener una buena aproximación del comportamiento ambiental de los plaguicidas utilizados en nuestro país, para poder hacer estudios más detallados y representativos sería necesario conocer datos específicos de las condiciones ambientales locales. Incluir estas condiciones ambientales específicas nos permitiría modelar sistemas como lo que se implementa en países de Europa y Norte América (Casallonovo, 2021). Esto además sería útil para fomentar la formulación de hipótesis informadas que motiven más estudios experimentales sobre impacto ambiental de plaguicidas en Chile, algo que actualmente es necesario y que se pudo comprobar con el bajo número de estudios encontrados.

V. REFERENCIAS

- Alfaro, R. 2013. Herbicidas asociados a la caña de azúcar y su potencial de contaminación del medio ambiente, Liga Agrícola Industrial de la Caña de Azúcar (LAICA), Departamento de Investigación y Extensión de la Caña de Azúcar (DIECA), p. 11-13.
- Arias-Estevez, M., López-Periago, E., Martínez-Carballo, E., Simal-Gándara, J., Mejuto, J. C., García-Río, L. 2008. The mobility and degradation of pesticides in soils and the pollution of groundwater resources. *Agric. Ecosyst. Environ.* 123, 247-260.
- Arnot, J., Gobas, F. 2006. A Review of Bioconcentration Factor (BCF) and Bioaccumulation Factor (BAF) assessments for organic chemicals in aquatic organisms, *Environ. Rev.*, 14, 257-297.
- Atkinson, R. 1987. A structure-activity relationship for the estimation of rate constants for the gas-phase reactions of OH radicals with organic compounds, *Intern. J. Chem. Kinet.*, 19: 799-828.
- Aronson, D., Boethling, R., Howard, P., Stiteler, W. 2006. Estimating Biodegradation Half-Lives for Use in Chemical Screening, *Chemosphere*, 63, 1953-1960.
- Baird, C. 2004. *Química Ambiental*, Editorial Reverté S.A., Barcelona, 310-312.
- Balsebre, A. 2018. Determinación de pesticidas organofosforados halogenados y neonicotinoides en abejas de apiarios de la V y VI región en Chile, Tesis de Magíster en Bioquímica área de Especialización en Bioquímica Ambiental, Facultad de Ciencias Químicas y Farmacéuticas, Universidad de Chile, 6-10.
- Benítez, R. 2012. Plaguicidas y Efectos sobre la Salud Humana: Un Estado del Arte, 13-20.
- Besnier, F. 1970. Acumulación de pesticidas en el suelo, Hojas Divulgativas del Ministerio de Agricultura, Publicaciones de Capacitación Agraria, 2-70H, España, 4-7.
- Boethling, R. S., Howard, P. H., Meylan, W. M., Stiteler, W., Beauman, J., Tirado, N. 1994. Group Contribution Method for Predicting Probability and Rate of Aerobic Biodegradation, *Environ. Sci. Technol.*, 28, 459-465.
- Buerkle, L. 2001. Estimation of the Reaction with Photochemically Produced Hydroxyl Radicals in the Atmosphere, *Environmental Chemistry – Environmental Risk Assessment*, Aventis CropScience, Frankfurt, Deutschland, 5-10.
- Cabrera, M. A. 2008. Influencia de la Adición al Suelo de Residuos de Almazara en el Comportamiento de Herbicidas Utilizados en el Cultivo del Olivar, Memoria para optar al Grado de Doctor, Universidad de Sevilla, España.
- Casallanovo, F., Simone, D., Santos, G., Kaminski, T., Cione, A. P., Peranginangin, N. 2021. Pesticide Environmental Risk Assessment in Latin American Countries – The

Importance of Developing Local Scenarios, SETAC Globe, Science and Publications, vol. 22, 4. [en línea] <https://globe.setac.org/environmental-risk-assessment-in-latin-america-countries/>

CEPAL (Comisión Económica para América Latina y el Caribe). 1990. Los recursos hídricos de América Latina y el Caribe: Planificación, desastres y contaminación, Estudios e Informes de la CEPAL, No. 67, Santiago de Chile.

CEPIS (Centro Panamericano de Ingeniería Sanitaria y Ciencias del Ambiente). 2016. Cursos de Autoinstrucción en Diagnóstico, Tratamiento y Prevención de Intoxicaciones Agudas Causadas por Plaguicidas.

CICOPLAFEST. 1991. Catálogo Oficial de Plaguicidas, Ciudad de México, México, D.F.

Cid, R. 2014. Aplicación Eficiente de Fitosanitarios, cap. 2: Plaguicidas químicos, composición y formulaciones, etiquetado, clasificación toxicológica, residuos y métodos de aplicación, Instituto Nacional de Tecnología Agropecuaria (INTA), Argentina, 1-14.

Clear, M. 2003. Red Meat Residue and Species Verification Monitoring, Reports from New Zealand Food Safety Authority, *Surveillance*, 30, 2, 18-19.

Climent, M. J., Sánchez-Martín M.J., Rodríguez-Cruz, M.S., Pedreros, P., Urrutia, R., Herrero-Hernández, E. 2018. Determination of Pesticides in River Surface Waters of Central Chile Using SPE-CG-MS Multi-Residue Method. *J. Chil. Chem. Soc.*, 63, N°2, 4023-4031.

Climent, M. J., Herrero-Hernández, E., Sánchez-Martín, M. J., Rodríguez-Cruz, M. S., Pedreros, P., Urrutia, R. 2019. Residues of pesticides and some metabolites in dissolved and particulate phase in surface stream water of Cachapoal River Basin, central Chile. *Environmental Pollution*, 251, 90-101.

CONAMA (Comisión Nacional del Medio Ambiente). 2004. Manual de Chile sobre el manejo de Bifenilos Policlorados (PCBs; Askareles). Un estudio de caso sobre la aplicación de guías.

CONAMA (Comisión Nacional del Medio Ambiente). 2009. Inventario Nacional de Bifenilos Policlorados (PCB) - Chile.

Contreras-Levicoy, J., Astorga, E., Castro, R., Yentzen, G., Cumsille, M. 2005. Abortos Espontáneos en Hospital de Llay-Llay y su Relación con Labores Agrícolas de la Madre, *Rev. Chile. Salud Pública*, 9, 7-11.

Cooman, K., Debels, P., Gajardo, M., Urrutia, R., Barra, R. 2005. Use of *Daphnia* spp. For the ecotoxicological assessment of water quality in an agricultural watershed in south-central Chile. *Arch. Environ. Contam. Toxicol.* 48, 191-200.

Cornejo, C. 2019. La muerte silenciosa: uso en Chile de plaguicidas prohibidos en el mundo causa daño cognitivo en menores, *El Mostrador*, Santiago, Chile, 17 enero, 2019.

Corral S., de Angel, V., Salas, N., Zúñiga-Venegas, L., Gaspar, P., Pancetti, F. 2017. Cognitive impairment in agricultural workers and nearby residents exposed to pesticides

in the Coquimbo Region of Chile, Neurotoxicology and Teratology. DOI:10.1016/j.ntt.2017.05.003

Dutka, B. J., McInnis, R., Jurkovic, A., Liu, D., Castillo, G. 1996. Water and sediment ecotoxicity studies in Temuco and Rapel River basin, Chile. *Environ. Toxicol. Water Qual.* 11, 237-247.

ECETO (European Centre for Ecotoxicology and Toxicology of Chemicals). 2014. Information to be considered in a weight-of-evidence-based PBT/vPvB assessment of chemicals (Annex XIII of REACH), Special Report No. 18, Appendix A: Annex XIII of REACH.

EFSA (Europe Food Safety Authority). 2013. Conclusion on the peer review of the pesticide risk assessment of the active substance acequinocyl. *Journal* 11(5), p.3212.

Elgueta, S., Moyano, S., Sepúlveda, P., Quiroz, C. 2016. Pesticides residues in leafy vegetables and human health risk assessment in North Central agricultural areas of Chile, *Food Additives & Contaminants: Part B*, DOI: 10.1080/19393210.2017.1280540.

EPA (Environmental Protection Agency). 2005. Pollution Prevention (P2) Framework, United States Environmental Protection Agency, Washington, D.C., U.S.A., EPA-748-B-04-001.

EPA (Environmental Protection Agency). 2009. Persistent Organic Pollutants: A Global Issue, A Global Response. [en línea] <https://www.epa.gov/international-cooperation/persistent-organic-pollutants-global-issue-global-response#pops>.

EPA (Environmental Protection Agency). 2017. On-Line EPI Suite User's Guide, v 4.11.

EPA (Environmental Protection Agency). 2020. Estimation Programs Interface Suite for Microsoft Windows, v 4.11, United States Environmental Protection Agency, Washington, D.C., U.S.A.

FEDEFruta (Federación de Productores de Frutas de Chile). 2015. Chile se Presenta con éxito en nueva versión de "Fruit Logística". [en línea] <http://fedefruta.cl/chile-se-presenta-con-exito-en-nueva-version-de-fruit-logistica-2015/>

Garber, K. 2009. KABAM Version 1.0 User's Guide and Technical Documentation, Appendix F: Description of Equation Used to Calculate the BCF, BAF, BMF, and BSAF Values, Environmental Fate and Effects Division, Office of Pesticide Programs, U.S. Environmental Protection Agency (EPA).

García, J. 2018. Estado del Arte de los Contaminantes Orgánicos Persistentes (COP) en Colombia entre los años 2007-2017, Monografía para optar al título de Licenciado en Química, Universidad Distrital Francisco José de Caldas, Bogotá, Colombia.

Giordano, A., Richter, P., Ahumada, I. 2011. Determination of pesticides in river water using rotating disk sorptive extraction and gas chromatography-mass spectrometry. *Talanta*, 85, 2425-2429.

Goldenman, G. 2017. Study for the Strategy for a Non-toxic Environment of the 7th EAP, Sub-study d: Very Persistent Chemicals. 17-24.

Howard, P., Muir, D. 2010. Identifying New Persistent and Bioaccumulative Organics Among Chemicals in Commerce, *Environ. Sci. Technol.*, 44, 2277-2285.

INECC. 2007. Características fisicoquímicas de los plaguicidas y su transporte en el ambiente. Instituto Nacional de Ecología y Cambio Climático. [en línea] http://www2.inecc.gob.mx/sistemas/plaguicidas/descargas/caracteristicas_fyq_plaguicidas.pdf

Isern, M. 2018. La química de los pesticidas y su metodología analítica, Centro de Investigación y Desarrollo, Universidad del Centro Educativo Latinoamericano (UCEL), Rosario, Argentina.

Kim, S., Thiessen, P., Bolton, E., Chen, J., Fu, G., Gindulyte, A., Han, L., He, J., He, S., Shoemaker, B., Wang, J., Yu, B., Zhang, J., Bryant, S. 2016. PubChem Substance and Compound databases, *Nucleic Acids Res.*, 44, 1202-1213.

Konstantinou, I., Hela, D., Albanis, T. 2006. The Status of Pesticide Pollution in Surface Waters (Rivers and Lakes) of Greece, part I, Review on occurrence and levels, *Environmental Pollution*, 141(3), 555-570.

Lemal, D. M. 2004. Perspective on Fluorocarbon Chemistry, *The Journal of Organic Chemistry*, 69(1),1-11.

Lopez, S., Romero, A. 2011. Grupo Trifluorometilo: Un Sustituyente Importante en Química Medicinal, *Revista de la Facultad de Farmacia, Universidad Central de Venezuela*, 74(2), 40-52

Márquez, C., Villalobos, C., Poblete, S., Villalobos, E., García, M., Duk, S. 2005. Cytogenetic Damage in Female Chilean Agricultural Workers Exposed to Mixtures of Pesticides, *Environ. Mol. Mutagen.*, 45,1-7.

Meylan, W. M., Howard, P. H. 1991. Bond Contribution Method for Estimating Henry's Law Constants, *Environ. Toxicol. Chem.*, 10, 1283-1993.

Mora, I. 2017. Estudio Comparativo de la Dinámica de un Herbicida Natural y un Herbicida Sintético en los Suelos Chilenos, Seminario para optar al título de Química Ambiental, Facultad de Ciencias, Universidad de Chile, 1-21.

Muir, D., Howard, P. 2006. Are There Other Persistent Organic Pollutants? A Challenge for Environmental Chemists, *Environ. Sci. Technol*, vol. 40(23), 7157-7166.

Muir, D., Zhang, X., de Wit, C., Vorkamp, K., Wilson, S. 2019. Identifying Further Chemicals of Emerging Arctic Concern Base on '*in silico*' Screening of Chemical Inventories, *Emerging Contaminants*, 5, 201-210.

Muñoz, M. T., Iglesias, V., Lucero, B. A. 2010. Exposición a Organofosforados y Desempeño Cognitivo en Escolares Rurales Chilenos: Un Estudio Exploratorio, *Revista Facultad Nacional de Salud Pública*, 29, 256-263.

Muñoz-Quezada M. T., Lucero-Mondaca, B., Bradman, A., Steenland, K., Zúñiga-Venegas, L., Calafat, A., Ospina, M., Iglesias, V., Muñoz, M. P., Buralli, R., Fredes-Monsalve, C., Gutiérrez-Jara, J.P. 2019. An educational intervention on the risk perception of pesticides exposure and organophosphate metabolites urinary concentrations in rural school children in Maule Region, Chile. *Environmental Research*, DOI: 10.1016/j.envres.2019.108554.

Narváez, J., Palacio, J., Molina, F. 2012. Persistencia de Plaguicidas en el Ambiental y su Ecotoxicidad: Una Revisión de los Procesos de Degradación Natural, Gestión y Ambiente, vol. 15(3), 27-37, Medellín, Colombia.

Ney, Jr., R. E. 1995. Fate and Transport of Organic Chemicals in the Environment: A Practical Guide, 2nd ed. Government Institutes, Inc: Rockville, MD, cap. 1-3.

ODEPA (Oficina de Estudios y Políticas Agrarias). 2019. Panorama de la Agricultura Chilena, Ministerios de Agricultura. [en línea] <https://www.odepa.gob.cl/wp-content/uploads/2019/09/panorama2019Final.pdf>

Ojima, I. 2009. Fluorine in Medicinal Chemistry and Chemical Biology, Wiley-Blackwell, New York, U.S.A.

OMS (Organización Mundial de la Salud). 2009. The WHO recommended classification of pesticides by hazard and guidelines to classification.

ONU (Organización de las Naciones Unidas). 2017. Convenio de Estocolmo: Sobre Contaminantes Orgánicos Persistentes (COP), Texto y Anexos, ONU Medio Ambiente, Programa de las Naciones Unidas para el Medio Ambiente.

Ouellette, R., Rawn, D. 2005. Principles of Organic Chemistry, Elsevier, cap. 5: Aromatic Compounds, 133-162.

Palma, G., Sánchez, A., Olave, Y., Encina, F., Palma, R., Barra, R. 2004. Pesticide levels in surface waters in an agricultural-forestry basin in Southern Chile, *Chemosphere*, 57, 763-770.

PAN (Pesticide Action Network International). 2016. Lista de Plaguicidas Altamente Peligrosos de PAN Internacional.

Quin, L., Tyrell, J. 2010. Fundamentals of Heterocyclic Chemistry. Importance in Nature and in the Synthesis of Pharmaceuticals. John Wiley & Sons, inc.

Ramírez, J. A., Lacasaña, M. 2001. Plaguicidas: Clasificación, uso, toxicología y medición de la exposición, Instituto Nacional de Salud Pública, Arch. Prev. Riesgos Labor, 4(2), 67-75.

Raymond, J. W., Rogers, T., Shonnard, D., Kline, A. 2001. A Review of Structure-based Biodegradation Estimation Methods, *Journal of Hazardous Materials*, 84(2-3), 189-215.

Resolución Exenta N°1557/2014, Establece Exigencias para la Autorización de Plaguicidas y Deroga Resolución N°3670 de 1999, Servicio Agrícola Ganadero (SAG), Ministerio de Agricultura, Santiago, Chile, Marzo de 2014.

Retamal, M., Costa, C., Suárez, J.M., Richter, P. 2013. Multi-determination of organic pollutants in water by gas chromatography coupled to triple quadrupole mass spectrometry, *Int. J. Environ. Anal. Chem.*, 93(1), 93-107.

Rojas, A., Ojeda, M. E., Barraza, X. 2000. Congenital Malformations and Pesticides Exposure, *Rev. Med. Chil.*, 128,399-404.

Rozas, M. E. 2019. Informe Sobre la Situación de los Plaguicidas Altamente Peligrosos (PAP) en Chile, Red de Acción en Plaguicidas (RAP)-Chile, Primero Edición.

SAG (Servicio Agrícola Ganadero). 2018. Guía de Orientación Sobre Requisitos y Procedimientos de la Resolución SAG N°1557/2014, Ministerio de Agricultura, Chile, Junio 2018.

Sánchez, M. J., Sánchez, M. 1984. Los plaguicidas: Adsorción y evolución en el suelo, Instituto de Recursos Naturales y Agrobiología, 1° edición, Salamanca, España, 15-16.

Santos, M., Oliveira, H., Torres, T. 2016. Principles of Environmental Toxicology and Contamination (Part II). Unit 5: Transport and Fate of Contaminants in the Environment: Bioaccumulation. CIIMAR.

Sanz, A. 2015. La industria agroquímica, Química Orgánica Industrial, Escuela de Ingenierías Industriales, Universidad de Valladolid, España.

Scheringer, M., MacLeod, M., Wegmann, F. 2009. The OECD Pov and LRTP Screening Tool Version 2.2, Organization for Economic Co-operation and Development (OECD), Zurich, Switzerland.

Tucca, F., Moya, H., Pozo, K., Borghini, F., Focardi, S., Barra, R. 2017. Occurrence of antiparasitic pesticides in sediments near salmon farms in the northern Chilean Patagonia, *Marine Pollution Bulletin*, vol. 115, issues 1-2, 465-468.

Tucca, F., Barra, R. 2020. Environmental risks of synthetic pyrethroids used by the salmon industry in Chile, Eljarrat E., Pyrethroid Insecticides. The handbook of Environmental Chemistry, vol.92, 177-203.

UTZ. 2015. Lista de Plaguicidas Prohibidos y Lista de Plaguicidas en Vigilancia, v-. 1.0.

Verschueren, K. 1983. Handbook of environmental data on organic chemicals, Second Edition, Van Nostrand Reinhold.

Verschueren, K. 2001. Handbook of Environmental Data on Organic Chemicals, Fourth Edition, Volume 1, John Wiley & Sons, inc.

Volkl, S., Galicia, H. 1992. 14C-Bromadiolone: Degradation and metabolism in soils incubated under aerobic conditions. RCC Umweltchemie AG, laboratory report no. 252944.

Weisbrod, A., Burkhard, L., Arnot, J., Mekenyan, O., Howard, P., Russom, C., Boethling, R., Sakuratani, Y., Traas, T., Bridges, T., Lutz, C., Bonnell, M., Woodburn, K., Parkerton, T. 2007. Workgroup Report: Review of Fish Bioaccumulation Databases Used to Identify

Persistent, Bioaccumulative, Toxic Substances, Environmental Health Perspectives. Vol. 115(2): 255-261.

Zhang, X. (2018). Chemical Space of Environmental Partitioning: Learning and Practice [en línea] <https://environsci.shinyapps.io/ChemicalPartitioningSpace/>

Zhang, X., Sun., X., Jiang, R., Zeng, E., Sunderland, E., Muir, D. 2020. Screening New Persistent and Bioaccumulative Organics in China's Inventory of Industrial Chemicals, Environ. Sci. Technol., 54,7398-7408.

Zúñiga, L., Márquez, C., Duk, S. 2007. Estudio Citogenéticos y Reproductivo en Mujeres Temporeras Expuestas a Pesticidas de la VIII Región de Chile, Reviste Theoria, 16, 77-87.

Zúñiga-Venegas, L., Saracini, C., Pancetti, F., Muñoz-Quezada, M. T., Lucero, B., Foerster, C., Cortés, S. 2020. Exposición a plaguicidas en Chile y Salud Poblacional: Urgencia para la Toma de Decisiones, Gac. Sanit.

ANEXOS

ANEXO 1: Lista completa de plaguicidas y propiedades

	Compuesto	CAS	logKow	logKaw	logKoa	t _{1/2a} [hr]	t _{1/2w} [hr]	t _{1/2s} [hr]	Pov[días]	logBAF	TE[%]	P-B-LRT
1	abamectina	65195-55-3	4,48	-25,3	29,8	0,220	17280	34560	197,0	3,49	0,927	4,56
2	imdacloprid	138261-41-3	0,56	-13,2	13,7	0,845	2880	5760	189,24	0,01	1,23E-4	-2,07
3	cloropicrina	76-06-2	1,32	-1,07	3,16	987,3	2880	5760	112,33	1,08	5,118	0,55
4	ciantraniliprol	736994-63-1	3,43	-21,1	24,6	7,958	5760	11520	615,15	1,26	0,089	1,31
5	acefato	30560-19-1	-0,9	-10,7	9,84	11,48	900	1800	66,516	-0,05	8,54E-5	-3,10
6	acequinocilo	57960-19-7	7,44	-6,09	13,5	29,89	900	1800	108,14	3,23	7,042	2,24
7	acetamiprid	135410-20-7	2,55	-5,55	8,10	1,676	900	1800	65,357	1,32	0,003	-1,29
8	Lambda cihalotrina	68085-85-8	6,85	-4,23	11,2	4,079	5760	11520	690,95	3,50	0,050	3,03
9	novaluron	116714-46-6	5,26	-10,6	15,8	4,465	17280	34560	2045,5	3,58	4,147	4,97
10	acrinatrina	101007-06-1	6,73	-6,33	13,0	3,436	17280	34560	2069,5	2,01	6,088	3,84
11	alfa cipermetrina	67375-30-8	6,38	-4,77	11,7	5,990	5760	11520	690,59	3,82	0,159	3,51
12	antranilato de metilo	134-20-3	2,26	-4,11	5,99	3,688	360	720	33,705	0,63	0,006	-2,27
13	azadiractina	11141-17-6	-0,77	-11,4	12,5	0,565	17280	34560	1060,4	0,06	4,20E-4	-0,27
14	benzoato de emamectina	155569-91-8	5,38	-7,17	12,2	0,198	17280	34560	2034,6	4,47	0,018	4,49
15	beta ciflutrina	68359-37-5	5,74	-5,93	11,9	10,27	5760	11520	689,91	2,60	1,686	3,07
16	tiacloprid	11198-49-9	2,33	-12,4	14,7	1,435	2880	5760	194,43	0,97	6,10E-4	-0,97
17	bifenazato	149877-41-8	4,14	-10,5	14,7	1,591	900	1800	105,70	2,81	0,083	0,96
18	bifentrina	82657-04-3	8,15	-4,39	12,5	4,334	5760	11520	689,21	4,67	0,014	3,65
19	brodifacum	56073-10-0	8,51	-10,7	19,2	2,205	2880	5760	346,00	6,53	12,65	5,93
20	bromadiolona	28772-56-7	7,02	-9,44	16,5	2,090	900	1800	108,15	2,71	12,22	1,96
21	bromuro de metilo	74-83-9	1,18	-0,52	1,71	3371	360	720	194,02	0,35	17,03	0,72
22	Buprofezina	69327-76-0	4,3	-3,77	8,07	2,387	900	1800	106,41	1,51	0,002	-0,79
23	Cadusafos	95465-99-9	3,98	-4,28	8,18	1,069	360	720	42,939	1,87	0,001	-1,61
24	Carbarilo	63-25-2	2,35	-6,87	9,23	4,937	900	1800	91,202	1,07	0,115	-0,44
25	Cihexatina	13121-70-5	6,63	-1,77	8,40	1,173	900	1800	107,25	4,48	4,00E-5	0,67
26	Cipermetrina	52315-07-8	6,38	-4,77	11,7	5,990	5760	11520	690,59	3,82	0,159	3,51
27	Ciromazina	66215-27-8	0,96	-11,6	12,6	101,7	2880	5760	188,18	0,02	4,00E-5	-2,31
28	clorantraniliprol	500008-45-7	3,98	-12,9	15,6	7,653	17280	34560	1259,6	1,13	0,019	1,51
29	Tiametoxam	153719-23-4	0,8	-12,7	12,6	0,516	900	1800	66,676	-0,04	3,00E-5	-3,35
30	Clorfenapir	122453-73-0	5,51	-6,63	11,5	9,488	5760	11520	686,11	3,86	0,743	3,86
31	clorhidrato de cartap	15263-52-2	-2,46	-18,3	15,8	2,036	900	1800	66,480	-0,05	1,15E-7	-4,50
32	Clorpirifos	2921-88-2	5,11	-3,99	8,88	1,400	5760	11520	673,35	3,33	9,00E-4	2,02
33	Dimetoato	60-51-5	0,72	-8,00	8,78	1,625	360	720	31,682	0,15	0,025	-2,40
34	Clotianidina	210880-92-5	0,64	-10,4	11,1	0,937	900	1800	67,776	0,03	3,20E-4	-2,74
35	Dazomet	533-74-4	0,94	-7,96	8,59	0,456	900	1800	67,580	-0,01	0,011	-2,04
36	Diazinon	333-41-5	3,86	-5,34	9,15	1,328	900	1800	106,94	2,45	0,002	-0,13

37	diflubenzuron	35367-38-5	3,59	-6,73	10,6	7,902	5760	11520	659,27	2,10	0,245	2,24
38	dinotefurano	165252-70-0	-0,19	-11,6	10,9	1,537	900	1800	66,540	-0,04	1,79E-5	-3,43
39	esfenvalerato	66230-04-4	6,76	-5,85	12,1	5,757	2880	5760	345,62	3,60	1,246	3,18
40	espinetoram J	187166-40-1	4,01	-21,3	25,3	3,720	5760	11520	666,29	2,72	0,330	2,79
41	espinetoram L	187166-15-0	4,34	-21,2	25,5	16,56	5760	11520	678,44	3,00	0,686	3,17
42	Sulfoxaflor	946578-00-3	3,14	3,14	0,0005	7,726	2880	5760	77,327	1,71	1,47E-5	-1,99
43	Espinosad	168316-95-8	5,61	-19,0	24,6	0,420	5760	11520	689,43	3,93	6,534	4,39
44	espiroclifeno	148477-71-8	6,21	-6,21	12,0	13,10	5760	11520	689,72	2,68	2,829	3,24
45	espirotetramato	203313-25-1	3,67	-10,6	14,2	13,10	2880	5760	332,65	2,25	0,153	1,66
46	Etofenprox	80844-07-1	7,47	-6,03	13,1	2,065	2880	5760	345,82	5,14	4,635	4,64
47	Etoprofos	13194-48-4	3,14	-5,18	8,77	1,859	360	720	42,933	1,76	0,003	-1,36
48	Etoxazol	153233-91-1	7,21	-5,38	12,6	1,685	5760	11520	689,22	5,35	0,007	4,04
49	Fenamifos	22224-92-6	3,29	-7,44	10,7	1,652	900	1800	104,63	2,08	0,053	0,30
50	fenazaquina	120928-09-8	5,76	-5,72	11,2	3,321	2880	5760	345,39	3,04	0,057	2,09
51	Fenoxicarb	72490-01-8	4,24	-7,76	12,1	1,966	900	1800	107,81	1,96	0,372	0,64
52	fenpiroximato	134098-61-6	5,57	-4,06	9,07	2,662	2880	5760	342,27	1,63	0,003	0,39
53	fenpropatrina	39515-41-8	5,62	-3,51	9,51	7,182	2880	5760	343,39	2,16	0,019	1,17
54	fenvalerato	51630-58-1	6,76	-5,85	12,1	5,757	2880	5760	345,62	3,60	1,246	3,18
55	Fipronilo	120068-37-3	6,64	-7,46	11,5	1,336	17280	34560	1872,6	2,32	0,106	3,14
56	flocumafeno	90035-08-8	8,61	-10,5	19,1	2,015	5760	11520	691,89	5,95	12,66	6,08
57	flubendiamida	272451-65-7	4,68	-12,1	16,3	4,389	17280	34560	1932,0	2,17	0,504	3,38
58	fluensulfona	318290-98-1	1,57	-6,48	8,05	11,32	900	1800	74,258	0,63	0,259	-0,79
59	Fluopiram	658066-35-4	4,78	-8,81	13,6	20,71	17280	34560	2020,5	2,70	1,720	4,09
60	Fosmet	732-11-6	2,48	-6,47	9,25	0,840	900	1800	99,443	1,78	0,004	-0,51
61	Fostiazato	98886-44-3	2,47	-8,19	9,87	1,464	900	1800	76,261	0,67	0,019	-1,28
62	gamma cihalotrina	76703-62-3	6,85	-4,22	11,2	4,079	5760	11520	690,63	3,50	0,031	2,92
63	hidrogenooxalato de tiociclam	31895-22-4	-1,04	-18,4	17,3	0,252	360	720	30,864	-0,05	3,02E-6	-4,48
64	deltametrina	52918-63-5	6,18	-3,70	9,89	5,469	2880	5760	345,08	3,25	0,014	1,95
65	indoxacarb	173584-44-6	5,21	-7,57	12,2	3,081	17280	34560	2008,4	1,71	0,794	3,16
66	Lufenuron	103055-07-8	6,61	-8,63	13,8	12,38	17280	34560	2040,2	3,57	3,215	4,90
67	Malatión	121-75-5	2,29	-6,70	9,06	1,658	360	720	39,915	1,39	0,022	-1,27
68	metaflumizona	139968-49-3	7,72	-11,1	18,8	3,245	17280	34560	2074,7	5,41	12,58	6,63
69	metam sodio	137-42-8	-2,62	-5,22	2,60	1,997	360	720	29,223	0,03	0,003	-2,99
70	Metidation	950-37-8	1,58	-6,53	8,73	0,857	900	1800	87,244	0,99	0,005	-1,21
71	Metomilo	16752-77-5	0,61	-9,09	9,69	19,31	360	720	31,414	0,09	0,003	-2,88
72	metoxifenozida	161050-58-4	3,48	-9,80	13,5	3,295	2880	5760	333,45	2,50	0,164	1,87
73	milbemectinca	51596-11-3	5,71	-12,7	18,6	0,276	2880	5760	345,55	5,00	8,552	4,66
74	Oxamilo	23135-22-0	-1,2	-8,01	7,54	5,680	900	1800	66,566	-0,04	0,033	-1,84
75	permetrina	52645-53-1	7,43	-4,01	10,5	5,609	2880	5760	345,53	3,02	0,024	1,89
76	pimetrozina	123312-89-0	0,89	-8,92	8,74	12,74	900	1800	66,654	-0,04	0,005	-2,25
77	Piridabeno	96489-71-3	5,47	-2,72	9,09	3,144	2880	5760	342,85	4,45	0,002	2,44
78	Primicarb	23103-98-2	1,40	-7,46	9,16	0,847	2880	5760	204,63	0,30	0,018	-0,72
79	pirimifos metilo	29232-93-7	4,00	-4,61	8,81	0,802	900	1800	107,30	2,34	3,60E-4	-0,54

80	piriproxifeno	95737-68-1	5,55	-7,59	13,1	2,376	2880	5760	345,33	2,93	2,925	2,84
81	profenofos	41198-08-7	4,82	-6,04	10,7	2,864	2880	5760	344,17	2,63	0,031	1,64
82	Propargita	2312-35-8	5,57	-4,58	9,58	2,155	2880	5760	344,05	3,11	0,003	1,50
83	tau-fluvalinato	102851-06-9	6,81	-6,23	13,0	4,383	5760	11520	690,99	2,82	6,873	3,54
84	tebufenozina	112410-23-8	4,62	-6,29	10,5	3,962	2880	5760	341,89	2,93	0,067	2,04
85	Teflutrina	79538-32-2	7,19	-1,17	7,57	7,541	17280	34560	1474,5	2,97	4,90E-4	2,30
86	triflumuron	64628-44-0	4,24	-6,64	11,5	3,364	5760	11520	686,75	2,62	0,257	2,68
87	2,4,6-tribromofenato de sodio	2666-53-7	1,50	-5,59	7,09	305,1	2880	5760	196,66	2,60	4,345	2,18
88	2-n-octil-4-isotiazolin-3-ona	26530-20-1	2,61	-6,07	8,52	3,260	360	720	40,321	1,33	0,026	-1,26
89	5-cloro-2-metil-4-isotiazolin-3-ona	26172-55-4	-0,34	-5,84	5,50	5,849	900	1800	65,652	-0,03	0,053	-1,75
90	2-metil-4-isotiazolin-3-ona	2682-20-4	-0,83	-5,69	4,86	4,783	360	720	30,169	-0,05	0,030	-2,55
91	8-quinolinolato de cobre	10380-28-6	2,32	1,80	0,52	0,642	900	1800	38,946	1,30	1,05E-7	-3,94
92	fenpropimorfo	67564-91-4	5,50	-4,00	8,93	0,930	2880	5760	341,28	2,69	4,00E-4	0,76
93	propiconazol	60207-90-1	4,13	-7,15	10,9	5,533	2880	5760	333,93	2,64	0,187	2,01
94	ametocradina	865318-97-4	4,02	-9,19	13,2	3,256	900	1800	107,53	1,68	0,335	0,40
95	dimetomorfo	110488-70-5	2,36	-8,50	11,2	1,203	2880	5760	272,04	1,64	0,023	0,61
96	Metiram	9006-42-2	-0,42	-	1,08E4	21,41	2880	5760	182,50	-0,03	0,374	-0,44
97	amisulbrom	348635-87-0	2,01	-7,51	11,9	1,629	5760	11520	679,89	3,06	0,289	3,04
98	azoxistrobina	131860-33-8	1,58	-11,5	14,0	2,710	2880	5760	255,78	1,48	0,010	0,27
99	ciproconazol	94361-06-5	3,25	-7,54	10,4	8,673	2880	5760	291,17	1,90	0,107	1,20
100	clorotalonilo	1897-45-6	3,66	-4,99	7,89	20772	5760	11520	514,84	1,88	12,98	2,69
101	difenoconazol	119446-68-3	5,20	-9,44	13,7	5,950	5760	11520	677,37	3,31	0,626	3,39
102	Procloraz	67747-09-5	4,13	-6,17	10,3	1,645	5760	11520	669,80	3,29	0,010	2,50
103	tebuconazol	107534-96-3	3,89	-8,23	11,9	11,18	2880	5760	333,45	2,64	0,179	2,00
104	Pidilfumetofeno	1228284-64-7	5,17	-9,33	14,5	5,846	5760	11520	688,23	3,58	3,517	3,98
105	Benalaxilo	71626-11-4	3,69	-5,32	8,72	4,697	900	1800	105,22	0,96	0,019	-0,79
106	mancozeb	07-01-8018	0,62	-6,70	8,03	0,604	900	1800	71,272	0,28	0,004	-2,00
107	Benomilo	17804-35-2	2,24	-9,70	11,8	0,601	360	720	38,441	0,86	0,005	-2,02
108	benzovindiflupir	1072957-71-1	4,22	-8,97	13,2	2,374	2880	5760	341,72	2,50	0,512	2,13
109	bis(tiocianato) de metileno	6317-18-6	0,62	-5,97	6,31	2,259	360	720	30,759	0,00	0,011	-2,71
110	Bixafeno	581809-46-3	4,36	-9,80	14,2	10,45	5760	11520	678,94	3,13	0,716	3,28
111	protioconazol	178928-70-6	3,61	-10,4	14,5	1,136	5760	11520	668,24	1,70	0,360	2,02
112	trifloxistrobina	141517-21-7	6,62	-6,03	10,5	18,23	2880	5760	343,46	2,86	0,504	2,41
113	Boscalid	188425-85-6	4,00	-9,76	12,7	14,03	2880	5760	296,01	1,92	0,031	0,96
114	piraclostrobina	175013-18-0	5,45	-8,67	12,7	0,622	2880	5760	339,12	2,92	0,248	2,29
115	Captan	133-06-2	2,74	-6,54	9,34	1,465	2880	5760	282,02	1,80	0,014	0,66
116	carbendazima	10605-21-7	1,55	-9,06	10,6	0,640	900	1800	73,776	0,38	0,004	-1,87
117	epoxiconazol	133855-98-8	3,47	-7,79	11,2	14,62	5760	11520	616,45	2,41	0,140	2,30
118	ciazofamida	120116-88-3	2,87	-9,67	12,9	3,142	2880	5760	315,57	2,20	0,059	1,37

119	ciffufenamida	180409-60-3	5,78	-8,81	14,6	20,55	17280	34560	2056,4	2,86	7,732	4,55
120	cimoxanilo	57966-95-7	4,24	-7,87	8,46	21,32	900	1800	67,490	-0,01	0,051	-1,72
121	ciprodinilo	121552-61-2	3,99	-5,47	9,46	0,641	900	1800	107,39	1,98	4,60E-4	-0,76
122	fludioxonilo	131341-86-1	3,83	-7,66	11,8	2,230	2880	5760	340,74	2,95	0,256	2,33
123	clorhidrato de kasugamicina hidratado	19408-46-9	-10,2	-33,5	23,2	0,549	208,08	416,16	19,534	-0,05	1,91E-15	-9,36
124	clorhidrato de propamocarb	25606-41-1	-0,39	-15,5	15,1	3,916	900	1800	66,587	-0,04	1,35E-5	-3,49
125	fenamidona	161326-34-7	3,45	-11,9	15,4	1,967	900	1800	105,95	1,97	0,093	0,34
126	fluopicolida	239110-15-7	4,62	-7,35	10,6	26,86	17280	34560	1503,4	1,78	0,204	2,67
127	Dicloran	99-30-9	2,76	-5,46	8,26	929,3	2880	5760	280,12	1,58	6,564	1,78
128	fenpropidina	67306-00-7	6,42	-5,45	11,9	1,137	2880	5760	345,66	3,12	0,043	2,10
129	Dodina	2439-103	1,32	-8,43	9,58	1,180	360	720	32,640	0,30	0,012	-2,42
130	kresoxim-metilo	143390-89-0	5,88	-6,84	10,2	3,356	900	1800	105,69	1,87	0,081	0,23
131	fluxaproxad	907204-31-3	3,47	-9,41	12,9	8,328	17280	34560	1624,1	2,39	0,098	3,06
132	etaboxam	162650-77-3	3,09	-17,4	20,5	3,618	2880	5760	305,58	0,79	0,041	0,17
133	famoxadona	131807-57-3	4,89	-5,73	10,4	2,263	2880	5760	343,99	2,63	0,010	1,40
134	fenarimol	60168-88-9	3,62	-6,54	10,1	32,60	2880	5760	330,49	2,52	0,644	2,17
135	fenbuconazol	114369-43-6	4,23	-5,47	8,70	13,13	2880	5760	310,42	2,20	0,143	1,55
136	fenhexamida	126833-17-8	3,72	-8,70	12,2	7,355	2880	5760	327,54	1,57	0,112	1,05
137	fenpirazamina	473798-59-3	1,81	-8,03	9,84	1,221	900	1800	78,674	0,87	0,022	-1,07
138	Ferbam	14484-64-1	-0,60	-1,43	0,83	0,624	900	1800	39,236	-0,05	4,96E-6	-4,17
139	fluazinam	79622-59-6	4,02	-6,67	10,7	1369	17280	34560	107,51	2,23	1,087	1,07
140	mefenoxam	70630-17-0	1,70	-6,92	8,63	4,774	900	1800	75,670	0,32	0,110	-1,20
141	pirimetanilo	53112-28-0	3,19	-5,84	8,68	0,641	900	1800	99,990	1,57	0,001	-1,03
142	fluoxastrobina	361377-29-9	2,00	-10,3	13,2	9,855	5760	11520	518,28	1,87	0,024	1,36
143	fluquinconazol	136426-54-5	3,73	-9,08	12,3	56,10	5760	11520	586,98	2,25	0,061	1,96
144	flutolanilo	66332-96-5	4,65	-6,89	10,6	0,859	2880	5760	333,38	1,94	0,012	0,89
145	flutriafol	76674-21-0	2,52	-11,2	13,5	13,30	5760	11520	426,40	1,33	0,006	0,50
146	Folpet	133-07-3	2,84	-5,50	8,35	8,150	2880	5760	280,83	1,86	0,064	1,02
147	fosetilo-aluminio	39148-24-8	-3,92	-4,03	0,11	2,215	2880	5760	156,49	-0,05	0,002	-1,67
148	himexazol	10004-44-1	1,03	-7,07	7,53	0,641	360	720	31,230	0,01	0,008	-2,77
149	imazalilo	35554-44-0	4,10	-6,98	10,8	1,512	2880	5760	336,16	2,71	0,041	1,74
150	iprodivona	36734-19-7	2,85	-6,89	9,89	7,025	2880	5760	298,93	0,78	0,169	0,45
151	isofetamida	875915-78-9	5,58	-10,2	15,8	1,382	2880	5760	345,44	2,23	6,304	2,46
152	isopirazam	881685-58-1	4,28	-8,38	12,7	2,339	2880	5760	342,21	2,12	0,536	1,85
153	miclobutanilo	88671-89-0	3,50	-6,76	9,70	18,24	900	1800	101,78	1,95	0,355	0,57
154	metaxililo	57837-19-1	1,70	-6,92	8,63	4,774	900	1800	75,670	0,32	0,110	-1,20
155	zoxamida	156052-68-5	4,35	-8,88	12,6	11,95	5760	11520	650,12	2,48	0,191	2,47
156	mandipropamida	374726-62-2	3,57	-13,1	16,3	1,361	2880	5760	312,67	1,29	0,052	0,64
157	mepanipirima	110235-47-7	3,46	-6,17	9,45	0,655	900	1800	104,88	1,91	0,002	-0,59
158	meptildinocap	6119-92-2	5,90	-6,56	12,5	12,08	900	1800	108,13	2,01	0,393	0,69
159	metconazol	125116-23-6	4,19	-6,98	10,8	8,077	2880	5760	336,77	2,56	0,264	2,03
160	metrafenona	220899-03-6	4,72	-9,33	14,0	0,630	2880	5760	344,35	2,51	1,448	2,36

161	oxatiapiprolina	1003318-67-9	5,74	-14,7	20,5	3,307	17280	34560	2055,8	2,33	7,470	4,13
162	pencicuron	66063-05-6	5,51	-9,70	14,5	2,122	900	1800	108,04	1,85	1,854	0,89
163	penconazol	66246-88-6	4,67	-6,24	10,9	15,90	2880	5760	344,17	3,55	0,605	2,98
164	penflufeno	494793-67-8	4,35	-8,37	12,7	2,217	2880	5760	342,70	2,49	0,616	2,16
165	pentiopirad	183675-82-3	4,95	-7,80	12,8	1,548	2880	5760	344,86	2,68	1,334	2,48
166	picoxistrobina	117428-22-5	3,67	-8,11	11,8	2,481	5760	11520	642,28	1,79	0,143	1,86
167	piriofenona	688046-61-9	3,74	-11,00	14,7	0,630	5760	11520	648,49	1,57	0,179	1,74
168	procimidona	32809-16-8	2,59	-3,32	6,40	17,14	5760	11520	375,78	2,06	0,089	1,51
169	propamocarb	24579-73-5	1,13	-7,22	8,34	1,299	900	1800	69,671	0,07	0,027	-1,76
170	propineb	12071-83-9	2,06	2,06	0,0048	1,933	900	1800	38,968	0,60	9,37E-7	-4,02
171	proquinazid	189278-12-4	3,86	-9,56	13,4	4,003	900	1800	107,26	2,27	0,235	0,78
172	quinoxifeno	124495-18-7	5,69	-6,40	11,1	23,97	5760	11520	684,27	3,11	1,014	3,35
173	sedaxano	874967-67-6	3,66	-8,55	12,2	5,086	900	1800	106,76	1,95	0,153	0,44
174	clorhidrato de oxitetraciclina	2058-46-0	-3,60	-28,2	24,6	0,982	900	1800	66,479	-0,05	8,32E-9	-5,06
175	siltiofam	175217-20-6	5,29	-5,84	11,1	2,000	900	1800	108,10	2,30	0,021	0,29
176	tetraconazol	112281-77-3	4,25	-6,76	10,3	11,68	5760	11520	630,74	2,58	0,297	2,61
177	tiofanato-metilo	23564-05-8	1,10	-7,31	8,71	1,676	2880	5760	196,66	0,14	0,038	-0,72
178	tiabendazol	148-79-8	2,00	-9,06	11,5	1,975	360	720	40,522	1,34	0,013	-1,41
179	tiocianato de (1,3-benzotiazol-2-iltio)metilo	21564-17-0	3,12	-5,54	8,77	1,259	900	1800	104,19	1,52	0,002	-0,84
180	triconazol	131983-72-7	4,11	-8,22	11,5	1,366	2880	5760	317,74	2,28	0,062	1,45
181	Tiram	137-26-8	1,70	-5,13	6,86	0,355	900	1800	72,391	0,65	9,49E-5	-2,46
182	tolclofos-metilo	57018-04-9	4,77	-2,20	6,76	2,119	2880	5760	302,30	2,48	2,90E-4	0,43
183	triadimefon	43121-43-3	2,94	-8,48	11,2	7,619	2880	5760	280,09	1,78	0,031	0,81
184	triadimenol	55219-65-3	2,95	-10,3	13,4	4,030	2880	5760	291,20	2,06	0,026	1,03
185	triflumizol	99387-89-0	1,50	-8,68	10,1	2,391	5760	11520	371,77	0,55	0,008	-0,17
186	triforina	26644-46-2	2,02	-6,81	9,01	1,948	17280	34560	1117,0	0,48	0,032	1,01
187	valifenalato	283159-90-0	2,97	-10,5	13,5	2,508	2880	5760	296,79	0,64	0,031	-0,03
188	Ziram	137-30-4	1,14	-7,60	8,83	0,936	900	1800	70,550	0,37	0,022	-1,56
189	2,4-DB-butilo	94-80-4	4,38	-4,70	9,08	15,72	900	1800	107,63	2,97	0,120	1,18
190	2,4-D-butilo	6753-24-8	5,36	-4,15	9,51	7,217	900	1800	108,01	3,52	0,025	1,27
191	2,4-D-dimetiamonio	2008-39-1	0,84	-13,7	14,4	20,94	2880	5760	189,52	0,14	1,50E-4	-1,93
192	picloram-dimetilamonio	55870-98-9	0,69	-9,68	10,4	1,853	5760	11520	22,480	0,06	0,001	-3,45
193	picloram-potasio	2545-60-0	-2,36	-50,1	47,7	173,2	2880	5760	187,86	0,53	1,45E-7	-3,10
194	picloram-triisopropanolamonio	6753-47-5	-3,05	-23,2	20,1	2,184	2880	5760	12,188	-0,05	2,95E-8	-6,27
195	picloram	1918-02-1	1,36	-6,98	8,88	128,4	2880	5760	212,97	0,58	0,379	0,17
196	ácido 2,4-Diclorofenoxiacético	94-75-7	2,62	-6,42	9,23	19,37	900	1800	99,947	1,84	0,444	0,52
197	triisopropanolamina	122-20-3	-1,22	-9,40	9,38	1,035	360	720	30,991	-0,04	0,002	-3,15
198	acetocloro	34256-82-1	3,37	-7,65	11,8	2,589	2880	5760	340,96	2,23	0,285	1,79
199	dicloromid	37764-25-3	2,28	-4,87	6,71	1,701	900	1800	73,107	0,80	0,002	-1,72

200	furilazol	121776-33-8	2,84	-8,43	10,6	1,030	2880	5760	225,66	0,81	0,014	-0,29
201	aclonifeno	74070-46-5	3,88	-6,17	10,2	10,08	2880	5760	339,64	2,02	0,216	1,57
202	acroleina	107-02-8	0,19	-2,30	2,29	4,971	360	720	19,198	-0,01	0,002	-3,50
203	amicarbazona	129909-90-6	1,24	-12,1	13,3	20,63	900	1800	70,570	0,10	0,001	-2,54
204	amitol	61-82-5	-0,47	-11,0	10,1	23,25	360	720	30,867	-0,05	3,92E-5	-3,94
205	asulam sodio	2302-17-2	-4,05	-12,7	8,61	4,991	900	1800	66,479	-0,05	8,70E-7	-4,07
206	asulam	3337-71-1	0,05	-10,2	9,89	4,868	900	1800	66,622	-0,04	2,90E-4	-2,83
207	atrazina	1912-24-9	2,82	-6,97	9,58	4,693	2880	5760	265,49	1,28	0,111	0,64
208	s-metolacloro	87392-12-9	3,24	-6,43	9,33	2,296	2880	5760	307,69	1,59	0,026	0,70
209	bensulfuron-metilo	83055-99-6	1,41	-12,8	15,2	0,611	900	1800	86,999	0,54	0,005	-1,56
210	bentazona	25057-89-0	1,67	-7,05	9,39	2,064	900	1800	90,753	1,35	0,044	-0,43
211	bentazona-sodio	50723-80-3	0,67	-7,14	7,81	3,709	900	1800	67,641	1,35	0,085	-0,55
212	biciclopirona	352010-68-5	1,46	-17,2	18,7	1,006	5760	11520	373,20	0,42	0,001	-0,73
213	bispiribac	125401-75-4	1,25	-14,4	15,6	0,858	2880	5760	194,29	0,40	0,001	-1,42
214	bispiribac-sodio	125401-92-5	-1,80	-13,8	12,8	0,824	2880	5760	187,89	0,39	3,14E-6	-2,56
215	carfentrazona	128621-72-7	3,48	-11,2	14,6	26,64	2880	5760	321,25	1,57	0,075	0,95
216	carfentrazona-etilo	128639-02-1	4,26	-6,92	10,3	25,69	5760	11520	605,24	0,81	0,375	1,26
217	cihalofop	122008-78-0	2,71	-9,65	12,4	5,383	900	1800	98,425	1,71	0,018	-0,28
218	cihalofop-butilo	122008-85-9	4,47	-6,42	9,73	5,658	2880	5760	318,38	1,92	0,108	1,29
219	cletodima	99129-21-2	4,21	-9,32	13,5	22,57	900	1800	107,74	2,53	0,516	1,15
220	clodinafop-propargilo	105512-06-9	3,12	-6,95	10,8	4,797	5760	11520	659,98	1,49	0,176	1,69
221	cloquintocet-mexilo	99607-70-2	5,28	-7,48	12,5	4,660	900	1800	108,08	1,95	1,869	0,97
222	clomazona	81777-89-1	2,86	-5,77	8,27	5,839	900	1800	93,527	1,44	0,048	-0,32
223	clopiralid	1702-17-6	1,63	-7,82	8,88	229,0	2880	5760	192,07	0,22	0,059	-0,59
224	cloridazona	1698-60-8	0,76	-7,87	9,01	3,192	900	1800	69,862	0,34	0,039	-1,47
225	clorsulfuron	64902-72-3	2,26	-13,9	15,9	50,95	2880	5760	218,30	0,53	0,003	-0,85
226	metsulfuron-metilo	74223-64-6	2,00	-14,3	16,5	49,79	2880	5760	231,21	0,48	0,005	-0,74
227	dibromuro de diquat	85-00-7	-2,82	-11,2	8,42	5,426	900	1800	66,479	-0,05	2,29E-5	-3,38
228	dicamba	1918-00-9	2,14	-7,75	9,96	43,00	900	1800	87,714	1,25	0,073	-0,43
229	nicosulfuron	111991-09-4	-1,15	-16,2	16,3	0,587	2880	5760	188,24	-0,04	3,39E-5	-2,39
230	dicamba-dimetilamonio	2300-66-5	1,13	-14,6	15,8	17,38	2880	5760	192,78	0,37	4,50E-4	-1,51
231	dicamba-sodio	1982-69-0	-0,90	-6,84	5,94	26,43	900	1800	66,457	1,25	0,368	-0,33
232	diclobenilo	1194-65-6	2,83	-3,38	6,12	753,4	900	1800	93,670	1,73	15,67	1,13
233	dicloruro de paraquat	1910-42-5	-2,71	-10,9	6,38	5,934	2880	5760	187,85	-0,05	5,19E-5	-2,31
234	diclosulam	145701-21-9	3,51	-11,5	15,0	12,54	5760	11520	625,25	2,32	0,106	2,19
235	diflufenican	83164-33-4	3,53	-4,88	9,78	35,99	17280	34560	2009,0	2,96	0,589	4,06
236	isoproturon	34123-59-6	2,84	-8,34	11,2	2,303	900	1800	100,90	1,35	0,036	-0,38
237	propisocloro	86763-47-5	3,79	-5,60	9,10	2,310	2880	5760	325,08	1,94	0,007	0,74
238	dimetenamida-p	163515-14-8	2,57	-5,48	7,37	2,452	2880	5760	217,57	0,65	0,006	-0,62
239	diuron	330-54-1	2,67	-7,69	10,4	11,80	900	1800	97,898	1,04	0,084	-0,47
240	etamsulfuron-metilo	97780-06-8	2,43	-13,1	14,7	14,05	2880	5760	201,28	0,20	0,001	-1,37
241	etofumesato	26225-79-6	2,89	-5,82	8,52	2,412	900	1800	97,643	1,68	0,010	-0,42
242	desmedifam	13684-56-5	3,22	-8,16	11,6	1,406	900	1800	105,65	1,03	0,074	-0,44
243	fenmedifam	13684-63-4	3,27	-10,5	14,1	0,822	900	1800	106,53	1,46	0,127	0,01

244	lenacilo	2164-081	3,09	-8,50	11,6	2,756	900	1800	103,45	1,48	0,048	-0,20
245	flazasulfuron	104040-78-0	1,08	-9,60	10,7	0,636	5760	11520	366,60	0,06	0,001	-0,95
246	florpirauxifeno bencilo	1390661-72-9	5,05	-12,8	17,8	13,24	17280	34560	2037,2	1,89	2,874	3,58
247	fluazifop-p-butilo	79241-46-6	5,34	-5,07	9,57	4,253	2880	5760	342,66	2,15	0,013	1,09
248	flucarbazona-sodio	181274-17-9	1,00	-13,6	14,6	21,45	2880	5760	187,86	0,52	5,58E-7	-2,82
249	flufenacet	142459-58-3	2,39	-6,63	9,83	7,354	5760	11520	579,56	1,98	0,176	1,96
250	flurtamona	96525-23-4	2,87	-7,16	10,4	1,440	2880	5760	313,77	2,14	0,035	1,21
251	flumetsulam	98967-40-9	1,50	-11,0	12,5	23,21	5760	11520	362,37	0,59	9,35E-5	-1,12
252	flumioxazina	103361-09-7	1,34	-4,59	7,14	2,260	2880	5760	231,54	1,50	0,003	-0,09
253	fluroxipir-meptilo	81406-37-3	4,82	-5,65	10,2	2,717	5760	11520	681,55	2,01	0,012	1,55
254	fomesafeno	72178-02-0	3,41	-10,5	13,4	86,97	5760	11520	525,83	1,87	0,026	1,39
255	foramsulfuron	173159-57-4	-0,82	-14,6	15,2	0,587	2880	5760	189,34	-0,01	1,30E-4	-2,07
256	yodosulfuron-metilo-sodio	144550-36-7	1,83	-12,2	14,0	50,69	2880	5760	209,81	0,80	0,002	-0,76
257	glifosato-dimetilamonio	34494-04-7	-3,51	-16,2	12,7	0,896	360	720	30,851	-0,05	1,05E-8	-5,68
258	glifosato-isopropilamonio	38641-94-0	-4,77	-10,1	4,67	1,625	360	720	30,851	-0,05	3,40E-4	-3,48
259	glifosato-potasio	70901-12-1	-7,66	-37,4	29,7	1,628	360	720	30,851	-0,05	7,25E-13	-7,70
260	glifosato-monoamonio	40465-66-5	-5,62	-25,1	19,5	1,719	360	720	30,851	-0,05	7,95E-11	-6,71
261	glufosinato-amonio	77182-82-2	-5,34	-22,0	16,6	4,178	360	720	30,851	-0,05	1,51E-10	-6,57
262	halosulfuron-metilo	100784-20-1	0,40	-13,4	13,4	0,632	2880	5760	188,21	-0,04	3,18E-5	-2,40
263	haloxifop-p-metilo	72619-32-0	3,67	-4,89	8,94	6,138	5760	11520	656,87	1,55	2,24E-2	1,30
264	hexazinona	51235-04-2	2,15	-10,0	11,9	1,423	900	1800	79,487	0,29	0,003	-1,96
265	imazamox	114311-32-9	1,35	-16,4	17,2	5,995	2880	5760	189,86	0,00	1,80E-4	-2,00
266	imazapir	81334-34-1	1,57	-14,5	14,8	8,623	2880	5760	188,48	-0,03	5,50E-5	-2,28
267	imazapic	104098-48-8	2,11	-14,5	17,0	8,534	2880	5760	253,12	0,56	0,010	-0,47
268	imazetapir-amonio	101917-66-2	-0,26	-22,7	22,4	8,176	2880	5760	188,06	-0,04	1,82E-5	-2,52
269	indaziflam	950782-86-2	4,36	-7,97	12,3	3,973	2880	5760	342,77	1,28	0,613	1,23
270	isoxaflutol	141112-29-0	2,25	-8,12	10,4	21,94	2880	5760	240,41	1,28	0,036	0,31
271	tiencarbazona-metilo	317815-83-1	1,49	-15,7	17,2	24,25	900	1800	73,370	0,17	0,001	-2,33
272	ciprosulfamida	221667-31-8	2,30	-12,1	14,4	3,997	900	1800	89,864	1,21	0,007	-0,95
273	linuron	330-55-2	2,91	-6,59	9,79	12,41	2880	5760	312,42	1,55	0,298	1,20
274	MCPA-dimetilamonio	2039-46-5	0,74	-14,1	14,8	10,58	900	1800	67,897	0,15	1,80E-4	-2,77
275	MCPA-potasio	5221-16-9	2,52	-7,27	10,5	10,17	360	720	42,710	2,15	0,179	-0,18
276	MCPA-sodio	3653-48-3	-1,29	-6,25	5,00	13,37	360	720	30,693	1,99	0,291	-0,49
277	mesotriona	104206-82-8	1,49	-8,31	9,21	17,64	2880	5760	190,79	0,09	0,019	-0,94
278	benoxacor	98730-04-2	2,38	-5,51	8,21	2,762	2880	5760	266,52	1,67	0,008	0,40
279	metamitrona	41394-05-2	1,44	-10,4	11,2	6,595	360	720	31,777	0,14	3,80E-4	-3,29
280	metazacloro	67129-08-2	2,38	-7,64	9,77	2,174	2880	5760	226,29	1,13	0,045	0,19
281	metribuzina	21087-64-9	1,49	-8,32	10,0	7,028	900	1800	76,611	0,70	0,019	-1,25
282	molinato	2212-67-1	2,91	-3,78	6,99	4,145	900	1800	100,04	1,46	0,007	-0,65
283	napropamida	15299-99-7	3,33	-7,46	10,8	0,552	900	1800	105,48	2,13	0,016	0,09

284	orizalina	19044-88-3	2,73	-7,11	10,8	5,347	2880	5760	334,17	1,22	0,182	0,90
285	oxadiargilo	39807-15-3	4,11	-6,03	9,98	5,160	2880	5760	338,22	2,85	0,061	1,94
286	Oxifluoreno	42874-03-3	5,21	-4,48	9,21	11,13	5760	11520	677,31	3,32	0,060	2,90
287	pendimetalina	40487-42-1	4,82	-3,17	8,37	4,239	2880	5760	335,81	1,99	0,005	0,75
288	Penoxsulam	219714-96-2	2,95	-12,2	15,2	2,130	5760	11520	361,89	1,85	1,70E-5	-0,50
289	Pinoxadeno	243973-20-8	3,59	-9,43	12,6	1,076	2880	5760	312,67	1,85	0,052	1,07
290	piroxasulfona	447399-55-5	1,58	-7,91	9,49	2,867	5760	11520	376,67	0,61	0,035	0,19
291	Piroxsulam	422556-08-9	1,94	-13,9	15,9	2,147	5760	11520	394,14	0,77	0,003	-0,17
292	propaquizaifop	111479-05-1	4,59	-9,90	14,5	4,402	2880	5760	343,96	1,98	1,192	1,91
293	Propizamida	23950-58-5	3,57	-6,40	9,83	9,693	2880	5760	324,08	2,01	0,223	1,53
294	prosulfocarb	52888-80-9	4,23	-6,28	10,9	3,934	900	1800	107,99	1,65	0,090	0,10
295	Quinclorac	84087-01-4	2,97	-9,51	12,5	100,5	900	1800	102,17	1,71	0,032	-0,12
296	quizalofop-p-etilo	100646-51-3	4,35	-6,36	10,6	4,513	2880	5760	342,14	1,79	0,097	1,23
297	quizalofop-etilo	76578-14-8	4,35	-6,36	10,6	4,513	2880	5760	342,14	1,79	0,097	1,23
298	quizalofop-p-tefurilo	119738-06-6	4,38	-7,64	12,0	2,672	2880	5760	342,50	1,70	0,406	1,46
299	Rimsulfuron	122931-48-0	0,03	-7,58	7,87	0,611	2880	5760	188,51	-0,03	0,013	-1,12
300	saflufenacilo	372137-35-4	1,48	-13,9	15,3	3,679	17280	34560	1068,3	0,44	0,001	0,22
301	Simazina	122-34-9	2,40	-7,41	9,59	7,201	2880	5760	229,73	1,06	0,103	0,33
302	sulfosulfuron	141776-32-1	0,99	-9,03	9,76	0,606	2880	5760	189,85	0,00	0,003	-1,38
303	Tembotriona	335104-84-2	3,00	-13,2	15,3	14,79	5760	11520	412,24	0,94	0,005	0,10
304	tepraloxidima	149979-41-9	3,25	-10,5	13,8	21,12	900	1800	104,78	2,03	0,059	0,28
305	Terbacilo	5902-51-2	1,75	-8,31	10,2	17,14	900	1800	80,324	0,53	0,021	-1,33
306	terbutilazina	5915-41-3	3,27	-6,03	9,43	13,55	2880	5760	322,28	1,89	0,264	1,46
307	tifensulfuron-metilo	79277-27-3	1,27	-11,8	13,3	41,43	2880	5760	200,46	0,19	0,001	-1,40
308	Tolpiralato	1101132-67-5	2,13	-15,6	17,8	2,470	2880	5760	226,33	1,03	0,004	-0,37
309	topramezona	210631-68-8	1,14	-17,9	19,1	1,002	900	1800	69,867	0,20	4,60E-4	-2,52
310	Tralkoxidima	87820-88-0	4,87	-8,01	12,5	0,832	900	1800	107,91	2,18	0,426	0,84
311	Triasulfuron	82097-50-5	2,44	-10,9	12,0	12,69	5760	11520	366,82	0,06	4,70E-4	-1,17
312	triclopir-butotilo	64700-56-7	4,01	-5,61	9,62	5,575	2880	5760	341,97	2,19	0,040	1,35
313	Trifluralina	1582-09-8	5,31	-2,38	7,72	5,347	5760	11520	615,67	3,25	0,003	2,11
314	trisulfuron-metilo	126535-15-7	3,94	-12,3	15,9	33,11	17280	34560	1674,1	0,82	0,119	1,91
315	Tritosulfuron	142469-14-5	3,00	-7,49	10,5	134,2	17280	34560	1363,8	1,51	0,157	2,32
316	mefenpir-dietilo	135590-91-9	4,82	-7,32	11,2	23,53	2880	5760	336,40	1,49	0,340	1,25
317	mesosulfuron-metilo	208465-21-8	0,80	-14,4	15,7	0,604	2880	5760	196,60	0,14	0,001	-1,54
318	1-metilciclopropeno	3100-04-7	2,03	0,26	1,77	1,474	360	720	18,737	1,02	1,10E-6	-4,30
319	NAA-potasio	15165-79-4	-0,84	-14,0	13,2	3,554	360	720	30,872	1,22	4,82E-6	-3,40
320	3-(polioxietilen)propilheptametiltrisiloxano	27306-78-1	6,65	-0,62	7,27	4,537	900	1800	105,44	5,91	6,32E-5	1,83
321	6-benciladenina	1214-39-7	1,23	-11,4	13,0	0,601	900	1800	74,495	0,25	0,001	-2,21
322	acibenzolar-s-metil	135158-54-2	1,55	-5,31	8,41	16,17	900	1800	102,74	1,73	0,178	0,26
323	ácido 2-naftiloxiacético	120-23-0	2,50	-7,17	9,70	0,627	360	720	40,799	1,54	0,009	-1,32
324	4-CPA	122-88-3	1,97	-6,30	8,55	11,59	360	720	39,223	1,27	0,250	-0,86

325	ácido giberélico	77-06-5	0,45	-13,2	13,4	0,975	2880	5760	188,51	0,00	5,78E-5	-2,24
326	ácido indol-3-ilocético	87-51-4	1,49	-9,53	10,9	0,638	360	720	33,764	0,53	0,002	-2,59
327	ácido s-abscísico	21293-29-8	2,38	-11,9	14,3	0,874	900	1800	91,727	1,34	0,008	-0,79
328	alcohol tridecílico etoxilado	38471-49-7	4,99	-4,29	9,28	3,543	360	720	43,234	2,51	0,006	-0,60
329	alcohol decílico etoxilado	23238-40-6	3,51	-4,66	8,17	4,012	360	720	42,744	1,97	0,009	-0,95
330	Dimetilpolisiloxano	107-51-7	6,70	3,07	3,63	102,6	900	1800	42,446	6,23	0,003	2,07
331	cianamida hidrogenada	420-04-2	-0,81	-5,96	5,14	-	360	720	30,433	-0,05	2,45E-11	-6,97
332	Cinetina	525-79-1	0,60	-12,3	12,9	0,415	900	1800	67,516	-0,01	1,30E-4	-2,96
333	Aviglicina	49669-74-1	-4,46	-12,1	7,66	4,836	208,08	416,16	19,534	-0,05	3,01E-6	-4,88
334	Clorprofam	101-21-3	3,30	-4,63	8,14	3,237	900	1800	104,88	2,00	0,006	-0,24
335	cloruro de clomequat	999-81-5	-3,44	-12,2	8,38	17,44	900	1800	66,479	-0,05	2,59E-6	-3,84
336	cloruro de colina	67-48-1	-5,16	-14,1	8,92	6,886	360	720	30,851	-0,05	3,30E-8	-5,43
337	cloruro de mepiquat	24307-26-4	-2,82	-9,75	6,93	4,562	360	720	30,851	-0,05	0,001	-3,33
338	prohexadiona-calcio	127277-53-6	-2,58	-2,58	0,0032	1,348	900	1800	42,248	-0,05	2,40E-4	-3,28
339	diclorprop-p-2-etilhexilo	865363-39-9	6,69	-2,93	9,62	7,743	900	1800	108,06	5,02	0,015	2,33
340	Difenilamina	122-39-4	3,29	-3,96	7,46	0,642	900	1800	103,37	2,39	1,80E-4	-0,67
341	Etefon	16672-87-0	-0,25	-9,63	9,41	121,9	900	1800	66,639	-0,03	0,001	-2,58
342	Flumetralina	62924-70-3	6,09	-4,11	9,56	6,536	17280	34560	2008,9	2,53	0,021	3,02
343	forclorfenuron	68157-60-8	2,42	-9,92	13,1	2,525	900	1800	104,41	0,80	0,053	-0,70
344	ácido 4-indol-3-ilbutírico	133-32-4	2,84	-9,28	11,6	0,629	360	720	39,595	1,29	0,008	-1,56
345	ácido metilacético	79-09-4	0,58	-4,74	5,07	92,49	208,08	416,16	18,928	0,03	1,987	-2,01
346	1,2-butilenglicol	584-03-2	-0,29	-6,62	6,28	8,078	208,08	416,16	19,540	-0,04	0,184	-2,54
347	paclobutrazol	76738-62-0	3,36	-8,47	11,7	7,654	2880	5760	312,67	2,16	0,063	1,35
348	Tidiazuron	51707-55-2	2,10	-10,9	12,6	2,214	900	1800	77,899	0,26	0,002	-2,06
349	Triclopir	55335-06-3	2,53	-7,40	9,93	26,41	2880	5760	258,43	1,54	0,146	0,88
350	trinexapac-etilo	95266-40-3	0,63	-4,11	5,71	1,350	360	720	31,202	0,20	8,36E-4	-3,09
351	Uniconazol	83657-22-1	3,28	-4,13	7,80	1,319	900	1800	104,80	2,65	8,10E-4	-0,15
352	uniconazol-p	83657-17-4	3,28	-4,13	7,80	1,319	900	1800	104,80	2,65	8,10E-4	-0,15
353	(E)-11-tetradecen-1-ol	35153-18-5	5,54	-2,22	7,76	1,375	360	720	42,966	2,91	1,30E-4	-1,11
354	acetato de (E)-11-tetradecen-1-ilo	26532-95-6	6,54	-0,60	7,14	1,375	360	720	42,785	2,52	5,24E-6	-2,10
355	Codlemona	33956-49-9	4,34	-2,61	6,95	0,831	208,08	416,16	24,796	2,64	9,43E-5	-1,86
356	1-dodecanol	112-53-8	4,77	-3,04	8,17	7,054	360	720	43,071	2,65	0,012	-0,35
357	1-tetradecanol	112-72-1	5,75	-2,18	8,21	6,106	360	720	43,087	2,91	0,002	-0,48
358	(E,Z)-2,4-decadienoato de etilo	3025-30-7	4,36	-1,51	5,87	2,266	360	720	40,292	2,18	7,78E-5	-1,84
359	acetato de (E,Z,Z)-3,8,11-tetradecatrienilo	163041-94-9	6,11	-0,71	6,82	0,458	360	720	42,609	2,81	6,29E-7	-2,32
360	acetato de (E,Z)-3,8-tetradecadienilo	163041-87-0	6,33	-0,66	6,99	0,688	360	720	42,712	2,68	1,35E-6	-2,26
361	acetato de (Z)-8-dodecen-1-ilo	28079-04-1	5,56	-0,85	6,41	2,116	360	720	42,124	2,37	1,65E-5	-1,98

362	acetato de (E)-8-dodecen-1-ilo	38363-29-0	5,56	-0,85	6,41	1,375	360	720	42,122	2,37	6,96E-6	-2,17
363	(Z)-8-dodecen-1-ol	40642-40-8	4,55	-2,46	7,01	2,116	208,08	416,16	24,817	2,60	4,77E-4	-1,55
364	ácido 2-propenóico	79-10-7	0,44	-4,82	5,17	13,20	208,08	416,16	18,576	0,04	8,97E-2	-2,68
365	1,3-butadieno	106-99-0	2,03	0,48	1,51	22,96	360	720	19,000	1,00	4,65E-4	-3,03
366	etilbenceno	100-41-4	3,03	-0,49	3,64	21,59	360	720	18,907	1,87	7,97E-4	-2,25
367	nonilfenol etoxilado	104-35-8	5,58	-5,17	10,8	2,657	360	720	43,267	2,96	0,011	-0,13

ANEXO 2: Lista PCBs con sus propiedades

	logKow	logKaw	logKoa	t _{1/2} a[hr]	t _{1/2} w[hr]	t _{1/2} s[hr]	Pov[días]	logBAF	TE[%]	P-B-LRT
PCB1	4,79	-2,00	6,79	58,57	5500	17000	727,37	3,37	0,15	3,19
PCB2	5,23	-2,00	7,23	97,20	5500	17000	809,82	5,01	0,40	4,77
PCB3	5,67	-2,00	7,67	161,3	17000	55000	2061,1	4,75	1,14	5,60
PCB4	6,11	-2,00	8,11	267,7	55000	55000	2380,3	6,25	3,20	4,64
PCB5	6,55	-2,00	8,55	444,3	55000	55000	2746,4	6,68	8,49	7,77
PCB6	6,99	-2,00	8,99	737,3	55000	55000	3047,6	6,94	19,9	8,24
PCB7	7,43	-2,00	9,43	1224	55000	55000	3218,2	6,51	37,4	8,09
PCB8	7,88	-2,00	9,88	2031	55000	55000	3285,6	6,99	51,7	8,54
PCB9	8,32	-2,50	10,8	3370	55000	55000	3305,6	6,79	26,1	4,25
PCB10	8,76	-2,75	11,5	5593	55000	55000	3306,2	6,83	15,9	8,18

ANEXO 3: Lista completa productos de degradación y propiedades

	CAS*	logKow	logKaw	logKoa	t _{1/2} a[hr]	t _{1/2} w[hr]	t _{1/2} s[hr]	Pov[días]	logBAF	TE[%]	P-B-LRT
methamidophos	10265-92-6	-0,80	-7,45	6,65	3,881	360	720	30,867	-0,05	0,07	-25
acequinocyl-OH	57960-31-3	7,17	-8,80	15,9	2,015	360	720	43,271	5,54	12,3	3,35
AKM-18		6,05	-9,14	15,2	6,767	360	720	43,270	3,40	9,43	1,64
3-phenoxybenzaldehyde	39515-51-0	3,38	-4,92	8,30	5,283	900	1800	104,54	2,24	1,70E-2	0,17
3-phenoxybenzoic acid	3739-38-6	3,91	-7,01	10,9	18,92	360	720	43,143	2,44	0,426	0,24
anthranilic acid	118-92-3	1,21	-8,81	10,0	3,179	360	720	32,863	0,32	0,006	-2,52
bromadiolone metabolite Unk 1		8,96	-8,26	17,2	4,476	2880	5760	346,01	3,04	12,7	3,24
1-naphthol	90-15-3	2,85	-5,61	8,46	0,641	360	720	41,817	1,72	5,00E-4	-1,75
Nereistoxin	1631-58-9	1,38	-4,84	6,22	0,396	900	1800	64,987	0,32	9,61E-05	-2,82
chlorpyrifos oxon	5598-15-2	2,89	-6,65	9,54	3,318	2880	5760	289,94	1,38	0,061	0,67
3,5,6-trichloro-2-pyridinol	6515-38-4	3,21	-6,11	9,32	665,0	2880	5760	312,87	1,50	2,42	1,61
omethoate	1113-02-6	-0,74	-11,7	11,0	4,938	360	720	30,878	-0,05	1,34E-05	-4,16
diazoxon	962-58-3	2,07	-8,11	10,2	2,938	900	1800	84,378	0,91	0,027	-0,94
oxyypyrimidine	2814-20-2	0,55	-7,57	8,12	4,772	360	720	31,351	0,03	0,068	-2,29
1,3-dimethyl-5-phenoxy-pyrazole-4-carbonitrile		3,65	-16,5	20,2	1,952	5760	11520	640,38	1,45	0,146	1,60
phosmet oxon	3735-33-9	0,72	-9,10	9,82	1,286	900	1800	67,835	0,12	0,003	-2,19
malaoxon	1634-78-2	0,52	-7,66	8,18	5,256	360	720	31,319	0,07	0,062	-2,28
methyl isothiocyanate	556-61-6	0,94	-2,61	3,55	8,480	360	720	19,558	0,19	0,010	-2,99
methomyl oxime	13749-94-5	1,12	-5,59	6,71	48,84	360	720	31,999	0,30	1,091	-1,47
methoxyfenozide M08		2,81	-14,5	17,4	3,740	2880	5760	283,59	1,74	0,021	0,71
oxamyl oxime	30558-43-1	-0,71	-10,6	9,84	6,800	360	720	30,880	-0,05	1,18E-4	-3,70
3-phenoxybenzyl alcohol	13826-35-2	3,13	-6,71	9,84	6,244	360	720	42,539	1,77	0,150	-0,51
hydroxypyrimidine	557-01-7	-1,62	-4,72	3,10	3,490	360	720	28,041	-0,05	0,007	-2,93
2-n-octil-4-isotiazolin-3-ona	26530-20-1	2,45	-6,07	8,52	3,260	360	720	40,321	1,33	0,026	-1,26
2-metil-4-isotiazolin-3-ona	2682-20-4	-0,83	-5,69	4,86	4,783	360	720	30,169	-0,05	0,030	-2,55
M650F01		0,82	-14,9	15,8	3,793	900	1800	68,172	0,06	2,19E-4	-2,80
R234886		1,29	-14,0	15,3	2,619	900	1800	71,109	0,47	6,46E-4	-2,22
4-hydroxy-2,5,6-trichloroisophthalonitrile	28343-61-5	3,09	-9,06	12,2	442,4	2880	5760	305,58	1,71	0,044	0,91
1,3-dicarbamoyl-2,4,5,6-tetrachlorobenzene	1786-86-3	0,93	-10,8	11,7	30,82	5760	11520	365,18	0,04	3,52E-4	-1,26
methyl N-malonyl-N-(2,6-xylyl)alaninate		1,23	-11,5	12,8	5,623	360	720	32,942	0,13	5,74E-4	-3,17
N-(2,6-xylyl)-N-malonyl alanine		0,78	-14,0	14,8	4,820	360	720	31,683	0,13	2,00E-4	-3,43
carbendazim	10605-21-7	1,52	-9,06	10,6	0,640	900	1800	73,776	0,38	0,004	-1,87
butyl isocyanate	111-36-4	2,26	-1,05	3,31	20,12	208,08	416,16	11,586	1,17	0,002	-2,99
bis(tiocianato) de metileno	6317-18-6	0,34	-5,97	6,31	2,259	360	720	30,759	-0,004	0,011	-2,71
etaboxam	162650-77-3	3,09	-17,4	20,5	3,618	2880	5760	305,58	0,79	0,041	0,18
IN-JS940	157874-97-0	2,83	-8,09	11,0	10,70	900	1800	100,33	1,76	0,051	0,0034
IN-KZ007		4,41	-14,0	18,4	1,505	2880	5760	343,07	2,39	0,798	2,14

1,2 dihydro-triazolone	930-33-6	-1,36	-7,54	6,18	18,10	360	720	30,854	-0,05	0,100	-2,28
CGA107955		1,55	-9,71	11,3	4,555	360	720	34,543	0,48	0,002	-2,61
CGA108906		2,18	-14,7	16,9	7,112	360	720	38,842	1,01	0,005	-1,90
SN512723	767-15-7	0,97	-3,74	4,71	1,479	900	1800	51,489	0,17	8,90E-4	-2,67
5-Methyloxazol-2(3H)-one	13627-02-6	0,18	-4,59	4,77	24,18	360	720	28,317	-0,03	0,240	-2,15
butyric acid	107-92-6	0,79	-4,66	5,45	47,58	208,08	416,16	18,978	0,16	0,760	-2,11
CL197675		2,96	-14,1	17,0	0,629	2880	5760	296,01	1,58	0,030	0,70
CL197676		3,72	-14,1	17,8	1,843	2880	5760	333,96	1,98	0,170	1,47
2-AB (sec-butylamine)	13952-84-6	0,74	-2,20	2,94	2,873	360	720	19,103	0,15	0,001	-3,65
5-hydroxythiabendazole	948-71-0	1,52	-13,1	14,6	0,916	360	720	34,366	0,31	0,001	-2,86
benzimidazole	51-17-2	1,32	-4,82	6,14	3,565	360	720	31,063	0,45	0,007	-2,44
DM-TM		4,71	-5,48	10,2	2,216	2880	5760	344,10	2,92	0,006	1,53
IR5885-acid		2,69	-13,0	15,7	2,469	900	1800	98,078	0,85	0,016	-0,96
4-chlorobenzoic acid	74-11-3	2,65	-5,48	8,13	124,9	900	1800	96,592	1,62	2,800	0,70
2,4-DB-butilo	94-80-4	4,38	-4,70	9,08	15,72	900	1800	107,63	2,97	0,100	1,18
2,4-D-butotilo	6753-24-8	5,36	-4,15	9,51	7,217	900	1800	108,01	3,52	0,025	1,27
bensulfon-metilo	83055-99-6	2,13	-12,8	15,2	0,611	900	1800	85,803	0,54	0,005	-1,59
Methyl 2-(aminosulfonylmethyl)benzoate	112941-26-1	0,37	-7,35	7,72	14,17	360	720	31,182	-0,03	0,140	-2,19
4,6-dimethoxy-2-aminopyrimidine	36315-01-2	0,95	-4,36	5,31	0,636	900	1800	58,025	0,18	2,00E-4	-2,87
cloquintocet	88349-88-6	2,12	-10,2	12,3	6,103	360	720	38,441	1,09	0,005	-1,86
chloridazone-desphenyl	6339-19-1	-1,59	-10,3	8,70	3,855	900	1800	66,485	-0,05	2,10E-4	-2,92
chloridazone-methy-desphenyl	17254-80-7	-1,37	-9,94	8,57	2,961	900	1800	66,490	-0,05	4,5E-4	-2,75
2,5-DIOH		2,30	-10,5	12,8	61,54	900	1800	89,864	0,69	0,007	-1,35
5-OH-dicamba	7600-50-2	1,66	-10,8	12,5	41,34	900	1800	75,923	0,72	0,002	-1,78
DCSA	3401-80-7	2,78	-6,50	9,28	40,18	900	1800	99,512	1,48	0,690	0,33
ASDM	112006-75-4	-2,08	-11,8	9,68	7,914	900	1800	66,481	-0,05	7,15E-06	-3,63
AUSN		-4,55	-20,9	16,4	2,167	2880	5760	183,45	-0,05	9,34E-10	-4,64
2,6-dichlorobenzamide	2008-58-4	0,77	-7,30	8,07	44,57	900	1800	67,983	0,12	0,180	-1,34
4-isopropylaniline	99-88-7	2,49	-3,82	6,31	0,974	900	1800	84,326	1,40	4,00E-4	-1,46
ethyl 3-hydroxycarbamate	7159-96-8	1,41	-9,91	11,3	0,627	360	720	33,764	0,22	0,001	-2,91
M1		1,90	-12,7	14,6	0,639	900	1800	80,539	0,31	0,003	-1,94
2-Hydroxy-5-(trifluoromethyl)pyridine	33252-63-0	0,71	-5,24	5,95	4,233	900	1800	63,413	0,09	0,014	-1,96
MPA		-1,10	-11,2	10,1	85,77	208,08	416,16	19,541	-0,05	2,60E-05	-4,42
BYH 18636-CARBOXYLIC ACID	936331-72-5	1,54	-18,2	19,8	22,42	900	1800	74,058	0,18	0,001	-2,28
PCOC	1570-64-5	2,78	-4,34	7,12	10,51	900	1800	94,925	1,48	0,049	-0,27
metamitron-desamino	36993-94-9	2,46	-7,24	9,70	12,88	360	720	40,469	1,05	0,160	-1,09
metazachlor OXA		0,56	-12,5	13,1	2,165	360	720	31,366	0,08	1,20E-4	-3,58
prosulfocarb sulfoxide		1,69	-8,62	10,3	3,557	900	1800	76,436	0,64	0,011	-1,44
3-OH-CQO	6639-79-8	2,30	-13,0	15,3	11,73	900	1800	89,867	0,51	0,007	-1,49
quizalofop-p-tefurilo	119738-06-6	4,32	-7,64	12,0	2,672	2880	5760	342,50	1,70	0,410	1,46
BCS-AA25052	36315-01-2	0,95	-4,36	5,31	0,636	900	1800	58,025	0,18	2,00E-4	-2,87
BCS-AB40283	151331-81-6	0,58	-8,34	8,92	0,633	900	1800	67,468	-0,02	0,011	-2,05

CGA210007	35272-27-6	1,23	-8,85	10,1	41,25	360	720	32,942	0,29	0,006	-2,56
SYN546642		1,60	-9,74	11,3	15,48	360	720	34,848	0,24	0,002	-2,77
2-hydroxy-4-chlorophenoxyacetic acid	7417-89-2	1,24	-10,3	11,5	5,090	360	720	32,983	0,36	0,001	-2,93
4-chlorocatechol	2138-22-9	1,68	-8,75	10,4	7,820	360	720	35,363	0,48	0,008	-2,28
dyciandiamide	461-58-5	-1,15	-8,04	6,89	3,060	360	720	30,860	-0,05	0,028	-2,55
photothiazuron	71769-74-9	2,10	-9,78	11,9	2,210	900	1800	85,089	0,45	0,005	-1,66
trinexapac acid	104273-73-6	1,80	-9,99	11,8	1,320	360	720	36,183	0,70	0,003	-2,34
1,2-epoxybutene	930-22-3	0,73	-2,19	2,92	4,800	360	720	19,120	0,12	0,002	-3,46

*Algunos de los productos de degradación encontrados no cuentan con número CAS.