



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

**“PREDICCIÓN DE POTENCIALES TRANSPORTES Y DESTINOS  
AMBIENTALES PARA COMPUESTOS ORGÁNICOS ENCONTRADOS EN  
DISTINTAS CIUDADES DE CHILE MEDIANTE LA INTERFAZ DE PROGRAMAS  
DE ESTIMACIÓN (EPI-SUITE)”**

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

**FERNANDA IGNACIA LAGOS ROBLES**

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

Agosto 2021  
Santiago - Chile



**INFORME DE APROBACIÓN SEMINARIO DE TITULO**

**“PREDICCIÓN DE POTENCIALES TRANSPORTES Y DESTINOS**

**AMBIENTALES PARA COMPUESTOS ORGÁNICOS ENCONTRADOS EN**

**DISTINTAS CIUDADES DE CHILE MEDIANTE LA INTERFAZ DE PROGRAMAS**

**DE ESTIMACIÓN (EPI-SUITE)”**

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 Sr(ta) Fernanda Ignacia Lagos Robles

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

**Director Seminario de Título:** \_\_\_\_\_

**Comisión Revisora y Evaluadora**

**Presidente Comisión:** \_\_\_\_\_

**Evaluador:** \_\_\_\_\_

**Santiago de Chile, .....**

## BIOGRAFÍA



**Fernanda Ignacia Lagos Robles**

Nació en Santiago, Chile en 1995, junto a su melliza, Catalina. Cursa sus primeros estudios en el colegio Santa María de la Cordillera, en el cual nace su interés por las ciencias debido a los talleres y ferias científicas. Ingresa a la carrera de Química ambiental de la Universidad de Chile en el año 2015, con la convicción de lograr ser un aporte en el futuro en el área de las ciencias ambientales. Termina sus estudios realizando su seminario título por medio del FONDECYT 11180151.

## **AGRADECIMIENTOS**

Agradezco a todos los que han sido parte de mi trayectoria en la carrera y parte de esta etapa de seminario de título, me gustaría agradecerle a todos los que contribuyeron en el desarrollo de este proyecto, a los fondos obtenidos del proyecto ANID FONDECYT 11180151 y en particular a mi profesor guía Carlos Manzano, que desde un inicio creyó en mí, alentándome por la investigación, guiándome y apoyando en todo momento.

Agradezco también a mi familia, a mi padre Rodrigo, mi madre Mónica y mis hermanos Catalina y Vicente, por siempre acompañarme en cada proceso de mi vida. Así mismo, a mi Wati por ser parte de este proceso con mucha paciencia y cariño. No obstante, no puedo dejar fuera a mis mascotas, Nymeria, Nachita, Thor y Aura que fueron la compañía durante varias jornadas de trabajo a lo largo de la carrera.

Finalmente, agradecer a mis amigos Danielita, Sebita, Gabi y Mauri con quienes compartí toda la carrera e hicieron agradable y entretenida la estadía en la Universidad, siempre dándonos ánimo con las “estudiatones” y en todo momento.

## ÍNDICE DE CONTENIDO

<b>I. INTRODUCCIÓN.....</b>	<b>1</b>
1.1. Contaminación urbana .....	1
1.2. Tipos de contaminación urbana.....	2
1.3. Efectos de la contaminación urbana.....	3
1.4. Compuestos químicos en el espacio personal y el exposoma .....	4
1.5. ¿Cómo capturar el exposoma químico urbano? .....	5
1.6. ¿Cómo medir los componentes del exposoma urbano? .....	6
1.7. Midiendo el exposoma químico en ciudades de Chile .....	8
1.8. Posibles destinos de los compuestos orgánicos.....	10
1.9. Formulación del problema .....	11
1.10. Objetivo general .....	12
1.11. Objetivos específicos .....	12
<b>II. MATERIALES Y MÉTODOS .....</b>	<b>13</b>
2.1. Lista de compuestos orgánicos y actualización según usos .....	14
2.2. Propiedades fisicoquímicas.....	14
2.2.1 Clasificación de las propiedades fisicoquímicas.....	16
2.3. Modelación plataforma EPI-Suite con el programa <i>Fugacity level III</i> .....	17
2.3.1. <i>Fugacity level III</i> .....	17
2.3.3. Parámetros y limitaciones <i>Fugacity level III</i> .....	22
2.4. Relación de grupos funcionales, propiedades y sus destinos ambientales finales mayoritarios. ....	23
<b>III. RESULTADOS Y DISCUSIÓN .....</b>	<b>24</b>
3.1 Actualización de la clasificación según usos .....	24
3.2 Propiedades Fisicoquímicas .....	28
3.3 Resultados del modelo de <i>Fugacity level III</i> .....	35
3.3.1. Perdidas del compuesto por reacción o advección .....	35
3.3.2. Persistencia en el modelo .....	40
3.3.3. Reparto entre compartimientos .....	42
3.3.3.1. Reparto mayoritario en el compartimiento del agua.....	43
.....	43
3.3.3.2. Reparto mayoritario en el compartimiento del sedimento .....	44

.....	44
.....	44
3.3.3.3 Reparto mayoritario en el compartimiento del suelo .....	45
3.3.3.4. Comparación de repartos entre compartimientos .....	48
3.4. Relación de grupos funcionales, propiedades y sus destinos ambientales finales mayoritarios .....	50
3.4.1. Compuestos con mayoritariamente reparto en las aguas.....	50
3.4.2. Compuestos con mayoritariamente reparto en los sedimentos .....	51
3.4.3 Compuestos con mayoritariamente reparto en el suelo .....	55
3.5. Compuestos destacados .....	66
3.6. Proyecciones a futuro .....	69
<b>IV. CONCLUSIONES.....</b>	<b>70</b>
<b>V. REFERENCIAS.....</b>	<b>73</b>
<b>VI. ANEXO .....</b>	<b>79</b>

## ÍNDICE DE TABLAS

<b>Tabla 1.</b> Concentraciones máximas recomendadas por la OMS para contaminantes atmosféricos. ....	3
<b>Tabla 2.</b> Clasificación para las propiedades fisicoquímicas .....	16
<b>Tabla 3.</b> Factor de conversión para el tiempo total de degradación esperada. ....	21
<b>Tabla 4.</b> Dimensiones de compartimientos y fracción de volumen para modelo <i>Fugacity level III</i> .....	22
<b>Tabla 5.</b> Limitaciones según parámetros y programas de EPI-Suite.....	22
<b>Tabla 6.</b> Clasificación de usos para los compuestos orgánicos en la lista inicialmente obtenida del proyecto FONDECYT 11180151.....	26
<b>Tabla 7.</b> Compuestos prioritarios que componen cada grupo de uso. ....	27
<b>Tabla 8.</b> Resultados según la escala definida por BIOWIN3.....	40
<b>Tabla 9.</b> Reparto mayoritario de los compuestos respecto a los compartimientos aire, agua, suelo y sedimento. ....	42
<b>Tabla 10.</b> Compuestos con un mayor reparto en el agua. ....	50
<b>Tabla 11.</b> Compuestos con un mayor reparto hacia los sedimentos. ....	51
<b>Tabla 12.</b> Compuestos alimentarios con su reparto mayoritariamente en el suelo..	55
<b>Tabla 13.</b> Compuestos Biocidas con un mayor reparto en el suelo. ....	57
<b>Tabla 14.</b> Compuestos Cosméticos con un mayor reparto en el suelo. ....	59
<b>Tabla 15.</b> Compuestos Plastificantes con un mayor reparto en el suelo. ....	60
<b>Tabla 16.</b> Compuestos Pinturas/Tinturas/Resinas con un mayor reparto en el suelo. ....	61
<b>Tabla 17.</b> Compuestos Retardante de llamas con un mayor reparto en el suelo..	61
<b>Tabla 18.</b> Compuestos Productos de combustión con un mayor reparto en el suelo. ....	63
<b>Tabla 19.</b> Compuestos Lubricantes y grasas con un mayor reparto en el suelo. ....	63
<b>Tabla 20.</b> Compuestos Farmacéuticos con un mayor reparto en el suelo.....	64
<b>Tabla 21.</b> Compuestos con usos desconocidos con un mayor reparto en el suelo. ....	65
<b>Tabla 22.</b> Compuestos que destacan sus resultados. ....	66
<b>Tabla 23.</b> Lista de compuestos y sus propiedades fisicoquímicas .....	82
<b>Tabla 24.</b> Repartos de los compuestos en cada uno de los compartimientos.....	84

## ÍNDICE FIGURAS

<b>Figura 1.</b> a) Sustancias químicas emergentes, basadas en artículos recientes y su abundancia relativa encontrada en las pulseras de silicona. b) Lista prioritaria según EPA e IARC y su abundancia relativa. ....	9
<b>Figura 2.</b> Diagrama de diferentes simulaciones en programa EQC. ....	11
<b>Figura 3.</b> Entrada a la Interfaz de Programas de Estimación.....	17
<b>Figura 4.</b> Diagrama conceptual Fugacity level III.....	18
<b>Figura 5.</b> a) Histograma de los Puntos de fusión (°C) para todos los compuestos prioritarios. b) Diagrama de caja para los Puntos de fusión (°C) respecto a la clasificación según usos. ....	28
<b>Figura 6.</b> a) Histograma de Log Cte. de Henry (atm m <sup>3</sup> /moléculas) para todos los compuestos prioritarios. b) Diagrama de caja para Log Cte. de Henry (atm m <sup>3</sup> /moléculas) respecto a clasificación por usos. ....	29
<b>Figura 7.</b> a) Histograma de Log Presión de vapor (mm Hg) para todos los compuestos prioritarios. b) Diagrama de caja para Presión de vapor (mm Hg) respecto a clasificación por usos. ....	30
<b>Figura 8.</b> a) Histograma de Log Solubilidad (mg/L) para todos los compuestos prioritarios. b) Diagrama de caja para Log Solubilidad (mg/L) respecto a la clasificación por usos.....	31
<b>Figura 9.</b> a) Diagrama de caja para coeficiente de reparto octanol-agua (Kow). b) Diagrama de caja para coeficiente de adsorción en el suelo (Koc). ....	32
<b>Figura 10.</b> a) Correlación entre Coeficiente de adsorción del suelo (Koc), Coeficiente reparto octanol-aire (Koa), Coeficiente de reparto aire-agua (Kaw) y coeficiente de reparto octanol-agua (Kow). b) Gráfico de dispersión de los compuestos Log Kow vs Log Kaw, considerando las matrices de aire, agua o materia orgánica. ....	34
<b>Figura 11.</b> Pérdidas por reacciones en los compartimientos. ....	35
<b>Figura 12.</b> Pérdidas por advección en los compartimientos. ....	37
<b>Figura 13.</b> a) Diagrama de violín para tiempos de persistencia atribuidos por BLOWIN3. b) Diagrama de cajas para la persistencia según grupos. ....	40
<b>Figura 14.</b> Compuestos con un reparto mayoritario por el compartimiento del agua. ....	43
<b>Figura 15.</b> Compuestos con un reparto mayoritario por el compartimiento de sedimentos. ....	44
<b>Figura 16.</b> Compuestos con un reparto mayoritario en el suelo, con un máximo del 75%. ....	45
<b>Figura 17.</b> Compuestos con un reparto mayoritario en el suelo, entre el 75 - 100%. ....	47
<b>Figura 18.</b> Cantidad de masa en cada compartimiento (%). ....	48

## ABREVIATURAS

CAS: Chemical Abstracts Service.

EPA: Agencia de Protección Ambiental de los EE.UU.

EPI-Suite: Interfaz de Programas de Estimación.

EQC: *Equilibrium Criterion*.

FIFRA: Ley Federal de los E.E.U.U. para el control de pesticidas.

GHS: Sistema Global Harmonizado.

HPLC: Cromatografía líquida de alta presión.

IARC: Agencia Internacional para la Investigación del Cáncer.

Kaw: Coeficiente de reparto agua y el aire.

Koa: Coeficiente de reparto octanol y aire.

Koc: Coeficiente de adsorción de carbono orgánico.

Kow: Coeficiente de reparto octanol y agua.

OCDE: Organización para la Cooperación y Desarrollo Económico.

OMS: Organización Mundial de la Salud.

GCxGC: Cromatografía de gases bidimensional.

ToF-MS: Espectrómetro de Masas de tiempo de vuelo.

## RESUMEN

Con la industrialización comenzó el incremento en el uso de productos químicos. Como consecuencia, nos encontramos expuestos a una alta cantidad de compuestos provenientes de diferentes industrias. Todos estos procesos productivos emiten sustancias a nuestro entorno, y aunque algunas son inocuas, otras si pudiesen estar afectándonos. Por esta razón, se genera la inquietud de caracterizar las sustancias que se encuentran dentro de nuestro espacio personal. Con esto nace el concepto de exposoma, definido como una representación total de las exposiciones ambientales y las respuestas biológicas concomitantes a lo largo del curso de la vida del humano.

Con esta problemática nace el estudio de la Facultad de Ciencias de la Universidad de Chile, parte del proyecto FONDECYT 11180151 determinado: “Huellas digitales de contaminación en ciudades de Chile utilizando captadores pasivos personales: Explorando parte del exposoma”, en donde se realizó un monitoreo mediante pulseras de silicona, detectando distintos compuestos orgánicos para las ciudades de Iquique, Tocopilla y Santiago; que posteriormente fueron clasificados por su toxicidad, carcinogenicidad, y peligrosidad. El presente estudio parte de una lista prioritaria de 65 especies químicas obtenidas a partir del proyecto FONDECYT mencionado. Este grupo de compuestos químicos previamente seleccionados se sometieron a procesos de modelación con la Interfaz de Programas de Estimación (EPI-Suite), específicamente el modelo *Fugacity level III*, para obtener información nueva sobre las potenciales dinámicas de transporte y sus destinos ambientales. Este programa lo que realiza es una predicción sobre la partición de un compuesto en un entorno evaluativo, todo mediante una combinación de parámetros

fisicoquímicos conocidos y predeterminados. Los resultados obtenidos demostraron que los captadores pasivos personales utilizados (pulseras de silicona) capturaron una alta variabilidad de compuestos con coeficientes de reparto de Log Kow desde -0,9 a 8,9; Log Koc desde 0 a 7,6; Log Kaw desde -11,8 a 3 y Log Koa desde 0,09 a 17,8. Respecto al reparto, se obtuvo como destino ambiental final mayoritario el suelo, lo que al llevarlo al contexto del estudio podría corresponder al polvo intradomiciliario, el cual inhalamos e ingerimos constantemente. Entre los compuestos que destacaron por su reparto y una alta persistencia está el triclosán (CAS: 3380-34-5) cosmético, según los resultados obtenidos podría persistir más de 3 meses en el modelo. La cipermetrina (CAS: 52315-07-8) biocida, podría perdurar alrededor de 10 meses. El Tris(1,3-dicloroisopropil) fosfato (CAS: 13674878) retardante de llama, su valor de persistencia es de alrededor de 11 meses, llegando a ser considerado como recalcitrante. El Bumetrizol (CAS: 3896115) cosmético, pudiendo persistir 5 meses. El 2-(2H-benzotrizol-2-il)-4,6-bis(1,1-dimetilpropil)-fenol (CAS: 25973-55-1) plastificante, para el que se estimó una persistencia total de 8 meses. El 4,4'-metilenebis[2-metilbencenamina] (CAS: 838-88-0) cosmético, con una persistencia de 4 meses en el modelo. El Di-isooctil ftalato (CAS:84-74-2) plastificante, con una persistencia en el modelo de aproximadamente 4 meses y, por último, el compuesto 2,2,4,4,6,8,8-heptametil-nonano (CAS: 4390049) utilizado en cosméticos con una persistencia de 5 meses. El objetivo de este estudio es visibilizar cuales compuestos podrían investigarse en un futuro como posibles contaminantes en ambiente personales (parte del exposoma de los chilenos). Por otra parte, se buscó exponer que la utilización de herramientas como los programas de estimación, que nos proporcionan una idea inicial (tipo *screening*), conectada al uso captadores pasivos personales y metodología no-objetiva, nos puede ayudar a entender mejor la dinámica de especies químicas en nuestro entorno personal.

## ABSTRACT

An increase in the use of chemicals in our daily lives began with the industrialization. Consequently, we are now exposed to a high number of chemical compounds from different sources. Every industrial process emits chemicals into our environment, and although some of them are harmless, others could be affecting our health and lifestyle. For this reason, there is a concern to characterize the chemicals found within our personal space. With this, the concept of exposome was born, which is defined as a representation of the total environmental exposure to chemicals and their concomitant biological responses throughout the human life course.

This motivated the study developed at the Faculty of Sciences of the University of Chile, part of the project FONDECYT 11180151: "Fingerprints of chemical pollution in cities of Chile using personal passive samplers: Exploring part of the exposome", in which samples were collected using silicone wristbands, detecting different semi volatile organic compounds in the cities of Iquique, Tocopilla, and Santiago. These chemicals were later classified according to their toxicity, carcinogenicity, and other potential risks. The current study was based on a priority list of 65 chemicals obtained from the FONDECYT project. This group of previously selected chemical compounds were subjected to modeling processes using the Estimation Program Interface (EPI-Suite), specifically the Fugacity level III model, to obtain new information on potential transport dynamics and environmental fate. We developed a prediction percentage regarding the partition of a compound in a controlled environment, through a combination of known and predetermined physicochemical parameters. The results obtained showed that the personal passive samplers used (silicone wristbands) captured a high variability of compounds with Log Kow partition coefficients from -0.9 to 8.9; Log Koc from 0 to 7.6; Log Kaw from -11.8 to 3 and Log Koa from 0.09 to 17.8. Regarding their distribution, the soil was estimated as their most probable environmental fate, which in the context of the study could represent the indoor dust, which we constantly inhale and ingest. The cosmetic triclosan (CAS: 3380-34-5) was

among the compounds that stood out for their distribution and high persistence. According to the results obtained, it could persist for more than 3 months in the model. Cypermethrin (CAS: 52315-07-8), a biocide, could last about 10 months. The flame retardant Tris (1,3-dichloroisopropyl) phosphate (CAS: 13674878), showed persistence values of around 11 months, being considered as recalcitrant. Bumetrizol (CAS: 3896115) cosmetic, can persist 5 months. The 2- (2H-benzotrizol-2-yl) -4,6-bis (1,1-dimethylpropyl) -phenol (CAS: 25973-55-1) plasticizer, for which a total persistence of 8 months was estimated. The 4,4'-metilenebis[2-metilbencenamina] (CAS: 838-88-0) used in cosmetics with a persistence of 4 months. The plasticizer Diisooctyl phthalate (CAS: 84-74-2), with a persistence in the model of approximately 4 months and, finally, the 2,2,4,4,6,8,8-heptamethyl-nonane compound (CAS: 4390049) used in cosmetics with a persistence of 5 months. The objective of this study was to estimate what chemicals could be further searched in the future as possible markers of pollution in personal environments (part of the Chilean exposome). On the other hand, we showed that the use of in-silico tools such as screening type estimation programs, can provide us with important information and together with personal passive sampling methods and nontarget analysis, can help us to better understand the dynamics of chemical species in our personal environment.

## I. INTRODUCCIÓN

### 1.1. Contaminación urbana

Se considera que los inicios de la contaminación antropogénica del aire se remontan a la época en la que el ser humano dominó el fuego, aunque técnicamente toda actividad humana genera contaminación (Romero y col., 2006). La contaminación a nivel global comienza a acelerarse con la industrialización, y ha sido definida como cualquier modificación indeseable del medioambiente causada por la introducción de agentes físicos, químicos o biológicos en cantidades superiores a las naturales, que resulta nociva para la salud humana, daña los recursos naturales o altera el equilibrio ecológico (Yassi y col., 2002). Se considera que con la revolución industrial en el siglo XVIII se marcó un punto de cambio en la economía y el medioambiente, ya que es aquí cuando se incrementaron los requerimientos de las personas asociados a una alta demanda de energía y tecnología (Romero y col., 2006). A finales del siglo XVIII comenzaron a extenderse las áreas urbanas, impulsadas por la industria petrolera, la agroindustria e invención de vehículos, dando como resultado un consumo intenso de combustibles fósiles, entre otras prácticas, que llevaron a la generación de altos volúmenes de contaminantes. Fue así como en los primeros años del siglo XIX, la contaminación atmosférica causada por la industria se identificó como un problema severo, que al relacionarse con las condiciones ambientales pueden dañar la salud humana, los ecosistemas y los recursos materiales (Romero y col., 2006).

Actualmente la contaminación urbana es una problemática reconocida a nivel mundial y se conocen algunos de sus orígenes antropogénicos como la combustión

de materiales, ya sea originada por las industrias, los vehículos o los hogares. Sin embargo, también existen fuentes de contaminación de origen natural como las erupciones volcánicas, incendios forestales, erosión de los suelos, entre otros.

A pesar de que la contaminación urbana se encuentra presente en distintas ciudades del mundo, se ha determinado que está muy conectada al volumen y la distribución de su población (PUC, 2011). Dando ciertas luces de que las prácticas o hábitos de las personas tienen un efecto directo en la contaminación del aire a su alrededor, y por ende en su calidad de vida.

## **1.2. Tipos de contaminación urbana**

Los contaminantes urbanos están presentes en la atmósfera, las aguas y el suelo de la localidad. Estos podrían estar clasificados de forma general como contaminantes primarios o secundarios. Los primarios son aquellos emitidos directamente desde la fuente contaminante, ya sea por combustión de combustibles fósiles, industrias, vehículos, uso en el hogar, entre otros. Ejemplos de ellos son los óxidos de nitrógeno ( $\text{NO}_x$ ), óxidos de azufre ( $\text{SO}_x$ ), compuestos orgánicos volátiles (COV), material particulado (MP), monóxido de carbono (CO), entre otros. Sin embargo, también se encuentran los secundarios, los cuales no son emitidos directamente, sino que se forman a partir de los contaminantes primarios al reaccionar en el medioambiente. Este sería el caso del ozono, generado en la troposfera a partir de sus precursores:  $\text{NO}_x$ , COV y CO (Díaz y col., 2020). Otros contaminantes secundarios son los generados por la transformación de productos de la combustión de carbón y derivados del petróleo como los dióxidos de azufre ( $\text{SO}_2$ ) y óxidos de nitrógeno ( $\text{NO}_x$ ). Estos componentes reaccionan con la humedad de la atmósfera y se convierten en ácido sulfúrico ( $\text{H}_2\text{SO}_4$ ) y ácido nítrico ( $\text{HNO}_3$ ) respectivamente, que pueden afectar las aguas y el suelo de la localidad (MMA., 2016). También así, el material particulado

formado a partir de reacciones químicas entre contaminantes presentes en la atmósfera. (MMA., 2018).

### 1.3. Efectos de la contaminación urbana

Los efectos que puede causar la contaminación urbana han sido clasificados por la Organización Mundial de la Salud (OMS., 2020) de acuerdo con su temporalidad en corto o largo plazo, considerando a la contaminación atmosférica como el principal tipo de contaminación urbana que afecta a los grupos de personas más vulnerables (adultos mayores y niños). La guía de calidad de aire, relativa a los principales contaminantes atmosféricos propuesta por la OMS es presentada en la Tabla 1, en donde se establecen los límites para reducir efectos graves en la salud de las personas.

**Tabla 1.** Concentraciones máximas recomendadas por la OMS para contaminantes atmosféricos.

Fuente: Guías de calidad del aire de la OMS relativas al material particulado, ozono, dióxido de nitrógeno y dióxido de azufre, 2021.

Contaminante	Concentración
MP 2.5*	5 $\mu\text{g}/\text{m}^3$ , media anual
	15 $\mu\text{g}/\text{m}^3$ , media de 24 horas
MP 10*	15 $\mu\text{g}/\text{m}^3$ , media anual
	45 $\mu\text{g}/\text{m}^3$ , media de 24 horas
O <sub>3</sub>	100 $\mu\text{g}/\text{m}^3$ , media de 8 horas
NO <sub>2</sub>	10 $\mu\text{g}/\text{m}^3$ , media anual
	25 $\mu\text{g}/\text{m}^3$ , media de 1 hora
SO <sub>2</sub>	40 $\mu\text{g}/\text{m}^3$ , media de 24 horas

\* MP2.5 y MP10 corresponden a MP con diámetro aerodinámico equivalente a 2.5 y 10  $\mu\text{m}$  respectivamente.

Para el año 2016 la OMS indicó que un 92% de la población mundial estaba viviendo con una calidad del aire peor que los límites recomendados (OMS, 2016). Esto sucedía principalmente en países desarrollados con concentraciones mayores de contaminantes, causando enfermedades respiratorias como cáncer al pulmón, neumonías o incluso accidentes cerebro vasculares; atribuyéndosele así 1,3 millones

de muertes al año (OMS, 2020). Sin embargo, las guías de la OMS no consideran la gran variedad de compuestos orgánicos que pueden derivar de las mismas fuentes de emisión, por lo que el riesgo asociado a la contaminación urbana podría ser incluso mayor. La contaminación urbana también abarca la contaminación de aguas, generando mayor preocupación las aguas dulces, ya que se encuentran como un recurso limitado, por lo cual la OMS trabaja constantemente en mejorar la gestión de estos recursos y previniendo su contaminación (OMS, 2019). Por último, se encuentra la contaminación de suelos que según la Organización de las Naciones Unidas para la Alimentación y la Agricultura (FAO), miles de productos químicos que se producen comercialmente a gran escala, ya sea, residuos plásticos, electrónicos o las aguas residuales no tratadas, que pueden convertirse en fuentes de contaminación del suelo, posibilitando a que los productos contaminantes entren en la cadena alimentaria, con graves consecuencias para la salud y el bienestar de la población (FAO, 2018).

#### **1.4. Compuestos químicos en el espacio personal y el exposoma**

Actualmente nos encontramos expuestos a una alta cantidad de compuestos químicos provenientes de nuestro entorno sin darnos cuenta. El número total de especies químicas en el medioambiente podría estar correlacionado con el alto número de especies registradas en el *Chemical Abstract Service* (CAS, una base de datos a cargo de la Sociedad Química Americana “ACS”), la cual cuenta con sustancias identificadas en la literatura científica desde el año 1957 hasta la actualidad. Para el año 2020, este registro superó los 160 millones de sustancias (CAS, 2021), e incluye productos químicos sintéticos de fabricación reciente (dentro del registro actual, cerca del 50% fue integrado dentro de los últimos cinco años). Sin embargo, de este registro, solo 350 000 productos se estiman que cuentan con una aprobación en el ámbito comercial (Wang y col., 2020). El impulso en el crecimiento

de la industria química mundial de las últimas décadas ha sido principalmente liderado por China, en donde entre los años 2007 y 2017 la producción química creció un 11% anual y su participación en la fabricación y las ventas de productos químicos a nivel mundial aumentó del 15% a 37% (Wang y col., 2020).

En la actualidad nos encontramos expuestos diariamente a una alta cantidad de compuestos provenientes de diferentes industrias químicas, agrícolas, farmacéuticas, cosméticas, entre otras. Todas estas industrias, emiten sustancias al entorno, algunos compuestos son inocuos; sin embargo, otros si pudiesen estar afectándonos constantemente. Por esta razón, se genera la inquietud y necesidad de caracterizar las sustancias que se encuentran alrededor de nuestro espacio personal y a lo largo de nuestra vida. Con esto, nace el concepto de exposoma, definido como una representación total de las exposiciones ambientales y las respuestas biológicas concomitantes a lo largo del curso de la vida del humano (Wild, 2005). La exposición a especies químicas estaría dentro del exposoma y se lo ha denominado como el exposoma químico.

### **1.5. ¿Cómo capturar el exposoma químico urbano?**

El exposoma químico urbano incluye todas las exposiciones ambientales a especies químicas a las que el ser humano está sometido desde la concepción en adelante, permitiendo definir los factores de riesgo de enfermedades asociadas al medioambiente urbano.

Existen diversas formas de evaluar los compuestos químicos a los que nos encontramos expuestos en el día a día. Entre estas se encuentran los muestreadores activos personales, en los que se induce la captación de aire, ya sea por una bomba eléctrica o un equipo similar. Estos pueden proporcionar mediciones confiables de la exposición por inhalación debido a la tecnología que permite caudales medibles y

ajustables. Sin embargo, estos dispositivos son muy selectivos, contemplando concentraciones de compuestos de un determinado momento en el tiempo, además de ser costosos y requerir energía externa (Wang y col., 2019).

Los muestreadores pasivos representan otra opción, en la que las sustancias químicas se secuestran del medioambiente mediante difusión pasiva en una fase de recepción hasta que se alcanza el equilibrio. Esta técnica actúa durante largos periodos de tiempo para proporcionar concentraciones medias ponderadas de compuestos, por lo que, su selectividad es menor, además de resistir a variaciones accidentales o concentraciones extremas, y son adecuados para la monitorización de mezclas complejas (Seethapathy y col., 2008). Respecto a su implementación, los muestreadores pasivos no requieren energía, son mínimamente invasivos y de bajo costo. De ahí que, para la captura del exposoma, se necesita principalmente un mecanismo no selectivo, ya que permite capturar una mayor cantidad de compuestos que se encuentran en el entorno, por lo cual, se han popularizado para la captura del exposoma químico en ambientes urbanos (Manzano y col, 2019).

### **1.6. ¿Cómo medir los componentes del exposoma urbano?**

Como se mencionó anteriormente, el muestreo pasivo es un método menos selectivo, debido a que captura un amplio rango de compuestos químicos. Se necesita entonces de un análisis instrumental con alta capacidad de señales a un mismo tiempo y resolución, para que así, se llegue a identificar la mayor cantidad de señales posibles. Existen diferentes tipos de cromatografía, sin embargo, el parámetro principal es que tenga un alto número de platos teóricos, ya que la resolución únicamente aumenta de forma proporcional a la raíz cuadrada del número de platos (Zenker, 2016). El número de platos teóricos (N) indica la medida de la eficiencia de la columna y su incremento mejora la detección de señales, lo cual permite analizar muestras complejas.

Las técnicas cromatográficas que se utilizan principalmente para muestras medioambientales son la de gases y de líquidos. La cromatografía líquida de alta eficiencia (HPLC) acoplada con detectores variados (que dependen de la naturaleza de los compuestos a determinar), está entre las técnicas más utilizadas debido a su versatilidad en la identificación de un amplio rango de contaminantes medioambientales. Sin embargo, presenta una limitada sensibilidad y selectividad cuando las muestras medioambientales son complejas y los contaminantes se encuentran a niveles traza. Otra de las desventajas de este método, es que existen compuestos que no serán reconocidos por ciertos detectores (García y col., 2012). La técnica de cromatografía de gases (GC) es otra de las técnicas más aplicadas en el análisis de posibles contaminantes ambientales, debido a su mayor resolución y selectividad. Su aplicación se realiza principalmente en compuestos volátiles y semi volátiles. Sin embargo, la resolución, su capacidad para separar picos o señales de un GC tradicional no es suficiente para el análisis de ciertas muestras complejas medioambientales, tales como los derivados de petróleo.

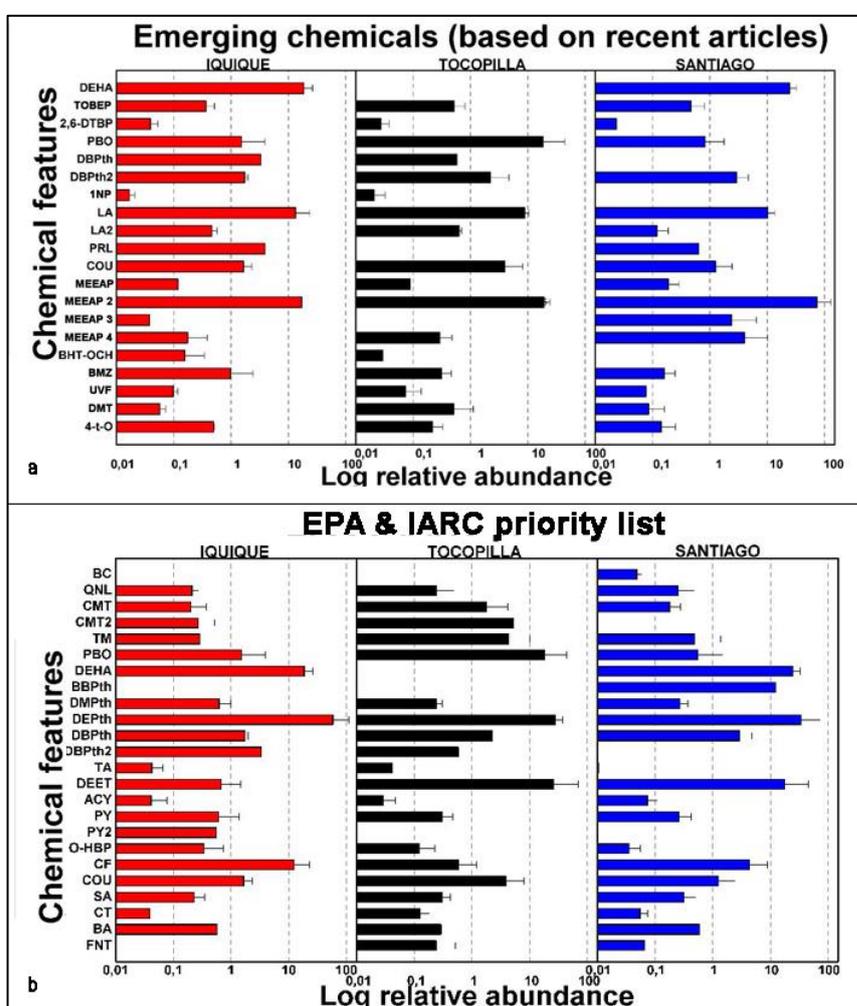
Para incrementar la capacidad de picos propia de un GC o HPLC en estudios del exposoma químico urbano, se han probado técnicas relativamente nuevas como la cromatografía de gases en dos dimensiones (con dos columnas cromatográficas conectadas en serie), acoplado a espectrometría de masas de tiempo de vuelo (GCxGC/ToF-MS). Esta técnica proporciona una mayor capacidad de señales, lo cual es muy beneficioso al analizar muestras con matrices complejas. La técnica de GCxGC/ToF-MS tiene la capacidad de incrementar la capacidad de picos separados a una resolución determinada de un GC tradicional, alcanzando niveles teóricamente equivalentes a la multiplicación de las dos capacidades de picos de cada columna utilizada (Prebihalo y col., 2018). Además, cuando acoplamos la técnica de GC multidimensional a un detector multicanal como el ToF-MS, incrementamos nuestra capacidad de identificación de muestras complejas, lo que es beneficioso en estudios

del exposoma (Escher y col., 2020). De manera que con este instrumento de análisis se logra construir el perfil de identificación con una mayor certeza para las muestras complejas obtenidas del muestreo pasivo.

### **1.7. Midiendo el exposoma químico en ciudades de Chile**

Con la finalidad de estudiar el exposoma químico en distintas ciudades de Chile, fue impulsada la investigación de la Facultad de Ciencias de la Universidad de Chile, denominada “Huellas digitales de contaminación en ciudades de Chile utilizando captadores pasivos personales: Explorando parte del exposoma”, parte del proyecto FONDECYT 11180151. En este proyecto se trabajó con el monitoreo en distintas ciudades de Chile: Iquique, Tocopilla y Santiago. Se utilizaron muestreadores pasivos personales (pulseras de silicona), detectando distintos contaminantes orgánicos volátiles y semi volátiles como hidrocarburos aromáticos policíclicos (HAPs), pesticidas, retardantes de llama, productos de cuidado personal o bifenilos policlorados (Manzano y col., 2019). Las muestras obtenidas fueron analizadas en un equipo de cromatografía de gases multidimensional acoplado a espectrometría de masas de tiempo de vuelo (GCxGC/ToF-MS) e identificados basados en su similitud (>50%) con la base de datos de espectrometría de masas con impacto de electrones del Instituto Estadounidense de Estándares y Tecnología (NIST): NIST 2011 v2.0 (Stephen, 2020). Estos compuestos químicos fueron luego clasificados de acuerdo con su abundancia en las diferentes ciudades estudiadas, obteniendo una lista limitada de compuestos químicos presentes con frecuencia relativamente alta en cada ciudad (>75% de las muestras). Los compuestos químicos restantes fueron luego clasificados respecto a criterios de procedencia, toxicidad, pesticidas, carcinogenicidad, peligrosidad y literatura previa, utilizando la base de datos *PubChem* (base de datos a cargo del Instituto Nacional de Salud (NIH)), datos de la Agencia Internacional para la Investigación del Cáncer (IARC) y la Agencia de

Protección Ambiental de los EE.U.U. (EPA), además de información del Sistema Global Harmonizado (GHS) y la ley Federal de los EE.UU. para el control de pesticidas (FIFRA) (Miranda y col., 2021). Finalmente, estas clasificaciones llevaron a una priorización final con los compuestos que solamente obtuvieron evidencias de toxicidad, alta preocupación, exposición, persistencia, frecuencia de usos y emergencia en el ambiente. En la Figura 1 se muestran las concentraciones relativas de los compuestos relevantes a este estudio, estas concentraciones fueron obtenidas según un estándar interno (Manzano y col, 2019).



**Figura 1.** a) Sustancias químicas emergentes, basadas en artículos recientes y su abundancia relativa encontrada en las pulseras de silicona. b) Lista prioritaria según EPA e IARC y su abundancia relativa.

### 1.8. Posibles destinos de los compuestos orgánicos

El hecho de que los humanos y la vida silvestre estén expuestos a una gran variedad de productos químicos antropogénicos y naturales, además de potenciales compuestos de degradación, representa un problema relevante a analizar (Daughton, 2005). Existen productos químicos de los que no se conoce información experimental sobre sus propiedades, posibles destinos ambientales, dinámicas de transporte o tiempos de persistencia en el entorno, lo que es importante para evaluar riesgos asociados a su exposición, efectos en las personas y el medioambiente. Debido a esto, varios modelos computacionales fueron creados para llenar los espacios vacíos existentes por las aún escasas mediciones de campo y así anticipar su destino después de su descarga en el medioambiente (OECD, 1989). Una revisión de los enfoques utilizados en varios países para evaluar el destino de las sustancias muestra una amplia variación en las prácticas (OECD, 1995). La mayoría de estos enfoques se centraron en evaluaciones del destino de un solo compartimiento ambiental, que generalmente involucraron a los puntos de entrada de la sustancia al medioambiente (Mackay y col., 1996b). Es por lo cual fue creado el modelo *Equilibrium Criterion* (EQC), el cual se basa en una evaluación de un modelo multi-compartimiento desarrollado también por Dr. Donald Mackay. En este modelo se muestran distintos niveles de evaluación (I, II, III y IV), los cuales introducen mayor complejidad al modelo y revelan progresivamente más información sobre la naturaleza de la sustancia química (Mackay y col., 1992). La Figura 2 muestra cada uno de estos niveles. El nivel I se basa en un estado estable, en equilibrio, con un sistema cerrado y sin degradaciones. El nivel II se basa en un estado estable, en equilibrio, con degradaciones y advecciones. El nivel III se basa en un estado estable, sin equilibrio, con degradaciones y advecciones. Por último, el nivel IV con un estado inestable y la dinámica de la versión III.



**Figura 2.** Diagrama de diferentes simulaciones en programa EQC.

Los modelos de evaluación son relevantes, ya que pueden proporcionar información suficiente del uso propuesto de una sustancia química, indicando si genera o no riesgos, y fomentando así que las concentraciones durante su uso estén en órdenes de magnitud por debajo de los niveles de efectos nocivos (Mackay y col., 1996b).

### 1.9. Formulación del problema

La lista prioritaria generada en un estudio anterior (Miranda y col., 2021) es la base para este seminario de título, debido a que no se tenía información completa sobre la dinámica de los compuestos químicos en el entorno ambiental: capacidad de degradarse, tiempos de vida media, persistencia, residencias y transportes entre los compartimientos principales de un entorno como el aire, agua, suelo y sedimentos. Todos estos parámetros fueron evaluados y relacionados según sus propiedades fisicoquímicas con la ayuda de la Interfaz de Programas de Estimación (EPI-Suite). Las herramientas como los programas de estimación y el uso de las propiedades fisicoquímicas de los compuestos generan una idea de cuáles podrían ser los principales reservorios de estos compuestos prioritarios en el entorno de las personas, ya sea, domicilios, trabajos o el exterior. Los resultados presentados

pueden ser usados como una guía sobre dinámicas de transporte y destinos ambientales, para llegar a generar hipótesis informadas para futuras investigaciones.

#### **1.10. Objetivo general**

Evaluar los potenciales transportes y destinos ambientales de una lista seleccionada de compuestos orgánicos captados por las pulseras de silicona, utilizando la Interfaz de Programas de Estimación (EPI-Suite) y el modelo *Fugacity level III*.

#### **1.11. Objetivos específicos**

- Definir los compuestos orgánicos para ser modelados directamente en la interfaz EPI-Suite, sus características y propiedades.
- Modelar los posibles destinos ambientales de los compuestos seleccionados en la interfaz de programas EPI-Suite y utilizando un modelo de *Fugacity level III*.
- Clasificar los compuestos orgánicos analizados según su persistencia, capacidad de transporte y destinos, además de las propiedades y parámetros obtenidos de interfaz de programas de EPI-Suite.

## II. MATERIALES Y MÉTODOS

Para esta investigación se utilizó la lista de compuestos orgánicos semivolátiles obtenida del proyecto FONDECYT 11180151, correspondiente a 65 especies químicas detectadas utilizando un muestreo pasivo con pulseras de silicona.

A los compuestos químicos en esta investigación se les asignó una abreviación única que será utilizada durante su identificación y descripción. Los nombres completos en formato IUPAC, abreviación y número CAS se encuentra en el anexo a este documento (Tabla 23), para la facilidad de identificación en el escrito se priorizo el número CAS, debido a que existen más de un nombre para cada compuesto.

Las modelaciones se llevaron a cabo en la plataforma de EPI-Suite, una Interfaz de Programas de Estimación con un conjunto de programas basados en sistema *Windows*, desarrollado por la Agencia de Protección Ambiental de Estados Unidos (EPA) y la Corporación de Investigación de Syracuse (SRC). En específico se trabajó con el modelo de *Fugacity level III*, basado en la metodología y enfoques de programación desarrollado por Donald Mackay y colaboradores (Mackay y col., 1996b; Mackay., 1991). El modelo *Fugacity Level III* fue adaptado para el programa, utilizando las ecuaciones del modelo *Equilibrium Criterion* (EQC). Este programa tiene como función principal la predicción de la partición de un compuesto orgánico en un entorno con parámetros fisicoquímicos predeterminados, siendo así un único entorno específico donde se realiza la modelación, por lo que es determinado como evaluativo. El modelo entrega información sobre las reacciones que pueden ocurrir, además de las estimaciones de tiempo vida media, capacidad de residencia, entre otros; con la finalidad de ser evaluadas las distintas dinámicas de los compuestos en el entorno y sus posibles destinos ambientales finales. Los resultados fueron graficados mediante el programa *RStudio* en conjunto al paquete *ggplot* y *ggplot2*.

## 2.1. Lista de compuestos orgánicos y actualización según usos

Para la clasificación se utilizó la base de datos de *Pubchem* (a cargo del Instituto Nacional de Salud (NIH), el Centro Nacional de Información Biotecnológica (NCBI) y la Librería Nacional de Medicina (NLM) de EE.UU.) (Pubchem., 2021), ya que entrega los potenciales usos del compuesto químico según bibliografía general. Sin embargo, se debe considerar que los compuestos evaluados pueden tener más de un uso determinado, por lo cual en estos casos se utilizó como criterio para la clasificación el uso más específico y común según la base de datos de productos químicos (CPDat., 2021). Además, fue considerada la bibliografía existente, considerando las más actualizadas para la clasificación.

## 2.2. Propiedades fisicoquímicas

Las propiedades fisicoquímicas de cada compuesto químico en la lista inicial fueron obtenidas de bases de datos internas de EPI-Suite y bases de datos en línea. Se priorizaron las propiedades necesarias para los modelos de EPI-Suite: constante de Henry, solubilidad en el agua, punto de fusión, punto de ebullición, presión de vapor y coeficiente de reparto octanol-agua (Log Kow). El método utilizado se basó en el siguiente flujo de prioridad, considerando que, en el caso de no encontrarse las propiedades en la primera base de datos, se prosiguió con la siguiente:

1. Base de datos de las propiedades fisicoquímicas de los compuestos que se encuentran en la base de datos interna de EPI- Suite (*PhysProp*).
2. Base de datos de propiedades fisicoquímicas de *PubChem* (Pubchem, 2021)
3. Estimaciones mediante la plataforma EPI-Suite, según los programas correspondientes:
  - MPBPWIN: punto de fusión, punto de ebullición y presión de vapor.
  - WKOWWIN: solubilidad en agua.
  - HENRYWIN: constante de Henry.

Una vez obtenidas todas las propiedades de los compuestos con las que se modela en el programa EPI-Suite, se buscó obtener o estimar los coeficientes de reparto Koc (coeficiente de adsorción de carbono orgánico), Kow (coeficiente de reparto entre agua y una fase orgánica representada por el octanol), Kaw (coeficiente de reparto entre agua y el aire), y Koa (coeficiente de reparto entre el aire y una fase orgánica representada por el octanol) para cada compuesto químico de interés. La prioridad con la que se trabajó en estos casos fue:

1. Base de datos de EPI-Suite.
2. Base de datos de propiedades fisicoquímicas de *PubChem*, solamente en el caso de existir un valor único.
3. Base de datos de propiedades fisicoquímicas de *PubChem* en el caso de presentarse un rango de valores.
  - a) Se evaluó si la estimación que entregaba la plataforma de EPI-Suite concordaba con este rango y se tomó como prioridad la estimación de la plataforma.
  - b) En el caso de que la estimación de EPI-Suite no se encontrara en el rango, se utilizó un promedio del rango *PubChem* como representativo.
4. Estimaciones mediante la misma plataforma EPI-Suite, con los programas correspondientes:
  - KOWWIN: Estimación del Coeficiente reparto octanol-agua (Kow).
  - KOCWIN: Estimación Coeficiente de adsorción en el suelo (Koc).
  - KOAWIN: Estimación Coeficiente de reparto octanol-aire (Koa).

### 2.2.1 Clasificación de las propiedades fisicoquímicas

Se utilizó el manual de marcos para futuros sostenibles de la EPA (2012) para la clasificación de los valores de las propiedades fisicoquímicas, representadas en la Tabla 2.

**Tabla 2.** Clasificación para las propiedades fisicoquímicas

	Valores estimados	Clasificación
Clasificación de los valores para Log Constante de Henry (atm m <sup>3</sup> /mol).	>-1	Muy volátil en agua.
	<-1 y -3	Volátil del agua.
	<-3 y -5	Moderadamente volátil del agua.
	<-5 y -7	Ligeramente volátil del agua.
	<-7	No volátil.
Clasificación de los valores para Log Presión de vapor (mm Hg).	>-4	Existe principalmente en la fase de vapor (gas).
	<-4 y -7	Existe en la fase de vapor y partículas.
	<-7	Existe principalmente en la fase sólida.
Clasificación de los valores para Log Solubilidad (mg/L).	>4	Muy soluble.
	3 y 4	Soluble.
	2 y 3	Solubilidad moderada.
	-1 y 2	Ligeramente soluble.
	<-1	Solubilidad insignificante.
Clasificación de los valores para Log Coeficiente de reparto octanol-agua (Kow).	>1	Altamente soluble en agua (hidrofílico).
	>4	Poco soluble en agua (hidrofóbico).
	>8	No fácilmente biodisponible.
	>10	No biodisponible, difícil de medir experimentalmente.
Clasificación de los valores para Log Coeficiente de adsorción en el suelo (Koc).	>4,5	Adsorción muy fuerte al suelo/sedimento, migración insignificante al agua subterránea.
	3,5 – 4,4	Fuerte adsorción al suelo/sedimento, desde insignificante a lenta migración al agua subterránea.
	2,5 – 3,4	Adsorción moderada al suelo/sedimento, migración lenta al agua subterránea.
	1,5 – 2,4	Baja adsorción al suelo/sedimento, migración moderada al agua subterránea.
	<1,5	Adsorción insignificante al suelo/sedimento, migración rápida a las aguas subterráneas.

Las propiedades fisicoquímicas fueron comparadas entre las categorías de usos comunes mediante el percentil 50, debido a que la mediana no se ve influenciada por los valores extremos, además de que es de fácil comprensión, ya que la mitad de los datos se encuentra sobre o por debajo de la mediana (Salvatore y col., 2004).

### 2.3. Modelación plataforma EPI-Suite con el programa *Fugacity level III*

La entrada de la plataforma EPI-Suite puede visualizarse en la Figura 3. Para ejecutar el programa *Fugacity level III* se realiza el ingreso del compuesto en la interfaz, este puede ser mediante la Especificación de Introducción Lineal Molecular Simplificada (SMILES), que es una notación que describe sin ambigüedades la estructura de una molécula, o mediante el número CAS, lo que permite que sea identificado en la base de datos interna, al igual que sus propiedades fisicoquímicas. En caso de no encontrarse alguna de estas, deben ser ingresadas manualmente los valores de cada una de las propiedades, siguiendo los niveles de prioridad descritos en la sección anterior.

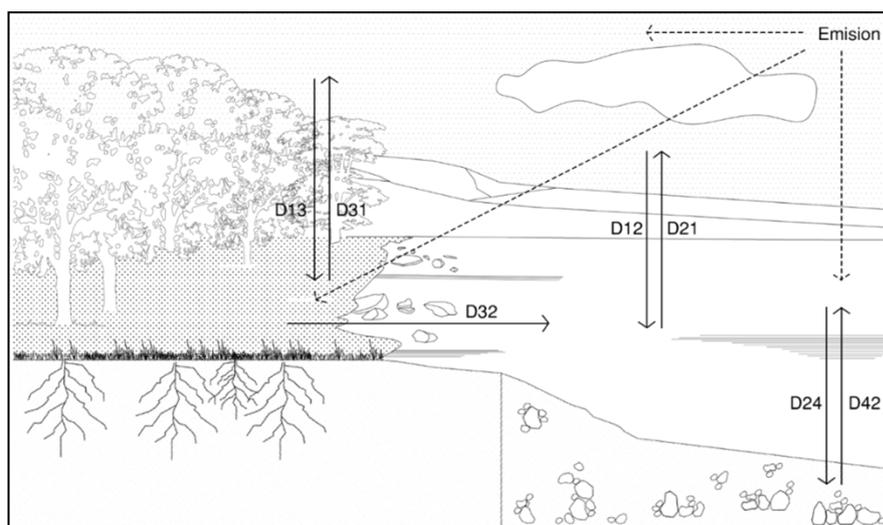


Figura 3. Entrada a la Interfaz de Programas de Estimación.

#### 2.3.1. *Fugacity level III*

Al ser un modelo de Mackay de nivel III, se asumen ciertas condiciones para la dinámica del modelo: estar en un estado estable, sin equilibrio, con degradaciones y advecciones. El entorno del modelo consta de cuatro compartimentos principales: aire, agua, suelo y sedimentos. También hay sub-compartimentos: una fase de aerosol, sólidos en suspensión y una fase de biota. Se asume una temperatura fija de 25 °C y se modela el transporte de masa entre los compartimentos mediante

volatilización, difusión, deposición y escorrentía. En la Figura 4 se ilustra un diagrama conceptual de este modelo y sus vías de transporte masivo, en donde el n°1 refiere al aire, el n°2 al agua, el n°3 al suelo y el n°4 a los sedimentos. Por ejemplo, el término D12, indica el o los transportes posibles desde el aire hacia el compartimiento del agua. Los principales parámetros con los que trabaja el modelo *Fugacity level III* son, tiempo de vida media, emisiones, advección y coeficiente adsorción al suelo ( $K_{oc}$ ).



**Figura 4.** Diagrama conceptual Fugacity level III.

**Valores de emisión:** Las tasas de emisión ambiental predeterminadas son de 1 000 kg/h al aire, al agua y al suelo. Estos son los parámetros predeterminados utilizados en el modelo EQC y adaptados en EPI-Suite, por lo que, para todos los casos fue considerada una emisión de los compuestos en cada compartimiento de 1 000 kg/h.

**Valores de advección:** Se definen como la pérdida del compuesto químico en el tiempo por medio de algún proceso que no sea degradación. Los tiempos de advección se aplican al aire, agua y a los sedimentos. Las duraciones de advección de las sustancias químicas en los compartimientos de aire, agua y sedimentos se establecen en los valores predeterminados de 100, 1 000 y 50 000 horas, respectivamente. (Mackay y col., 1996b). Estos tiempos de vida se utilizan para

determinar el caudal de advección ( $\text{m}^3/\text{hora}$ ) calculado dividiendo el volumen del compartimento por el tiempo de advección.

**Tiempo de vida media:** El tiempo de vida media de un compuesto químico es considerado como el tiempo necesario para que este se encuentre a la mitad de su concentración inicial en el entorno evaluado. Se utiliza la vida media para cada uno de los compartimientos: aire, agua, suelo y sedimentos.

El modelo *Fugacity level III* no puede ser ejecutado sin los parámetros con los que trabaja, por lo que cuando no se conocen valores experimentales, lo que realiza el modelo *Fugacity level III* es interactuar con otros programas de la interfaz EPI-Suite para estimar los valores faltantes.

### **2.3.2 Programas que interactúan con *Fugacity level III***

Los programas con los que interactúa el modelo son: AOPWIN (estima las tasas de oxidación atmosférica); BLOWIN (estima la probabilidad de biodegradación); HENRYWIN (estima la constante de la ley de Henry); KOCWIN (estima el coeficiente de adsorción del suelo ( $K_{oc}$ )); KOWWIN (estima el coeficiente de partición octanol-agua); MPBPVP (estima el punto de fusión, el punto de ebullición y la presión de vapor). Todos estos programas pueden ser ejecutados automáticamente por separado, sin embargo, esto discrepa al evaluar el modelo *Fugacity level III*, ya que los programas son ejecutados simultáneamente. La metodología que utiliza cada uno de estos programas es:

**AOPWIN:** El programa AOPWIN tiene como función estimar la oxidación atmosférica de compuestos orgánicos. Considera que, al ser emitidos a la tropósfera, se eliminan principalmente por reacción con los radicales hidroxilo, ozono y nitrato (Finlayson-Pitts y col., 1986). El método que se utilizó para las estimaciones es la relación estructura-actividad (SAR) (Atkinson., 1985; Atkinson y col., 1984; Kwok y col., 1995).

*Fugacity level III* no considera para el cálculo de tiempos de vida media y persistencia a los radicales de ozono y nitrato. Sin embargo, entrega un aviso cuando existe esta posibilidad. El programa considera que la tropósfera generalmente tiene una concentración muy baja de compuestos orgánicos, ya que, producto de la luz solar, se genera una concentración de radicales hidroxilos en estado estable que reacciona constantemente con los compuestos, por lo cual la reacción se considera de pseudo primer orden.

**BIOWIN:** El programa BIOWIN tiene como función estimar la probabilidad de una rápida biodegradación aeróbica y anaeróbica para un compuesto orgánico en presencia de poblaciones mixtas de microorganismos ambientales, considerando los compartimientos como el agua, suelo o sedimentos. El programa *Fugacity level III* trabaja con el modelo *Ultimate* (BIOWIN3) considerada la biodegradación en donde el compuesto original es transformado totalmente en dióxido de carbono y agua. Este modelo fue realizado por la EPA mediante una encuesta de expertos en biodegradación, en relación con los términos del tiempo necesario para lograr la biodegradación final en un medio acuático evaluativo (Boethling y col., 1994). Se promediaron las calificaciones de cada compuesto para obtener un valor único para el modelo y dentro del rango de tiempo estimado devuelto por BIOWIN3, se convierte en una vida media utilizando un conjunto de factores de conversión. Estos factores de conversión consideran que 6 vidas medias constituyen la degradación completa de una sustancia química, asumiendo cinéticas de primer orden. Los factores de conversión resultantes para el modelo se pueden visualizar en la Tabla 3.

**Tabla 3.** Factor de conversión para el tiempo total de degradación esperada.

Valor numérico del modelo	Tiempo total de degradación esperado.
> 4,75 – 5	Horas
>4,25 - 4,75	Horas a Días
>3,75 - 4,25	Días
>3,25 - 3,75	Días a Semanas
>2,75 - 3,25	Semanas
>2,25 – 2,75	Semanas a Meses
>1,75 – 2,25	Meses
<1,75	Recalcitrante

**KOCWIN:** El programa KOCWIN tiene como función determinar un valor para la constante de adsorción del suelo (Koc), según el compuesto orgánico evaluado, además considera que el compartimento del suelo se compone de materia mineral, materia orgánica, agua y aire. Utiliza valores predeterminados fijos para concentraciones de carbono orgánico y lípidos 0,02 g/g para partículas de sólidos del suelo. En este estudio se utilizó la estimación mediante el índice de conectividad molecular de primer orden (MCI), el cual se ha utilizado con éxito para predecir los valores de Koc para compuestos orgánicos (Sabljić., 1987; Bahnick y col., 1988). Se demostró que este método de contribución grupal supera a los métodos de estimación tradicionales basados en los coeficientes de partición octanol/agua y la solubilidad en agua, presentando valores más precisos respecto a los experimentales (EPA, 2012).

### 2.3.3. Parámetros y limitaciones *Fugacity level III*

El modelo *Fugacity level III* está representado según las siguientes dimensiones de compartimientos y subcompartimientos, las que se muestran en la Tabla 4.

**Tabla 4.** Dimensiones de compartimientos y fracción de volumen para modelo *Fugacity level III*.

Compartimiento	Subcompartimientos	Volumen (m <sup>3</sup> )	Fracción Volumen
Aire	Volumen total	10 <sup>14</sup>	1
	Fase aire	10 <sup>14</sup>	~1
	Aerosol	2000	2x10 <sup>-11</sup>
Agua	Volumen total	2x10 <sup>11</sup>	1
	Fase agua	2x10 <sup>11</sup>	~1
	Fase sedimento suspendido	10x10 <sup>6</sup>	5x10 <sup>-6</sup>
	Fase de peces	2x10 <sup>5</sup>	1x10 <sup>-6</sup>
Suelo	Volumen total	18x10 <sup>9</sup>	1
	Fase aire	3,6x10 <sup>9</sup>	0,2
	Fase agua	5,4x10 <sup>9</sup>	0,3
	Fase suelo	9x10 <sup>9</sup>	0,5
Sedimento	Volumen total	5x10 <sup>8</sup>	1
	Fase aire	4x10 <sup>8</sup>	0,8
	Fase agua	1x10 <sup>8</sup>	0,2

Cada uno de los programas utilizados para las estimaciones presentan limitaciones, las cuales se encuentran resumidas en la Tabla 5.

**Tabla 5.** Limitaciones según parámetros y programas de EPI-Suite.

Programa	Parámetros	Limitaciones
<b>AOPWIN</b> (Estima tasas de oxidación atmosféricas)	OH	<ul style="list-style-type: none"> <li>Valor predeterminado por el programa con una concentración de radicales OH promedio de 1,5x 10<sup>6</sup> moléculas / cm<sup>3</sup> durante 12 horas.</li> </ul>
	O <sub>3</sub>	<ul style="list-style-type: none"> <li>No pertenece a la estimación de vida media y persistencia, pero se encuentra en un apartado cuando puede ocurrir su reacción.</li> </ul>
	NO <sub>3</sub>	<ul style="list-style-type: none"> <li>No se estima velocidades de reacción, solo entrega un aviso cuando podrían ser importantes.</li> </ul>
<b>BIOWIN</b> (Estima la probabilidad de biodegradación)	Ultimate (BIOWIN3)	<ul style="list-style-type: none"> <li>Considera que 6 vidas medias son una degradación completa.</li> <li>Relación de vidas medias para agua: suelo: sedimento de 1:2:9.</li> <li>** Si no se encuentra el fragmento SMILES en la base de datos, se utiliza el fragmento similar en estructura. **</li> </ul>
<b>KOCWIN</b> (Estima el coeficiente de adsorción en el suelo)	Método Conectividad Molecular (MCI)	<ul style="list-style-type: none"> <li>No presenta limitación, es el modelo más utilizado por su alta precisión con valores experimentales.</li> </ul>

#### **2.4. Relación de grupos funcionales, propiedades y sus destinos ambientales finales mayoritarios.**

Los resultados son presentados según el número CAS y la abreviación del nombre, ya que como se mencionó anteriormente es la forma en que se ingresan al programa.

Por otra parte, los nombres de los compuestos varían pudiendo confundir en algunos casos con más de 6 nombres según nomenclatura (ej: 2-(2-hydroxypropoxy) propan-1-ol), con el fin de evitar estas confusiones fueron presentadas de esta forma.

El criterio utilizado para ordenar los resultados fue según la distribución que tienen los compuestos en cada uno de los compartimientos ambientales, se les clasificó por la mayor afinidad que existiera, ya sea en el aire, agua, suelo o sedimentos. Posteriormente se ordenaron según los usos que se encontraron, se analizaron las estructuras químicas, grupos funcionales principalmente, los cuales se les relacionó a las propiedades fisicoquímicas que inciden en el destino ambiental final de los compuestos orgánicos.

### III. RESULTADOS Y DISCUSIÓN

#### 3.1 Actualización de la clasificación según usos

De la lista prioritaria se trabajó con 65 compuestos (Tabla 23, anexo). Se empleó para cada caso las siguientes definiciones características a cada grupo:

- 1) Productos de combustión: Productos generados de la combustión incompleta de la materia o pirólisis a alta temperatura de materiales.
- 2) Productos de uso doméstico: Productos que se utilizan en el entorno domiciliario, (desinfectantes, productos de higiene, alimentarios, entre otros).
  - a) Biocida: Sustancias químicas sintéticas o de origen natural que están destinados a destruir, contrarrestar o ejercer un control de otro tipo sobre cualquier organismo considerado nocivo para el ser humano. (Rodríguez y col., 2003). En este caso se encuentran: plaguicidas, insecticidas y herbicidas.
- 3) Productos de consumo: Cualquier compuesto que es utilizado de forma directa en el consumo de las personas. Entre estos se encuentran los:
  - a) Cosméticos: Producto que se utiliza para la higiene o belleza del cuerpo (RAE, 2020), sustancias que se encuentran en productos para dientes, uñas, cavidad bucal, cabello, entre otros. Algunos de estos tienen la función higiene, perfumar y/o protección.
  - b) Alimentario: Pertenciente o relativo a los alimentos o a la alimentación (RAE, 2020). Sustancia de origen natural o sintético que se encuentra en algún alimento y es consumido. Entre estos se encuentran los saborizantes, aromatizantes y/o preservantes.
  - c) Farmacéutico: Compuesto originado por algún proceso químico, biológico o biotecnológico que se destina a las personas o animales, con el fin de

prevención, diagnóstico, atenuación o tratamiento de enfermedades.

- 4) Productos Industriales: Productos utilizados en procesos industriales con el fin de satisfacer alguna necesidad del humano. Sin embargo, no son de consumo directo.
  - a) Retardante de llama: Sustancia que tiende a inhibir la combustión cuando se aplica, ya sea mezclados, combinados o sobre materiales combustibles.
  - b) Lubricantes y grasas: Sustancia utilizada como aditivos o lubricantes en aplicaciones industriales o en el hogar. Se incluyen compuestos que son agregados a bencina, diésel, parafina y otros derivados del petróleo para mejorar su rendimiento.
  - c) Plastificante: Sustancia que se añade a un material para dar flexibilidad, resistencia y/o protección. Tiene el objetivo de facilitar el manejo del producto. También pueden encontrarse en los adhesivos o sellantes.
  - d) Pinturas/Tinturas/Resinas: Compuestos utilizados con relación a pinturas, tinturas o resinas, principalmente como solventes o emulsionantes de estos productos.
- 5) Desconocidos: Compuestos químicos para los que no se encontró información suficiente que permita clasificar su uso cotidiano.

La Tabla 6 resume la clasificación según usos y la cantidad de compuestos para cada caso encontrados en los captadores pasivos evaluados en el proyecto FONDECYT 11180151.

**Tabla 6.** Clasificación de usos para los compuestos orgánicos en la lista inicialmente obtenida del proyecto FONDECYT 11180151.

Grupo General	Grupo Especifico	Cantidad
Productos de combustión.	Producto de Combustión.	3
Productos de uso doméstico.	Biocida.	7
Productos de consumo.	Cosméticos.	19
	Alimentario.	11
	Farmacéutico.	2
Productos industriales.	Retardante de Llama.	2
	Plastificantes.	11
	Lubricantes y grasas.	3
	Pinturas/Tinturas/Resinas.	3
Desconocidos.	Desconocidos.	4

Los grupos con un mayor número de compuestos químicos identificados fueron los cosméticos, alimentarios y plastificantes con 19, 11 y 11 respectivamente. Se debe considerar que son los grupos que podrían encontrarse más cercanos al espacio personal de los participantes en el estudio, debido a que son utilizados frecuentemente en distintas actividades diarias. Le siguen los biocidas con 7 compuestos, luego los productos de combustión, lubricantes/grasas y pinturas/tinturas/resinas con 3 compuestos cada uno. Por último, farmacéuticos y retardantes de llama con 2 compuestos. Se debe considerar que el grupo de desconocidos presenta 4 compuestos, de los cuales no se logró obtener información suficiente para ser clasificados según la metodología.

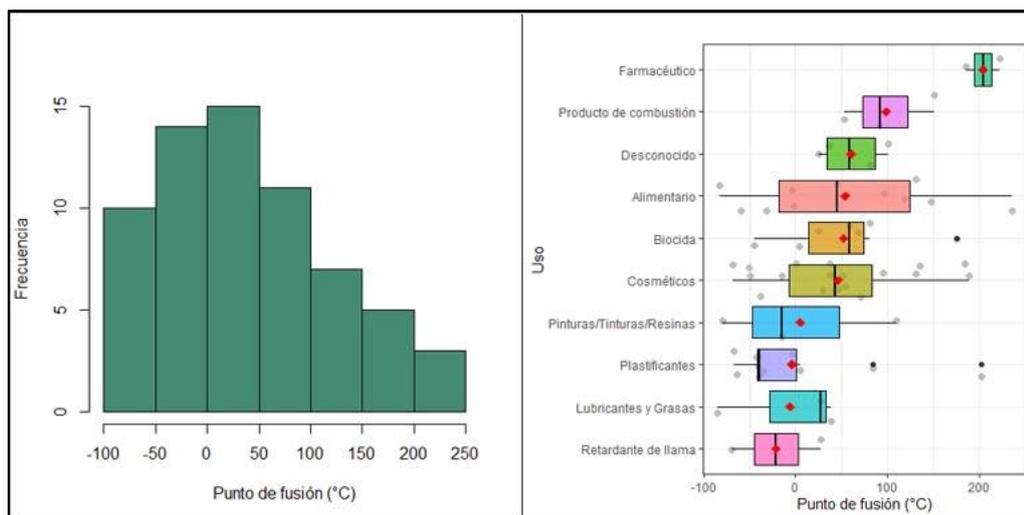
Los compuestos que componen cada uno de estos grupos se encuentra en la Tabla 7, según su uso, abreviación y número CAS correspondiente, de igual forma pueden ser identificados los compuestos en la Tabla 23 del anexo.

**Tabla 7.** Compuestos prioritarios que componen cada grupo de uso.

Uso	Abreviación / CAS	Uso	Abreviación / CAS
Cosméticos.	TCN 3380-34-5	Biocidas.	PBO 51-03-6
	PPG 25322-69-4		TM 7696-12-0
	$\alpha$ -TPL 98-55-5		DEET 134-62-3
	BNOH 100-51-6		FNT 122-14-5
	COU 91-64-5		O-HBP 95-47-6
	1NP 90-15-3		TA 5915-41-3
	LA 80546		CMT 52315-07-8
	PRL 120-57-0		
	MEEAP 5466-77-3	Farmacéutico.	BHT-OCH 1620-98-0
	BMZ 3896115		H21 50-03-3
	DMT 2440-22-4		
	DSIO 541-02-6		
	IMPA 103-95-7		
	MK 81-14-1		
	EAB 5444-75-7		
	HMN 4390049		
	PB 94-58-6		
BA 140-11-4			
MBOT 838-88-0			
Plastificantes.	BC 100-44-7	Lubricantes y grasas.	2,6-DTBP 128-39-2
	BBPth 85-68-7		TDO 7320-37-8
	DEHA 103-23-1		DBZA 105-76-0
	DBPth 84-74-2		
	DMPth 131-11-3		
	UVF 25973-55-1		
	4-t-O 140-66-9		
	TTM 3319-31-1		
	DBP 84-74-2		
	DIBP 84-69-5		
DEPth 84-66-2			
Alimentarios.	PG 57556	Productos de combustión.	MF 832-699
	MPB 99-76-3		ACY 208-96-8
	PPB 94-13-3		PY 129-00-0
	ETAC 141-78-6		
	OA 112-80-1		
	ETG 140-67-0		
	MPC 104938		
	ME 93-15-2		
	CF 58082		
	SA 108305		
CT 57885			
Pinturas/tinturas/resinas.	THFM 97-99-4	Retardante de llamas.	TOBEP 78-51-3
	QNL 91225		TDIF 13674878
Lubricantes y grasas.	2,6-DTB 128-39-2	Desconocidos.	MHP 1453-58-3
	TDO 7320-37-8		BZA 939 97 9
	DBZA 105-76-0		PCB 10 33146-45-1
			PCB 35 37680-69-6

### 3.2 Propiedades Fisicoquímicas

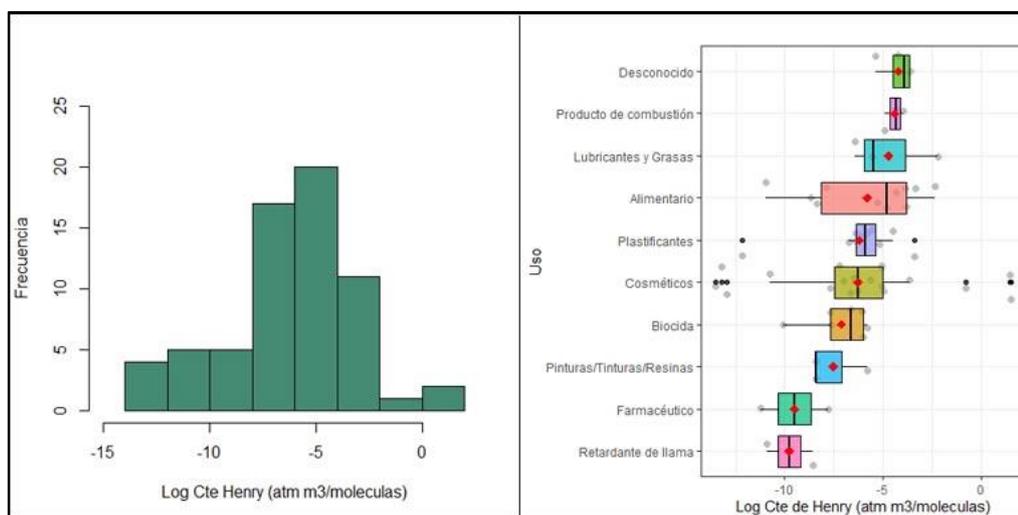
Las propiedades fisicoquímicas fueron comparadas y clasificadas según el material de marcos para futuros sostenibles desarrollado por la EPA (2012), ya antes mencionada en la Tabla 2.



**Figura 5.** a) Histograma de los Puntos de fusión (°C) para todos los compuestos prioritarios. b) Diagrama de caja para los Puntos de fusión (°C) respecto a la clasificación según usos.

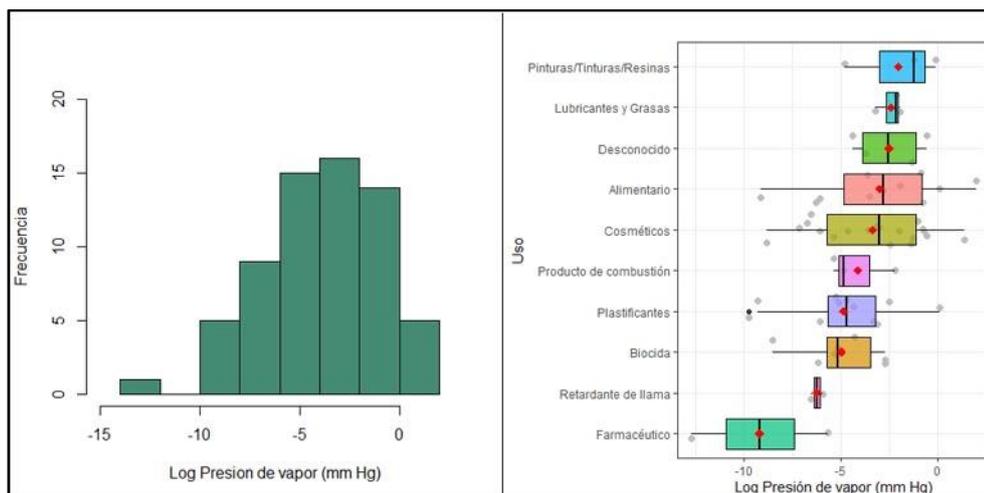
**Punto de fusión (P.f.):** Los Puntos de fusión de los compuestos estudiados se encontraron en un intervalo de  $(-85 < P.f < 236,1)$ , al ser comparados estos valores con la temperatura a la que se trabajó el modelo de 25 °C, 28 compuestos se encontrarían mayoritariamente en fase líquida y 37 en fase sólida. Paralelamente, según los resultados obtenidos y considerando el percentil 50 de estos grupos en orden decreciente, los primeros grupos fueron los farmacéuticos (P.f.= 204,5 °C); productos de combustión (P.f.= 92,5 °C) y desconocidos (P.f.= 59 °C). Entre los menores valores se encontraron las pinturas/tinturas/resinas (P.f.= -14,78 °C); retardantes de llama (P.f.= -21,5 °C) y plastificantes (P.f.= -39,5 °C). Esto demuestra

la capacidad de las pulseras de silicona para capturar un amplio rango de compuestos y no únicamente los que se encuentren mayoritariamente en la fase gas.



**Figura 6.** a) Histograma de Log Cte. de Henry (atm m<sup>3</sup>/moléculas) para todos los compuestos prioritarios. b) Diagrama de caja para Log Cte. de Henry (atm m<sup>3</sup>/moléculas) respecto a clasificación por usos.

**Constante de Henry (H):** La constante de Henry de los compuestos prioritarios estudiados se encontraron en un intervalo de  $(-13,5 < \text{Log } H < 1,52 \text{ atm m}^3/\text{moléculas})$ . La mayoría de los compuestos estudiados estuvo en el rango de moderadamente volátil del agua o no volátil  $(-8 < \text{Log } H < -4 \text{ atm m}^3/\text{moléculas})$ . Considerando el percentil 50, en orden decreciente, se encontraron primero los grupos clasificados como moderadamente volátiles: los desconocidos ( $\text{Log } H = -3,9 \text{ atm m}^3/\text{moléculas}$ ); productos de combustión ( $\text{Log } H = -4,3 \text{ atm m}^3/\text{moléculas}$ ) y alimentarios ( $\text{Log } H = -4,8 \text{ atm m}^3/\text{moléculas}$ ); por lo cual podrían llegar a volatilizarse con cierta facilidad. No obstante, los usos con menores valores y clasificados como no volátiles son las pinturas/tinturas/resinas ( $\text{Log } H = -8,4 \text{ atm m}^3/\text{moléculas}$ ), farmacéuticos ( $\text{Log } H = -9,5 \text{ atm m}^3/\text{moléculas}$ ) y retardantes de llama ( $\text{Log } H = -9,8 \text{ atm m}^3/\text{moléculas}$ ); de modo que, para estos compuestos químicos resulta menos probable la volatilización desde matrices como el agua.

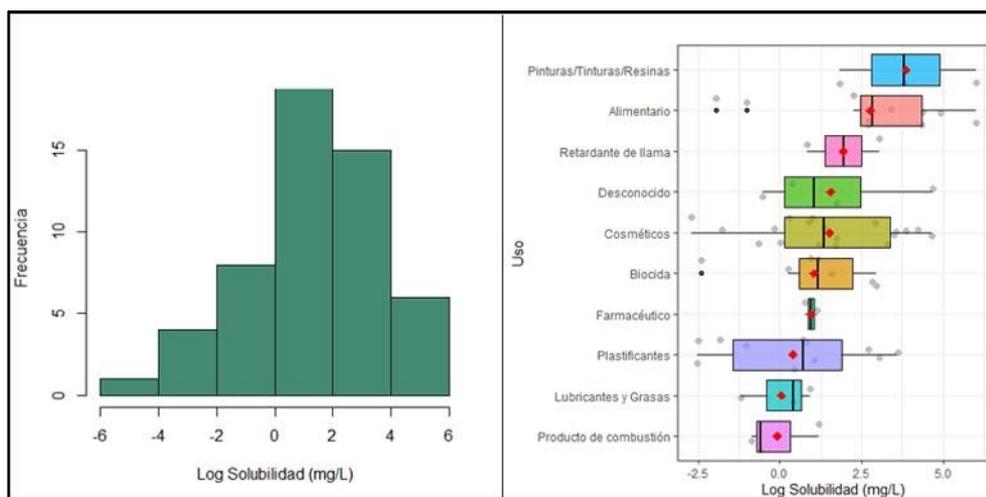


**Figura 7.** a) Histograma de Log Presión de vapor (mm Hg) para todos los compuestos prioritarios. b) Diagrama de caja para Presión de vapor (mm Hg) respecto a clasificación por usos.

**Presión de vapor (P):** Los compuestos químicos estudiados se encontraron en un intervalo de  $(-12,66 < \text{Log } P < 1,97 \text{ mm Hg})$ . Sin embargo, mayoritariamente se hallaron en la clasificación algunos en fase vapor y fase particulada/gas  $(-6 < \text{Log } P < -2 \text{ mm Hg})$ . Según el percentil 50 de los grupos y en orden decreciente se encontraron clasificados primero para fase vapor: pinturas/tinturas/resinas ( $\text{Log } P = -1,2 \text{ mm Hg}$ ); lubricantes y grasas ( $\text{Log } P = -2,1 \text{ mm Hg}$ ) y desconocidos ( $\text{Log } P = -2,5 \text{ mm Hg}$ ), por lo cual podrían tender a mantenerse fácilmente en compartimientos como la atmósfera. Sin embargo, entre los menores valores se encontraron clasificados como fase particulada y gaseosa los biocidas ( $\text{Log } P = -5,1 \text{ mm Hg}$ ), retardantes de llama ( $\text{Log } P = -6,2 \text{ mm Hg}$ ) y, por último, clasificado como en fase sólida, el grupo de farmacéuticos ( $\text{Log } P = -9,2 \text{ mm Hg}$ ), de modo que, tenderían a compartimientos como el agua, suelo y sedimentos principalmente.

Esto coincide con estudios en donde los biocidas como pesticidas o plaguicidas se les ha considerado su presencia y destino ambiental en el medio acuático. Inclusive se han demostrado que los metabolitos de plaguicidas a menudo se detectan en aguas subterráneas en concentraciones más altas en comparación con los

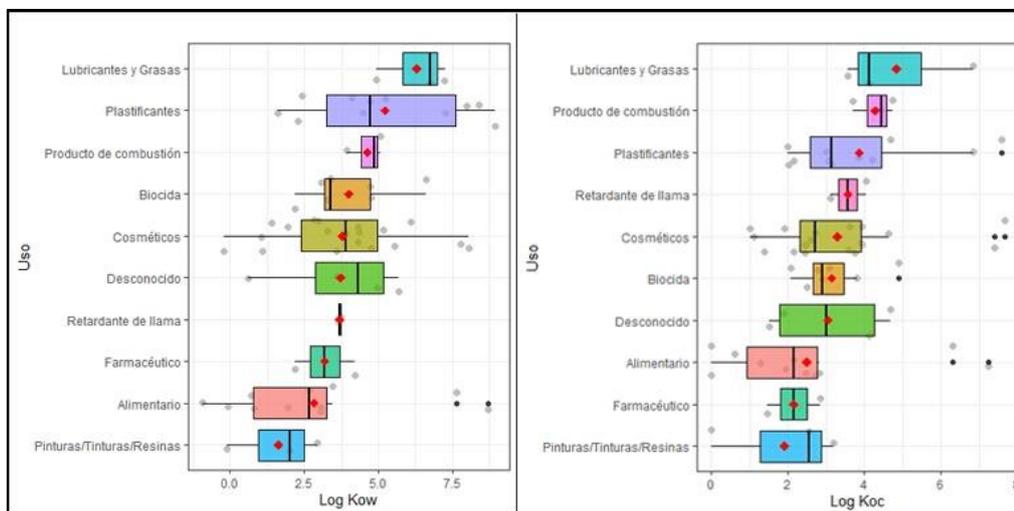
compuestos precursores (Kolpin y col., 2004; Lapworth y col., 2006). También así existen estudios en donde se ha hallado compuestos como los retardantes de llama en fases similares al suelo o sedimentos, como el polvo de interiores, siendo una fuente importante de exposición a ese tipo de compuestos (Dodson y col., 2012; Tajima y col., 2014; Zheng y col., 2017).



**Figura 8.** a) Histograma de Log Solubilidad (mg/L) para todos los compuestos prioritarios. b) Diagrama de caja para Log Solubilidad (mg/L) respecto a la clasificación por usos.

**Solubilidad (S):** Los compuestos químicos estudiados se encontraron en un intervalo de  $(-2,69 < \text{Log } S < 6,0 \text{ mg/L})$ . Específicamente, se hallaron en mayor abundancia clasificados como ligeramente solubles ( $0 < \text{Log } S < 2 \text{ mg/L}$ ). Usando el percentil 50 de los grupos y según el orden decreciente, se encontraron primero los grupos clasificados como solubles pinturas/tinturas/resinas ( $\text{Log } S = 3,8 \text{ mg/L}$ ); de solubilidad moderada los alimentarios ( $\text{Log } S = 2,8 \text{ mg/L}$ ) y ligeramente solubles los retardantes de llama ( $\text{Log } S = 1,9 \text{ mg/L}$ ); en consecuencia, se puede esperar que tengan una mayor capacidad de disolverse en agua. Entre los menores valores se encuentran los grupos clasificados como ligeramente solubles, plastificantes ( $\text{Log } S = 0,7 \text{ mg/L}$ ); lubricantes y grasas ( $\text{Log } S = 0,4 \text{ mg/L}$ ); y por último los productos de

combustión clasificados como de solubilidad insignificante ( $\text{Log } S = -0,6 \text{ mg/L}$ ), por ende, para estos tipos de compuestos, la capacidad de disolverse en agua es menor.

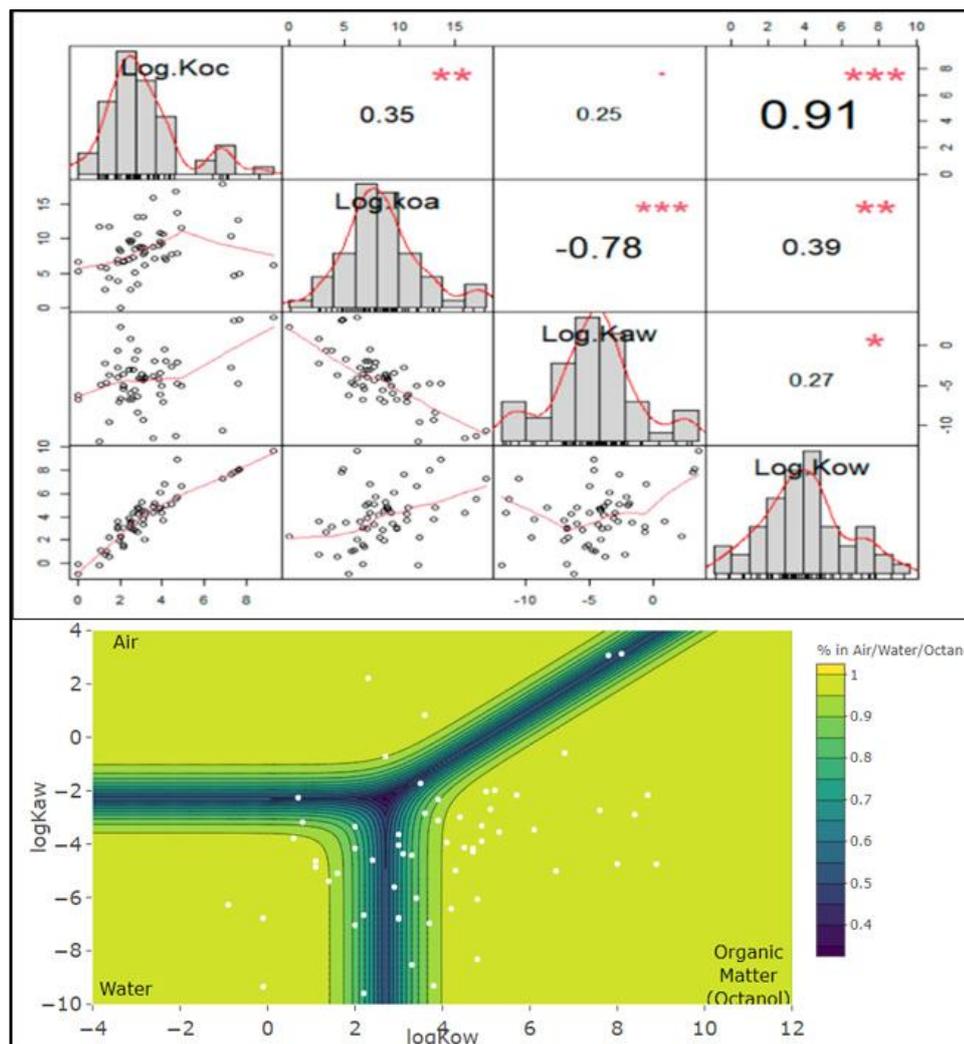


**Figura 9.a)** Diagrama de caja para coeficiente de reparto octanol-agua (Kow). b) Diagrama de caja para coeficiente de adsorción en el suelo (Koc).

**Coefficientes de reparto:** Los compuestos estudiados se encontraron en un intervalo de  $(-0,9 < \text{Log Kow} < 8,9)$ . Al comparar entre grupos, según su percentil 50 y en orden decreciente, se hallaron primero los clasificados como poco solubles en agua (hidrofóbicos) y que podrían tender a bioacumularse en la porción lipídica de las membranas de organismos, suelos y sedimentos: lubricantes y grasas ( $\text{Log Kow} = 6,8$ ); productos de combustión ( $\text{Log Kow} = 4,9$ ) y plastificantes ( $\text{Log Kow} = 4,7$ ). De modo que, los altos valores de coeficientes octanol-agua ( $\text{log Kow} > 3,5$ ) hacen que este tipo de compuestos al ser liberados al ambiente puedan ser adsorbidos por organismos o partículas suspendidas (Dang y col. 2001) y al tender a una movilidad menor, favorecería a los compuestos más tóxicos en la bioacumulación (EPA, 2012). Por otro lado, los menores valores se encuentran clasificados como altamente solubles en agua (hidrofílicos): farmacéuticos ( $\text{Log Kow} = 3,2$ ); alimentarios ( $\text{Log Kow} = 2,7$ ); pinturas/tinturas/resinas ( $\text{Log Kow} = 2,0$ ); por lo cual podrían absorberse a través de la piel, con una mejor movilidad y transporte, además de facilitar la

biodegradación, provocando que la bioacumulación sea menos probable (EPA, 2012). Además, en el escenario de los domicilios, los compuestos al tener una mayor capacidad de disolverse en agua pueden transportarse, lo que podría derivar en contaminación de aguas residuales hacia plantas de tratamiento de aguas.

Los compuestos estudiados obtuvieron valores en un intervalo de ( $0 < \text{Log Koc} < 7,7$ ). Al comparar los valores de Log Koc según los percentiles 50 y en orden decreciente se encontraron primero los clasificados como de fuerte adsorción al suelo/sedimento: productos de combustión (Log Koc= 4,4); lubricantes y grasas (Log Koc= 4,1) y retardantes de llama con (Log Koc = 3,5); de modo que tendrán una insignificante o lenta migración a las aguas subterráneas (EPA, 2012). Por contraparte, usos con menores valores son clasificados como de baja adsorción a la fase orgánica del suelo/sedimento, los cuales son pintura/tintura/resina (Log Koc = 2,5); farmacéuticos (Log Koc = 2,2) y alimentarios (Log Koc = 2,2); por consecuencia tenderán a una migración moderada a las aguas subterráneas, pudiendo llegar a causar situaciones de contaminación en las aguas.



**Figura 10.** a) Correlación entre Coeficiente de adsorción del suelo (Koc), Coeficiente reparto octanol-aire (Koa), Coeficiente de reparto aire-agua (Kaw) y coeficiente de reparto octanol-agua (Kow). b) Gráfico de dispersión de los compuestos Log Kow vs Log Kaw, considerando las matrices de aire, agua o materia orgánica.

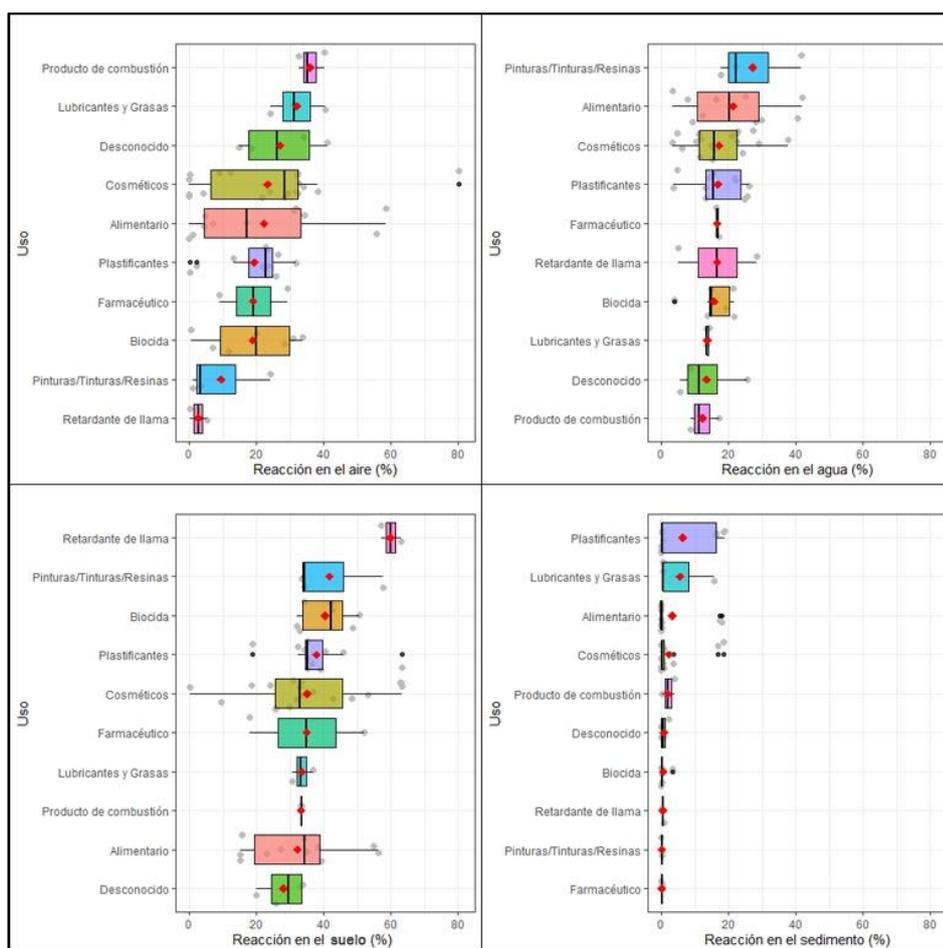
Se obtuvo que las correlaciones entre los coeficientes de reparto muestran dos tendencias importantes. El coeficiente de adsorción del suelo (Koc) y coeficiente de reparto octanol-agua (Kow) obtuvieron una correlación con un  $r = 0,91$ . Esto quiere decir que existe una correlación entre las dos variables, de modo que, es de esperar que compuestos que tiendan a un alto Kow se bioacumulen en las fases orgánicas y en suelos/sedimentos. Por otra parte, el coeficiente de reparto aire-agua (Kaw) y coeficiente de reparto octanol-aire (Koa) presentaron una correlación negativa de

$r = -0,78$ ; por lo cual compuestos que tiendan a un alto  $K_{ow}$  y bajo  $K_{aw}$  tenderán principalmente a las fases orgánicas de los compartimientos.

De igual forma se observó mediante la gráfica de dispersión de  $\log K_{ow}$  v/s  $\log K_{aw}$  que existe un rango bastante amplio para los coeficientes de reparto entre los compuestos marcados como prioritarios. No obstante, la gran mayoría se distribuyó principalmente entre la materia orgánica y el medio acuoso (agua), lo que concuerda con las propiedades analizadas anteriormente. Esto indicaría que son dos posibles reservorios importantes para analizar en futuras investigaciones.

### 3.3 Resultados del modelo de *Fugacity level III*

#### 3.3.1. Pérdidas del compuesto por reacción o advección



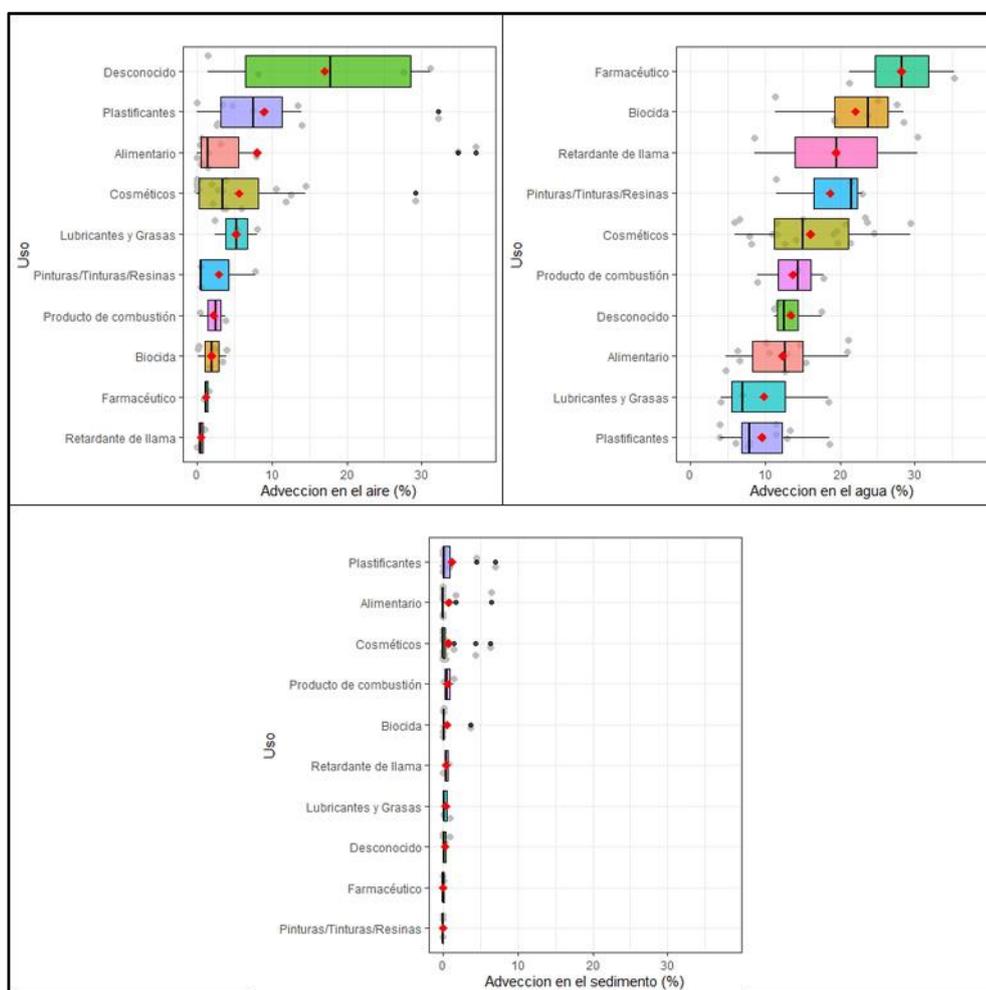
**Figura 11.** Pérdidas por reacciones en los compartimientos.

Las pérdidas por reacciones de degradación se encontraron relacionadas con las propiedades fisicoquímicas que presentaron los compuestos prioritarios, debido a que son estas las que permiten su repartición entre los compartimientos. Para el compartimiento del aire, y según el percentil 50 y en orden decreciente, los grupos con mayores porcentajes de reacción fueron los productos de combustión con 35,9%, lubricantes y grasas con 31,9% y cosméticos con 28,3%. Entre los grupos con menores porcentajes de reacción fueron los alimentarios con 17%, pinturas/tinturas/resinas con 3,19% y, por último, retardantes de llama con 2,62%. Los mayores porcentajes de reacción son los compuestos de usos con una mayor afinidad y reparto hacia el aire, por ende, tienen además una tasa de oxidación atmosférica mayor al resto de los compuestos orgánicos, lo que tiene relación con sus estructuras químicas.

Para el compartimiento del agua se encuentran los mayores porcentajes de reacción para los grupos de pinturas/tinturas/resinas con 22,2%, alimentarios con 20,02% y farmacéuticos con 16,65%. Entre los grupos con menores porcentajes de reacción en el agua fueron, lubricantes y grasas con 13,5%, productos de combustión con 12,29% y desconocidos con 11,08%. Lo que significa que, al encontrarse en este compartimiento y a su mayor capacidad de solubilidad en el medio acuoso, es posible que reaccionen degradándose mediante hidrólisis o por medio de las poblaciones de microorganismos mixtos que contempla el entorno evaluativo.

Para las reacciones en el compartimiento del suelo, los grupos con mayores porcentajes fueron los retardantes de llama con 59,95%, biocidas con 42,2% y plastificantes con 35,2%. Entre los grupos con menores porcentajes de reacción fueron productos de combustión con 33,27%, cosméticos con 32,9% y por último desconocidos con 29,45%. Estos resultados se encuentran relacionados con la fuerte partición que presentan estos compartimientos hacia el suelo, permitiéndose las reacciones de degradación por las poblaciones de microorganismos mixtas.

Para las reacciones en el compartimiento de los sedimentos se encontraron los mayores porcentajes para los grupos: lubricantes y grasas con 5,46%, productos de combustión con 1,99% y retardantes de llamas con 0,39%. Entre los grupos con menores porcentajes de reacción fueron las pinturas/tinturas/resinas con 0,039%, farmacéuticos con 0,038%, y alimentarios con 0,017%. Esto significa que los compuestos con mayores tasas de reacción son justamente los con valores de Log Kow >7, por lo cual tienen una gran afinidad a las fases orgánicas, manteniéndose en estas fases preferentemente y degradándose en el mismo compartimiento.



**Figura 12.** Pérdidas por advección en los compartimientos.

Las pérdidas por advección corresponden a las que no constituyen degradaciones. Los mayores porcentajes de advección se obtuvieron para los compartimentos de aire y agua, ya que, el transporte se facilita en estos medios (escorrentía, viento) a comparación de los sedimentos, en donde los valores son mucho más bajos y el transporte físico fuera del compartimiento se encuentra más limitado.

Según el compartimiento del aire, considerando el percentil 50 y en orden decreciente, los grupos con los mayores porcentajes de advección son los desconocidos con un 17,84%, plastificantes 8,77% y lubricantes y grasas con 5,28%. Los grupos con menores porcentajes son farmacéuticos con 1,20%, retardante llama con 0,53% y pinturas/tinturas/resinas con 0,5%. Esto quiere decir que, por ejemplo, los compuestos de uso desconocido tienen un alto potencial de transporte en el aire, lo que puede explicar que no se conozca su uso en el entorno interior de domicilios, pudiendo provenir de los exteriores. Así también plastificantes, lubricantes y grasas son los compuestos que se presentaron en fase vapor y con valores de Log H más altos, de modo que su volatilización y transporte en el compartimiento del aire se les facilita. No así para farmacéuticos, retardantes de llama y pinturas/tinturas/resinas que se presentaron en fases vapor-particuladas con valores de Log H menores, por lo cual no se volatilizarán desde medios acuosos, y el transporte en el medio atmosférico es mucho menor.

Para el compartimiento en el agua, los grupos con mayores porcentajes de advección son los farmacéuticos con 28,8%, biocidas con 23,7% y pinturas/tinturas/resinas con 21,5%. Los grupos con menores porcentajes son: desconocidos con 12,5%, plastificantes con 7,93% y lubricantes y grasas con 6,9%. De modo que, los compuestos que se encontraron en fases vapor-particulada y con una solubilidad moderada son aquellos que pueden transportarse con mayor facilidad por medios acuosos. Existe evidencia que confirma estos resultados, en donde los compuestos

farmacéuticos y biocidas (plaguicidas) son considerados contaminantes emergentes que pueden encontrarse y transportarse en los medios acuosos (Gil y col., 2012).

Para el compartimiento en el sedimento, los grupos con mayores porcentajes de advección son: productos de combustión con 0,445%, retardantes de llama con 0,396%, y desconocidos con 0,08997%. Los grupos con menores porcentajes son pinturas/tinturas/resinas con 0,009%, cosméticos con 0,0086% y alimentario con 0,0032%. Esto se debe a que los compuestos con mayores valores de Log Kow son los que principalmente se transportan a los sedimentos, debido a su gran afinidad por las fases orgánicas, perdiéndose por advección.

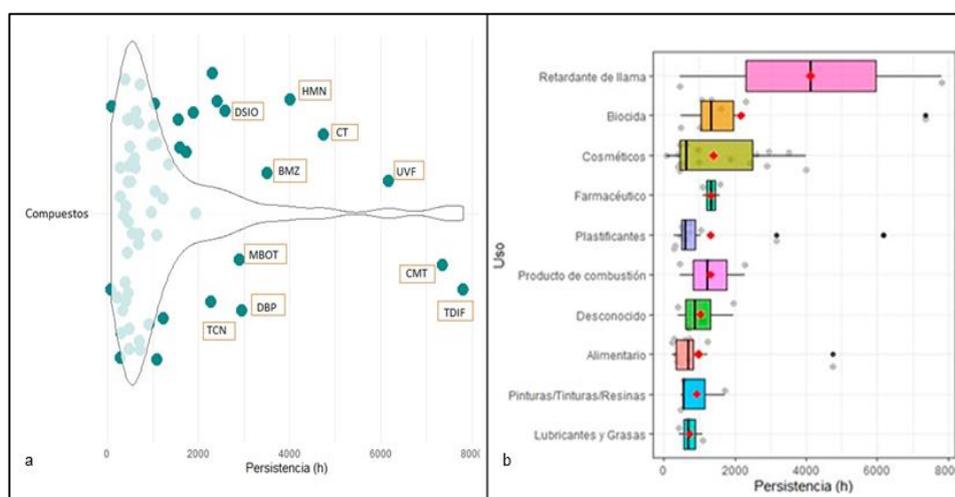
Finalmente se encontró que las pérdidas por reacciones y advecciones en los diferentes compartimientos se dan principalmente en los compuestos con propiedades fisicoquímicas con una mayor afinidad por el medio. De modo que, los compuestos en fase vapor, con un mayor potencial a volatilizarse, permitirá el transporte hacia el compartimiento del aire reaccionando y advectándose en este. Compuestos en fase vapor-particulada, con solubilidad moderada y con un menor potencial de volatilizarse tenderá a transportarse en medios acuosos (agua) y, por último, compuestos en fases particuladas y con altos coeficientes de reparto hacia las fases orgánicas se transportarían hacia los sedimentos, reaccionando y advectándose preferentemente en este compartimiento.

### 3.3.2. Persistencia en el modelo

**Tabla 8.** Resultados según la escala definida por BIOWIN3.

Encuesta de expertos (BIOWIN 3)	Cantidad de compuestos
Días-semanas.	6
Semanas.	26
Semanas-meses.	20
Meses.	11
Recalcitrante.	2

Según el método de encuesta de científicos, se obtuvo diferentes cantidades de compuestos para los tiempos en que permanecerían cada una de las sustancias en el modelo. Se encontró que 6 compuestos se degradarán en rangos entre días a semanas, mientras que 26 compuestos lo harían en el rango de semanas, 20 compuestos en el rango de semanas a meses, otros 11 compuestos en el rango de meses, por último, se encuentran 2 compuestos considerados como recalcitrantes. Esta última clasificación refiere a compuestos que permanezcan más de 180 días en el modelo, en este caso correspondió al Tris(1,3-dicloroisopropil)fosfato (CAS: 13674878) clasificado como retardante de llama y la cipermetrina (CAS: 52315-07-8) clasificada como biocida.



**Figura 13.** a) Diagrama de violín para tiempos de persistencia atribuidos por BIOWIN3. b) Diagrama de cajas para la persistencia según grupos.

\*Se muestran las abreviaciones de los compuestos prioritarios importantes, la lista con los nombres completos puede ser encontrada en el anexo\*

Según el diagrama de violín obtenido con los valores persistencia de los compuestos en el modelo, se encontró que existe una gran distribución y densidad de los compuestos entre 0 y 2 000 horas, Sin embargo, de 2 000 a 4 000 horas la cantidad de compuestos disminuye. Donde se encuentra el Triclosano (TCN, CAS: 3380-34-5) cosmético con 2 590 h (3 meses aprox.), el Decametilciclopentasiloxano (DSIO, CAS: 541-02-6) cosmético con 2900 h (4 meses aprox.), el 4,4'-metilenebis[2-metilbencenamina] (MBOT, CAS: 838-88-0) cosmético con 2 960 h (4 meses aprox.), el Di-isooctil ftalato (DBP, CAS: 84-74-2) plastificante con 3 170 h (4 meses aprox.), el Bumetrizol (BMZ, CAS: 3896115) con 3 520 h (4 meses aprox.). La distribución de los compuestos disminuye aún más entre el rango de 4 000 a 8 000 horas, donde se encuentran destacados 5 compuestos, correspondientes a 2,2,4,4,6,8,8-heptametilnonano (HMN, CAS: 4390049) cosmético con 4 010 h (5 meses aprox.), el Colesterol (CT, CAS: 57885) alimentario con 4 750 h (6 meses aprox.), el 2-(2H-benzotrizol-2-il)-4,6-bis(1,1-dimetilpropil)-fenol (UVF, CAS: 25973-55-1) plastificante con 6170 h (8 meses aprox.), la Cipermetrina (CMT, CAS: 52315-07-8), biocida con 7 350 h (10 meses aprox.) y el Tris(1,3-dicloroisopropil)fosfato (TDIF, CAS: 13674878) retardante de llama con 7 810 h (11 meses aprox.). Respecto al diagrama de cajas de la persistencia según los grupos, considerando el percentil 50, en orden decreciente nos encontramos con los mayores valores de persistencia en los grupos como retardantes de llama con 4 138 h (172 días), los biocidas con 1 350 h (56 días) y farmacéuticos con 1 330 h (55 días). Los grupos con menores valores de persistencia son los cosméticos con 640 h (26 días), los plastificantes con 623 h (25 días) y pintura/ tintura/ resina con 562 h (23 días). Estos resultados tienen concordancia con estudios previos donde los retardantes de llamas, biocidas (plaguicidas), productos farmacéuticos, plastificantes y cosméticos, comenzando a ser considerados como contaminantes emergentes, debido a que antes no se consideraba que podrían tener

un impacto importante en el entorno, sin embargo, con el tiempo se ha demostrado que presentan una resistencia a la degradación, con valores de persistencia mayores e inclusive algunos con potenciales de bioacumulación importantes (García y col., 2015).

### 3.3.3. Reparto entre compartimientos

El reparto de los compuestos, siguiendo el modelo de *Fugacity level III* de Mackay, ocurre entre los compartimientos: aire, agua, suelo o sedimento. Los resultados obtenidos para el reparto porcentual se encuentran en la Tabla 9. En donde fue considerado para cada compuesto el compartimiento con un mayor porcentaje para cada caso.

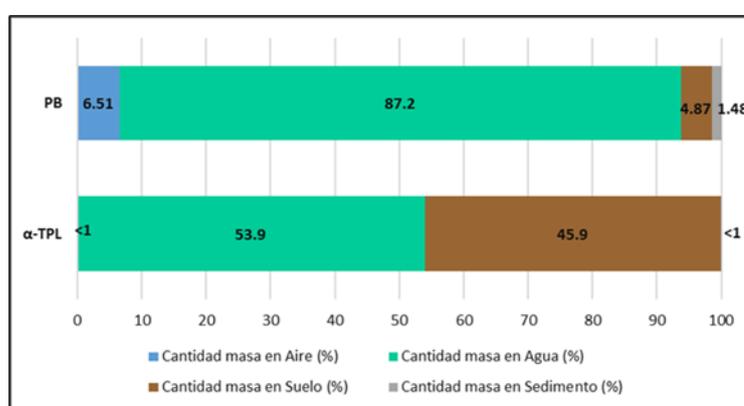
**Tabla 9.** Reparto mayoritario de los compuestos respecto a los compartimientos aire, agua, suelo y sedimento.

Compartimiento	Cantidad	Cantidad/ Uso
Aire	0	0 ninguno.
Agua	2	2 cosméticos.
Suelo	54	9 alimentarios. 7 biocidas. 15 cosméticos. 4 desconocidos. 2 farmacéuticos. 2 lubricantes y grasas. 3 pinturas/tinturas/resinas. 7 plastificantes. 3 productos de combustión. 2 retardantes de llamas.
Sedimento	9	2 alimentarios. 2 cosméticos. 1 lubricantes y grasas. 4 plastificantes.

Según los resultados obtenidos en la Tabla 9, el reparto de los compuestos orgánicos se encuentra ligado principalmente a sus propiedades fisicoquímicas, mostrando afinidad por ciertos compartimientos ambientales. Estos repartos representan los porcentajes del compuesto emitido al modelo previo a los procesos de pérdida por reacciones de degradación o advección. Se encontró que los compuestos evaluados

presentaron una mayor afinidad por el suelo, sedimento, agua y por último el aire. Al evaluar los subcompartimentos, como la biota y sedimentos suspendidos en el agua, se obtuvieron porcentajes en el intervalo de  $2,07 \times 10^{-7}$  al 3% y  $5,0 \times 10^{-5}$  al 5% respectivamente, por lo que, al ser valores bastante bajos, no fueron considerados. Se puede visualizar los repartos obtenidos para cada compuesto en la Tabla 24 del anexo.

### 3.3.3.1. Reparto mayoritario en el compartimiento del agua

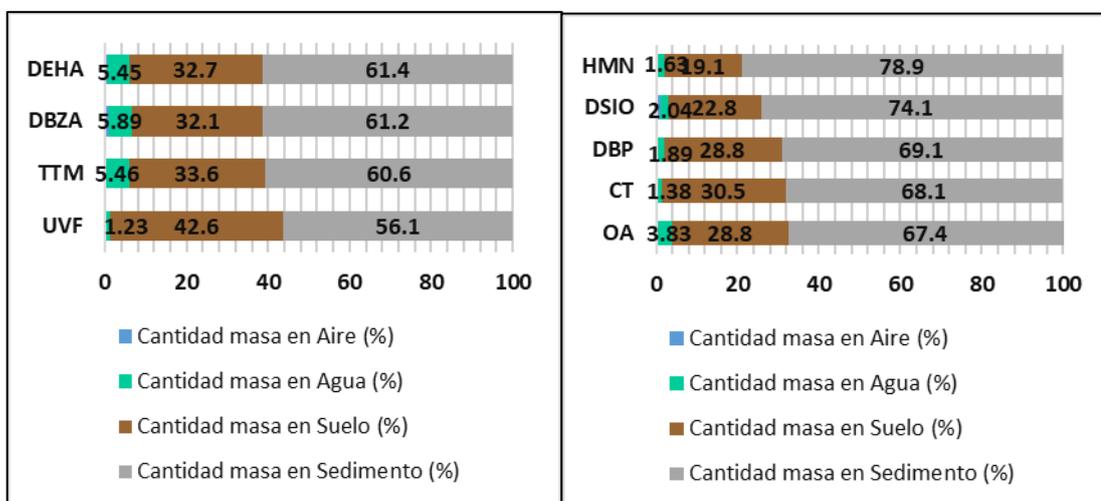


**Figura 14.** Compuestos con un reparto mayoritario por el compartimiento del agua.

Se obtuvieron 2 compuestos con un mayor reparto en el compartimiento del agua, el compuesto PB (CAS:94-58-6) con un 87,2% y el α-TPL (CAS: 98-55-5) con un 53,9%. Las propiedades que comparten estos compuestos son el coeficiente de reparto octanol-agua ( $K_{ow}$ ), con valores clasificados como solubles, por lo tanto, hidrofílicos, lo que favorece el transporte en el agua. También presentan valores de coeficiente de adsorción ( $K_{oc}$ ) clasificados como de baja adsorción al suelo, por ende, la migración es esperable a las aguas subterráneas o superficiales. Las clasificaciones según sus usos señalan para ambos la categoría “cosméticos”, por consiguiente, se recomienda estudiar las matrices de aguas potables como posible reservorio de este grupo de compuestos. Existen investigaciones donde se ha determinado que los productos de cuidado personal como los cosméticos, forman parte de los

contaminantes emergentes, ya que, en ocasiones se utilizan en cantidades superiores a las recomendadas, introduciéndose en el medioambiente en concentraciones elevadas. Se pueden encontrar fuentes contaminantes como las plantas de tratamiento de aguas residuales y también las masas de agua continentales en las que se liberan directamente (Pachés, 2020).

### 3.3.3.2. Reparto mayoritario en el compartimiento del sedimento

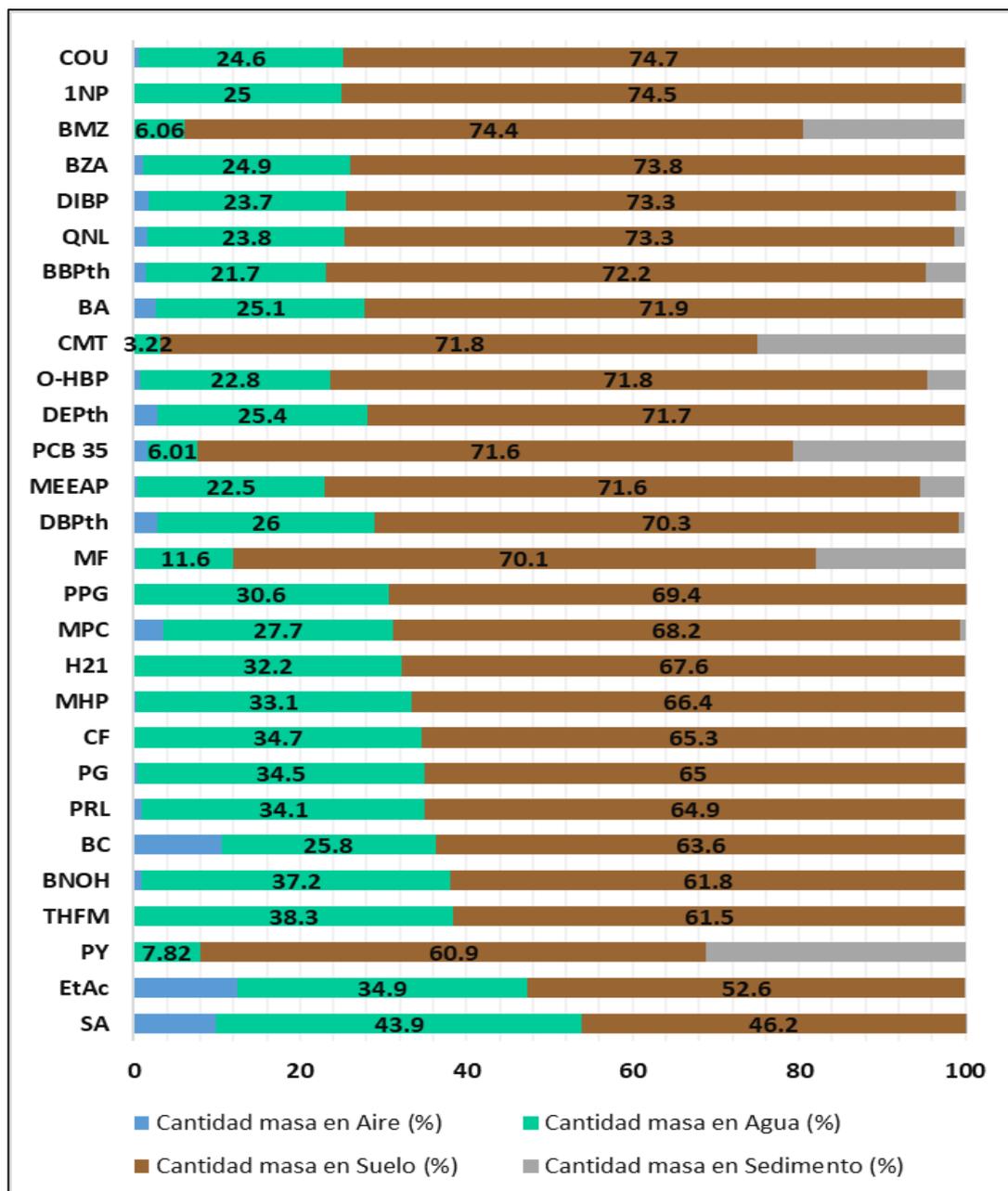


**Figura 15.** Compuestos con un reparto mayoritario por el compartimiento de sedimentos.

Los compuestos que obtuvieron un mayor porcentaje de reparto en el compartimiento de sedimentos es el HMN (CAS: 4390049), cosmético con un 78,9%; el DSIO (CAS: 541-02-6), cosmético con 74,1%; el DBP (CAS: 84-74-2), plastificante con un 69,1%; el CT (CAS: 57885), alimentario con un 68,1%; el OA (CAS: 112-80-1), alimentario con un 67,4%; el DEHA (CAS: 103-23-1), plastificante con un 61,4%; el DBZA (CAS: 105-76-0), lubricante y grasas con un 61,2 %; el TTM (CAS: 3319-31-1), plastificante con un 60,6% y por último; el UVF (CAS: 25973-55-1), plastificante con un 56,1% de reparto en el sedimento. Todos estos compuestos tienen en común su clasificación de insignificante solubilidad en el agua producto de sus estructuras químicas ampliamente ramificadas y cicladas. Se debe considerar que el programa de *Fugacity*

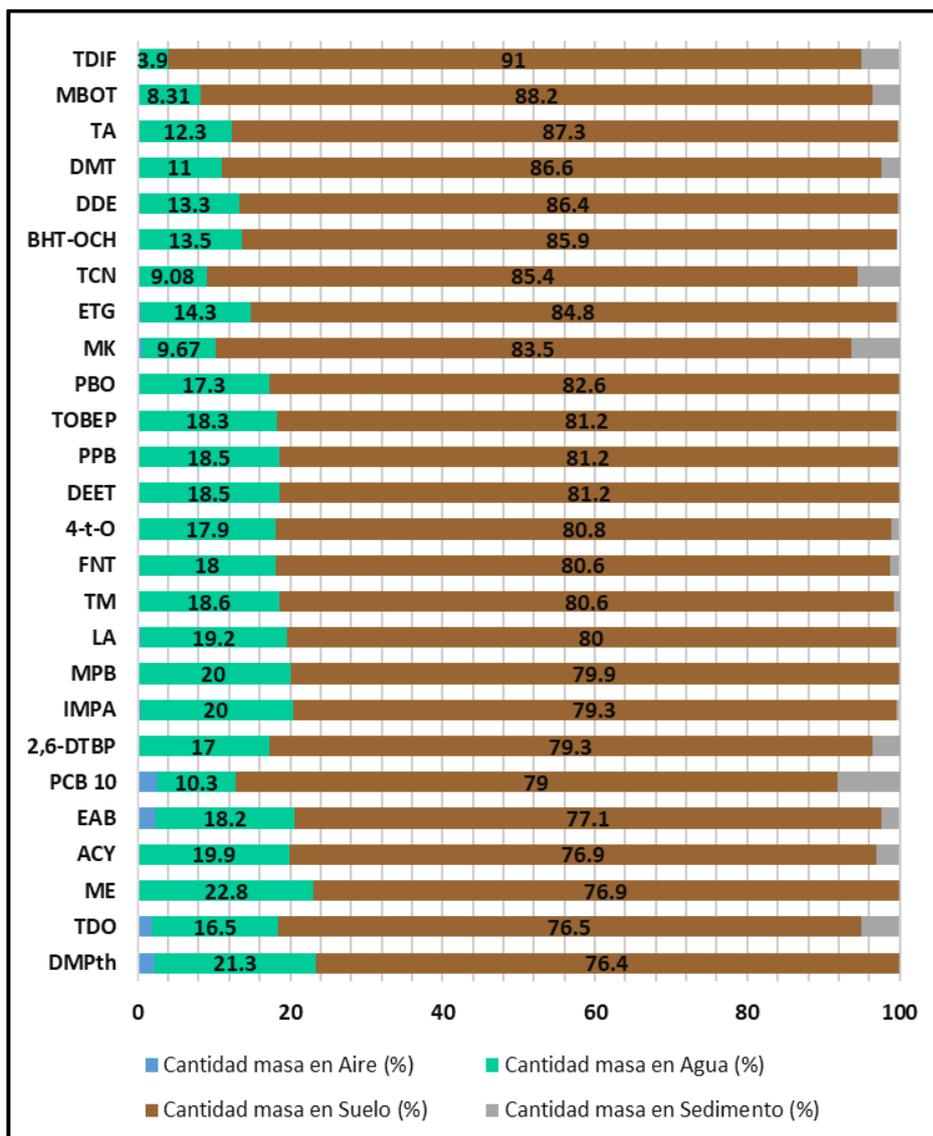
level III entrega un aviso cuando el compuesto evaluado en el modelo presenta un valor superior a Log Kow igual o mayor a 7, debido a que podría subestimar la masa en el compartimiento de sedimento, por lo que puede ser aún mayor la afinidad por las fases orgánicas.

### 3.3.3.3 Reparto mayoritario en el compartimiento del suelo



**Figura 16.** Compuestos con un reparto mayoritario en el suelo, con un máximo del 75%.

Se observaron compuestos con un reparto en el suelo de máximo 75 %, entre estos se encuentran 8 cosméticos, 5 alimentarios, 6 plastificantes, 2 productos de combustión, 3 desconocidos, 1 biocida, 1 farmacéutico y 1 pintura/tintura/resina. Entre los menores porcentajes de reparto en el suelo se encontraron el BNOH (CAS:100-51-6) cosmético; el THFM (CAS: 97-99-4) pinturas/tinturas/resinas; el PY (CAS: 129-00-0) producto de combustión; el ETAC (CAS: 129-00-0) alimentario y el SA (CAS: 108305) alimentario. Sin embargo, los compuestos que destacan con los mayores porcentajes de este tramo son, el COU (CAS: 90-15-3) cosmético; el 1NP (CAS: 90-15-3) cosmético; el BMZ (CAS: 3896115) cosmético; el BZA (CAS: 939 97 9) desconocido, y el QNL (CAS: 91225) pintura/tintura/resina.

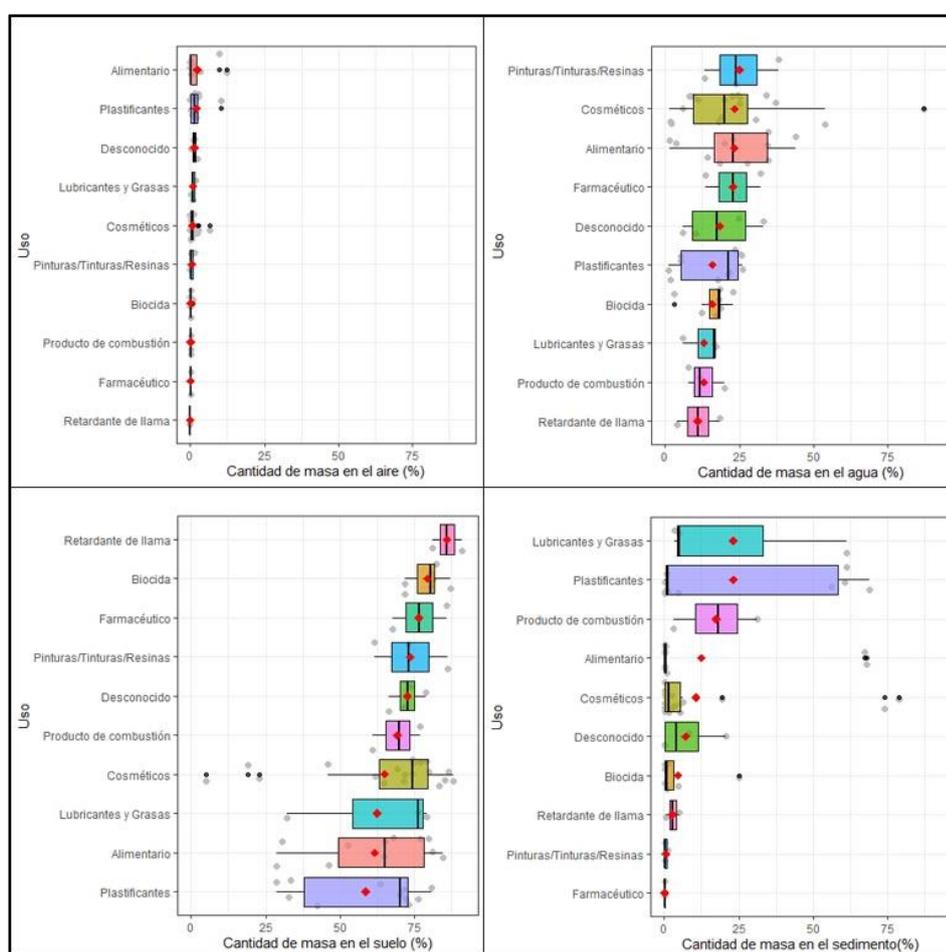


**Figura 17.** Compuestos con un reparto mayoritario en el suelo, entre el 75 - 100%.

Los compuestos con los mayores valores de reparto en el suelo van desde un 75-100%. Entre estos se encontraron 7 cosméticos, 5 biocidas, 4 alimentarios, 2 retardante de llamas, 2 plastificantes, 2 lubricantes y grasas, 1 farmacéutico, 1 desconocido, 1 pintura/tintura/resina y 1 producto de combustión. Los compuestos con menores porcentajes de este tramo son el DMPth (CAS 131-11-3) plastificante; El TDO (CAS: 7320-37-8) lubricante y grasas; el ACY (CAS: 208-96-8) producto de

combustión; el ME (CAS: 93-15-2) alimentario, y el EAB (CAS: 5444-75-7) cosmético. Sin embargo, entre los compuestos con más altos porcentajes en el suelo de toda la lista prioritaria se encontraron el DDE (CAS: 24650-42-8) pinturas/tinturas/resinas; el DMT (CAS: 2440-22-4) cosmético; la TA (CAS: 5915-41-3) biocida; y el MBOT (CAS: 838-88-0) cosmético. El compuesto con mayor reparto de toda la lista hacia el suelo es el TDIF (CAS: 13674878) retardante de llama.

### 3.3.3.4. Comparación de repartos entre compartimientos



**Figura 18.** Cantidad de masa en cada compartimiento (%).

Se obtuvieron los porcentajes para la cantidad de masa de los grupos en cada uno de los compartimientos. De modo que, considerando los percentiles 50 de cada uno

de estos grupos se encontró que, para el aire, los grupos con un mayor reparto fueron: plastificantes con 1,41%, desconocidos con 1,37% y lubricantes y grasas con 0,77%. Para el compartimiento del agua los grupos con un mayor reparto fueron las pinturas/tinturas/resinas con 23,8%, farmacéuticos con 22,85% y alimentarios con 22,8%. Para el compartimiento del suelo los grupos que obtuvieron un mayor reparto son los retardantes de llama con 86,1%, biocidas con 80,6% y farmacéuticos con 76,75%. Para el compartimiento de sedimentos los grupos que se encontraron con un mayor reparto fueron los productos de combustión con 18%, lubricantes y grasas con 5,06% y desconocidos con 4,1%.

Según los resultados obtenidos se pudo determinar que el modelo presenta repartos hacia el compartimiento del aire menores, a pesar de que se encontraban compuestos considerados como en fase vapor que se espera podrían llegar a volatilizarse, por lo que se debe tener en cuenta que una propiedad fisicoquímica no predetermina el destino ambiental final de un compuesto. Una limitación del modelo es que no son considerados los posibles efectos sinérgicos en los distintos compartimientos. Todas las modelaciones son realizadas individualmente, por consiguiente, las interacciones de compuestos entre sí no son consideradas. Por último, el entorno es evaluativo, no representa la totalidad de la realidad de diferentes entornos. Son bastantes factores que no siempre pueden ser controlados, de modo que, la simplificación del modelo si cumple con tener una idea aproximada de donde podrían encontrarse los diversos compuestos en reservorios.

Finalmente, los resultados obtenidos mostraron principalmente una tendencia hacia los suelos y sedimentos como posibles reservorios de los compuestos estudiados en el exposoma de las personas. Hay que destacar que el contexto del estudio se basa en diferentes ciudades de Chile, de modo que se difiere respecto a los únicos 4 compartimientos aire, agua, suelo y sedimento. Las personas que utilizaron las

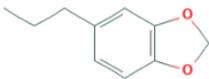
pulseras se movilizaron entre domicilios, trabajos y el exterior, por lo cual los posibles reservorios son variados. El compartimiento del aire no difiere, hace referencia a la atmósfera y la fase gaseosa a la que las personas se encuentran expuestas constantemente, el agua hace referencia al agua potable de domicilios, trabajos u otros, además de matrices acuosas como ríos, lagos o mar. El más relevante para este estudio es el suelo, pudiendo compararse con el polvo o partículas sólidas debido a que presentan materia orgánica donde los compuestos pueden adherirse, y así los individuos encontrarse expuestos en domicilios, jardines, trabajos, entre otros. Por último, el sedimento hace referencia al contacto de algún material orgánico que tenga relación directa con una matriz acuosa, lo que es difícil de encontrar en un domicilio u trabajo, pero sí en el exterior.

### 3.4. Relación de grupos funcionales, propiedades y sus destinos ambientales finales mayoritarios

Las estructuras o grupos funcionales de cada uno de los compuestos son los que le brindan las propiedades fisicoquímicas a cada una de las moléculas, las cuales son relacionadas por el modelo para entregar una distribución final entre los reservorios. Se evaluaron los grupos funcionales principales de las moléculas, según el destino ambiental final mayoritario que entregó el modelo.

#### 3.4.1. Compuestos con mayoritariamente reparto en las aguas

**Tabla 10.** Compuestos con un mayor reparto en el agua.

	
<p>PB (CAS:94-58-6) Cosmético</p>	<p><math>\alpha</math>-TPL (CAS:98-55-5) Cosmético</p>

Los compuestos con un reparto mayoritario en el agua presentan los siguientes grupos: un metilendioxi y un alcohol, ambos además tienen un grupo aromático en sus estructuras, que aumenta el peso molecular de las moléculas. No obstante, en sus grupos funcionales, el oxígeno, al ser un elemento electronegativo genera polaridad a la molécula y así también la posibilidad de interactuar con las moléculas de agua mediante puentes de hidrógeno como aceptores o dadores de enlaces, por consiguiente, estos fragmentos les otorgan solubilidad a los compuestos, permitiéndoles tener una mayor distribución en este reservorio.

### 3.4.2. Compuestos con mayoritariamente reparto en los sedimentos

**Tabla 11.** Compuestos con un mayor reparto hacia los sedimentos.

HMN (CAS:4390049) Cosmético	DSIO (CAS:541-02-6) Cosmético	DBP (CAS:84-74-2) Plastificantes	DEHA (CAS:103-23-1) Plastificantes
OA (CAS:112-80-1) Alimentario	CT (CAS:57885) Alimentario	DBZA (CAS:105-76-0) Lubricantes y grasas	TTM (CAS:3319-31-1) Plastificantes
UVF (CAS:25973-55-1) Plastificantes			

Se debe considerar que el programa presentó como limitación que los compuestos que presenten un Log Kow mayor o igual a 7, podrían estar subestimando la masa de material en el sedimento y sobreestimando la masa en el material en la columna de agua.

Los compuestos con un mayor reparto en los sedimentos principalmente son moléculas grandes y altamente ramificadas. Entre las estructuras se encuentran alcanos, hidrocarburos ramificados y saturados, por lo cual presentan enlaces sencillos con baja polaridad en las moléculas, enlaces covalentes no polares y con una baja reactividad química. Estas propiedades físicas de baja polaridad determinan su baja solubilidad en el agua de la misma forma que un coeficiente de reparto octanol-agua (Kow) alto, teniendo una mayor afinidad por las fases orgánicas. Los alcanos ramificados se degradan más lentamente en el ambiente debido a estas propiedades, por consecuencia pueden llegar a persistir en el medioambiente (Bailey y col., 1973a). Por esta razón los sedimentos son un reservorio esperado para estos compuestos.

Otra estructura que se encuentra con un mayor reparto en el sedimento es un siloxano cíclico, el cual este tipo de compuestos poseen átomos de silicio, oxígeno, hidrógeno y carbono en sus moléculas, pudiendo dar lugar a compuestos de alto peso molecular. En estos compuestos su grupo funcional es el organosilicio, grupo que consiste en una columna vertebral de unidades alternas de silicio-oxígeno (SiO) con un lado de metilo unido a cada átomo de silicio. El enlace de Si-O es muy fuerte, por lo cual son compuestos muy resistentes a los rayos UV, calor, electricidad y degradaciones (Hong y col., 2014). Producto de sus estructuras moleculares cicladas y sus enlaces Si-O es que presentan repelencia al agua, (Gilman y col., 1952), al igual que altos valores de coeficiente de reparto octanol-agua (Kow). En consecuencia, el conjunto de propiedades fisicoquímicas, tales como tener una

estructura ciclada, alto peso molecular y propiedades hidrofóbicas, permiten que este tipo de compuestos tengan una afinidad por los reservorios como los sedimentos. Existen estudios donde los siloxanos ciclados han sido encontrados en diferentes entornos con sedimentos y sugieren que las áreas urbanas son la principal fuente de siloxanos en los sedimentos marinos. (Hong y col., 2014).

Otro compuesto con un mayor reparto hacia los sedimentos es un ftalato o éster de anhídrido ftálico (DBP), en donde sus grupos funcionales le dan capacidad de interactuar mediante puentes de hidrógeno como aceptor, sin embargo, para este caso, el ftalato presenta además cadenas laterales largas brindándole un mayor peso molecular. Las propiedades de los ftalatos principalmente varían con el largo de sus cadenas, en este caso, al ser de cadenas laterales largas, la solubilidad en el agua es bastante baja considerándose como hidrofóbicos. De igual forma, el coeficiente de partición octanol-agua ( $K_{ow}$ ) aumenta, de modo que tienden a tener una mayor afinidad con las fases orgánicas y sedimentos (Domínguez y col., 2014).

Un esteroide (CT) es otro de los compuestos con afinidad hacia los sedimentos. Es un lípido policíclico, el cual presenta un alto peso molecular debido a su gran cantidad de carbonos. Para este compuesto se puede distinguir en su estructura una cabeza polar constituida por el grupo hidroxilo y una cola o porción apolar formada por los ciclos de carbono o núcleos condensados y los sustituyentes alifáticos. Esta estructura altamente ciclada es resistente a la biodegradación, por lo tanto, persistente, tendiendo a perdurar en el ambiente durante largos periodos (Rubinstein y col., 1977). Producto de su gran cantidad de componentes apolares es una molécula muy hidrófoba, al igual que todos los lípidos, por lo que se mantienen los altos valores de coeficiente de reparto octanol-agua, con alta afinidades a las fases orgánicas.

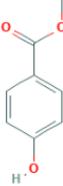
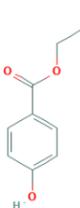
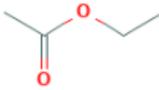
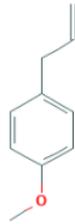
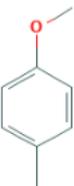
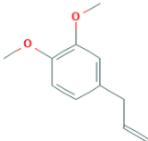
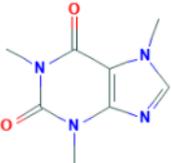
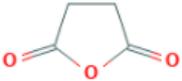
Otro compuesto con afinidad al compartimiento de sedimentos lo compone en su estructura un ácido carboxílico y una cadena carbonada extensa con insaturaciones. A pesar de presentar un ácido carboxílico, el cual es grupo funcional polar que permite la interacción con otras moléculas mediante puentes de hidrógeno, existe una amplia cadena carbonada apolar e insaturada que limita al ácido, convirtiéndolo en una molécula apolar e insoluble al agua, con altos valores de coeficiente de reparto octanol-agua ( $K_{ow}$ ), tendiendo su afinidad a fases orgánicas como los sedimentos.

Se encontraron otros compuestos que comparten en sus estructuras el grupo funcional éster, también cadenas carbonadas largas, en donde este grupo funcional para interactuar con otras moléculas puede participar en los enlaces de hidrógeno como aceptadores, pero no pueden participar como donadores en este tipo de enlaces. Esta capacidad de participar en los enlaces de hidrógeno les convierte en compuestos un poco más solubles que otros grupos funcionales, sin embargo, las limitaciones de sus enlaces de hidrógeno los hace tender más a la hidrofobicidad y aún más cuando sus radicales son cadenas carbonadas extensas. Este es el caso de los compuestos que se presentan con una alta afinidad hacia los sedimentos, a pesar de tener grupos funcionales éster en sus estructuras que pueden llegar a interactuar con otras moléculas, sus largas cadenas carbonadas conllevan a un alto peso molecular, baja solubilidad y alto coeficiente de reparto octanol-agua ( $K_{ow}$ ) determinando preferentemente su reparto hacia los sedimentos. Por último, se encuentra un compuesto que presenta grupos funcionales como triazol y alcohol (UVF), estos grupos funcionales permiten que este compuesto sea aceptor y dador de puentes de hidrógeno, interactuando con otras moléculas polares, sin embargo, el resto de su estructura está ligada a un ciclo insaturado, benceno y ramificaciones, por lo cual impiden que este compuesto tenga polaridad. Al igual que el resto de los

compuestos, es de baja solubilidad, hidrofóbico y con un alto valor de Log Kow y Koc, por consecuencia, con tendencia al reservorio de sedimentos.

### 3.4.3 Compuestos con mayoritariamente reparto en el suelo

**Tabla 12.** Compuestos alimentarios con su reparto mayoritariamente en el suelo.

				
PG (CAS:57556)	MBP (CAS:99-76-3)	PPB (CAS:94-13-3)	ETAC (CAS:141-78-6)	ETG (CAS:140-670)
				
MPC (CAS:104938)	ME (CAS:93-15-2)	CF (CAS:58082)	SA (CAS:108305)	

Los compuestos que se encontraron en el grupo de usos alimentarios son variados y se debe considerar que, a pesar de tener un reparto principal en el suelo, los repartos en las aguas no son menores en comparación a otros grupos, de modo que, las aguas también son un reservorio relevante. El primer compuesto que se visualiza en la Tabla 12 contiene en su estructura el grupo funcional alcohol, el cual al aumentar la masa molecular de estos compuestos aumenta también así sus puntos de fusión y ebullición. El grupo hidroxilo le da polaridad a la molécula, lo que permite que sea soluble en agua debido a la similitud del grupo hidroxilo con la molécula de agua y además la posibilidad de formar enlaces de hidrógeno (Wade, 2012). La solubilidad

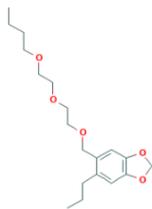
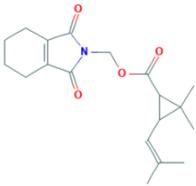
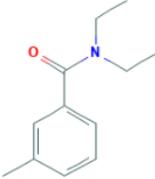
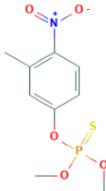
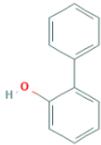
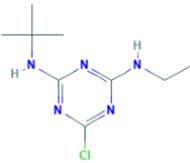
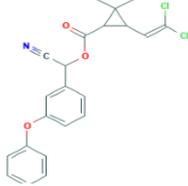
de la molécula depende además del tamaño, para este caso, el compuesto al no ser una molécula de gran peso molecular y con tendencia a la polaridad, presenta valores de  $K_{ow}$  y  $K_{oc}$  bajos. Sin embargo, tiende su reparto al suelo, pero considerando que sus propiedades le dan la posibilidad de migrar rápidamente a las aguas superficiales y subterráneas.

Otros compuestos presentes en el grupo de alimentarios son los parabenos (MBP, PPB), los cuales son ésteres de p-ácido hidroxibenzoico por consiguiente, sus grupos funcionales son un alcohol y un éster con diferentes sustituyentes alquilos (Jonkers y col., 2010). Sus propiedades antibacterianas y conservantes de alimentos son directamente proporcionales a la longitud de la cadena del grupo éster, ya que, dan la capacidad de alterar la membrana celular y las proteínas intracelulares, provocando cambios en la actividad enzimática de las células microbianas. (Jewell y col., 2007). Los grupos funcionales ya antes mencionados y los sustituyentes alquilos le atribuyen una solubilidad moderada (Fransway y col., 2019). Los valores de  $K_{ow}$  y  $K_{oc}$  son bajos, por ende, al encontrarse principalmente en compartimiento de suelos, puedan migrar a otros reservorios, lo que coincide con otros estudios donde existe evidencia de que se han detectado parabenos en varias matrices ambientales, incluido el polvo interior y aguas superficiales (Wei y col., 2021).

Los éteres son otro grupo funcional que se encuentra entre este grupo, principalmente se encuentran como base del anisol (ETG; MPC), su estructura corresponde a un componente aromático y una cadena de metilo, de modo que, se trata de compuestos relativamente volátiles y de fuerzas de cohesión no muy altas. Las estructuras presentan un momento dipolar producto del átomo de oxígeno, el cual atrae las densidades electrónicas tanto del anillo aromático como del metilo. Gracias a ello, las moléculas de anisol pueden interactuar mediante fuerzas dipolo-dipolo (las posibilidades de interactuar con puentes de hidrógeno son bajas debido a

que solamente el oxígeno podría ser aceptor). Por consiguiente, la solubilidad de estos compuestos es moderada en el agua, no obstante, sus valores de Kow son relativamente bajos, siendo considerados como hidrofílicos, por lo cual no se espera una alta afinidad por las fases orgánicas. Según los valores de Log Koc se encontraron clasificados de adsorción moderada, de modo que, la migración a aguas subterráneas podría ocurrir, pero gradualmente. Por último, se encuentra un compuesto con grupos funcionales de amidas y aminas, estos grupos son polares, le dan polaridad a la molécula y posibilidades de interacciones dipolo-dipolo mediante puentes de hidrógeno, de modo que, son solubles en al agua, muy hidrofílicos y su bioacumulación es muy poco probable. La adsorción en suelos es débil, por consiguiente, se espera que puedan migrar a aguas subterráneas.

**Tabla 13.** Compuestos Biocidas con un mayor reparto en el suelo.

			
PBO (CAS:51-03-6)	TM (CAS:7696-12-0)	DEET (CAS:134-62-3)	FNT (CAS:122-14-5)
			
o-HBP (CAS:95-47-6)	TA (CAS:5915-41-3)	CMT (CAS:52315-07-8)	

Los grupos funcionales o estructuras identificadas en los biocidas son: metilendioxi, éteres, ftalimidas, benzoamidas, organotiofosfatos, nitros, alcoholes, aminas, organoclorados y nitrilos; es decir, sus estructuras varían ampliamente. Estos grupos

funcionales son bastante reactivos, permitiendo afectar a los componentes celulares como proteínas, ADN, ARN y componentes de la pared celular a través de interacciones fisicoquímicas o reacciones químicas (McDonnell y col., 1999). Según la composición del biocida, este tendrá un efecto y características diferentes frente al organismo patógeno y según las propiedades que tenga este para evadirla, por consiguiente, se clasifican como oxidantes y no oxidantes. Los oxidantes son aquellos que interfieren en la síntesis proteica de las células, actuando únicamente sobre la superficie de la biopelícula y manteniendo el interior microbiológicamente activo, en donde estos a su vez, oxidan todo tipo de materia orgánica, provocando la muerte de los microorganismos. Por otro lado, los de tipo no oxidante, generan una acción de envenenamiento lento de las células, alterando el metabolismo de alguna forma y penetrando en estas para finalmente alterar el DNA, el RNA o los sistemas de defensa celulares (Diéguez, 2006).

La mayoría de estas moléculas se encontraron en fase vapor y partículas debido a su estructura. Por otro lado, los grupos funcionales que presentan estas moléculas les brindan polaridad, algunos de estos grupos se encuentran ramificados impidiendo la formación de puentes de hidrógeno, por ende, solamente podrían ser aceptores, no obstante, existen otros que sí pueden estar interactuando directamente como dadores de puentes de hidrógeno facilitando la solubilidad en agua. La mayoría se encuentra como moderadamente soluble tendiendo a la hidrofobicidad, de modo que sus valores de  $K_{ow}$  relativamente mayores podrían esperar la bioacumulación en organismos, del mismo modo con los valores de  $K_{oc}$ , donde son clasificados como de adsorción moderada al suelo. En consecuencia, no se encontrarían tan fácilmente biodisponibles para la biodegradación y permanecerían en estos medios.

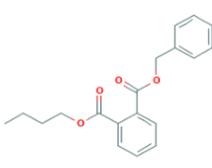
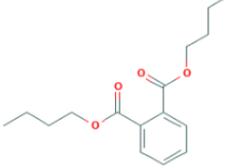
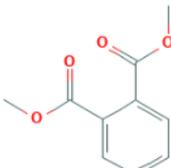
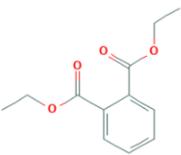
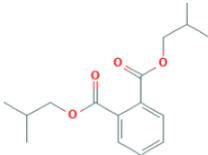
**Tabla 14.** Compuestos Cosméticos con un mayor reparto en el suelo.

TCN (CAS:338034-5)	PPG (CAS:25322-69-4)	BNOH (CAS:100-51-6)	COU (CAS:91-64-5)	1-NP (CAS:90-15-3)
LA (CAS:80546)	PRL (CAS:120-57-0)	MEEAO (CAS:5466-77-3)	BMZ (CAS:3896115)	Dometrizol (CAS:2440-22-4)
IMPA (CAS:103-95-7)	MK (CAS:81-14-1)	EAB (CAS:544475-7)	BA (CAS:140-11-4)	MBOT (CAS:838-88-0)

Los grupos funcionales que se presentan en el grupo de usos cosméticos son muy variables, entre ellos están: alcoholes, aldehídos, cetonas, organoclorados, éteres, ésteres, triazoles, nitro, aminas y aromáticos; por consiguiente, se tiene un amplio rango de propiedades fisicoquímicas. Los halogenuros de alquilo, alcoholes, éteres y aminas tienen un átomo de carbono unido con un enlace sencillo a un átomo electronegativo. En todos los casos, los enlaces son polares y el átomo de carbono tiene carga positiva parcial, mientras que el átomo electronegativo tiene una carga negativa parcial. Los dobles enlaces carbono-oxígeno se encuentran en ésteres,

aldehídos y cetonas; los cuales se comportan en forma parecida en muchos aspectos, pero difieren dependiendo de la identidad de los átomos enlazados con el carbono del grupo carbonilo (C=O). Todos estos grupos tienen fuerzas de London, dipolo-dipolo y algunos con la posibilidad de puentes de hidrógeno, determinando la solubilidad de estos en el agua. A comparación de los otros grupos, los cosméticos presentan de igual forma repartos importantes en las aguas y se debe a la gran variedad de grupos funcionales que brindan una mayor capacidad de interacciones.

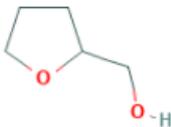
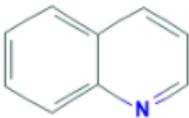
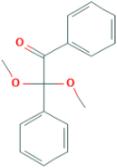
**Tabla 15.** Compuestos Plastificantes con un mayor reparto en el suelo.

			
BC (CAS:100-44-7)	BBPth (CAS:85-68-7)	DPBth (CAS:84-74-2)	DMPth (CAS:131-11-3)
			
DEPth (CAS:84-66-2)	DIBP (CAS:84-69-5)	4-t-O (CAS:140-66-9)	

Los plastificantes presentan principalmente en su estructura ftalatos (BBPth, DPBth, DMPth, DEPth, DIBP), los cuales presentan como grupos funcionales a ésteres ligados a un aromático. Los oxígenos son los únicos que brindan polaridad a la molécula y que contribuyen con la solubilidad en el agua, siendo considerada para este tipo de compuestos generalmente como moderada. No obstante, a medida que las cadenas alquilo aumentan, la solubilidad disminuye de forma importante. Existe evidencia de que las propiedades se ven afectadas respecto a la longitud de la

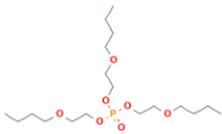
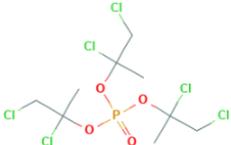
cadena de alquilo; si esta cadena aumenta, los valores de Kow y Koc también, no así para las presiones de vapor, las cuales disminuyen (Staples y col., 1997). Debido a aquello, los repartos principales de los ftalatos son el suelo y agua, considerando que los ftalatos con cadenas alquilo más largas tienden a un mayor reparto en los suelos y que sus valores de adsorción al suelo/sedimento son clasificadas como fuertes, con insignificante a lenta migración a las aguas subterráneas.

**Tabla 16.** Compuestos Pinturas/Tinturas/Resinas con un mayor reparto en el suelo.

		
THFM (CAS:97-99-4)	QNL (CAS:91225)	DDE (CAS:24650-42-8)

Este grupo se encuentra con grupos funcionales como furano, alcoholes, éteres y una piridina. Debido a sus características estructurales se encuentran principalmente en fase vapor y tienen una solubilidad mayor a otros usos. Sus grupos funcionales permiten que puedan interactuar con las moléculas polares del agua, como dadores o aceptores de puentes de hidrógeno, por ende, sus valores de Kow son bajos, generando una preocupación mínima por las fases orgánicas de organismos.

**Tabla 17.** Compuestos Retardante de llamas con un mayor reparto en el suelo.

	
TOBEP (CAS:78-51-3)	TDIF (CAS:13674878)

Los retardantes de llamas son ésteres organofosforados (OPE). Para este caso pueden encontrarse no halogenados y halogenados (TOPEP, TDIF). Son un grupo

de productos químicos que se han utilizado durante décadas como retardadores de llama en diversos productos de consumo (Van der Veen y col., 2012). Cuando se utilizan como retardantes son aditivos, lo que significa que no están unidos químicamente a sus productos. En caso de incendio, los materiales sólidos se descomponen en gases inflamables que se encienden. Se descomponen a través del calor de dos formas. Los OPE no halogenados reaccionan principalmente en la fase sólida de los materiales en combustión. Los compuestos de fósforo, cuando se calientan, reaccionan para formar una forma polimérica de ácido fosforoso, en donde este ácido produce una capa de carbón que protege el material en llamas del oxígeno y, por lo tanto, ralentiza la reacción (Van der Veen y col., 2012). Los OPE halogenados también causarán una capa de carbón en los materiales en llamas, se descomponen para reaccionar en la fase gaseosa. Los átomos de cloro reaccionan con hidrógeno (H) e hidróxido (OH) radicales para ralentizar aún más el proceso de combustión, reduciendo la propagación del fuego. Además, se debe considerar que la efectividad del OPE aumenta al aumentar el número de átomos de halógeno en la molécula (Kim y col., 2019). Debido a la naturaleza variable de los sustituyentes, los ésteres organofosforados tienen una amplia gama de propiedades físicas y químicas, que van desde muy polares a muy hidrófobos. Sin embargo, los más utilizados tienen valores de Log Kow entre 1 y 5, lo que indica que son más lipofílicos que hidrofílicos. (Van der Veen y col., 2012). Para este caso los compuestos son clasificados como hidrofóbicos y pueden bioacumularse en los organismos. Sus valores de Log Koc son relativamente altos por lo que tienen a adherirse a partículas como el suelo.

**Tabla 18.** Compuestos Productos de combustión con un mayor reparto en el suelo.

The chemical structure of MF (fluorene) is a polycyclic aromatic hydrocarbon consisting of a benzene ring fused to a five-membered ring, which is in turn fused to another benzene ring.	The chemical structure of ACY (acenaphthylene) is a polycyclic aromatic hydrocarbon consisting of a benzene ring fused to a five-membered ring, which is fused to another benzene ring, with a double bond in the five-membered ring.	The chemical structure of PY (pyrene) is a polycyclic aromatic hydrocarbon consisting of four fused benzene rings in a zig-zag arrangement.
MF (CAS:832-699)	ACY (CAS:208-96-8)	PY (CAS:129-00-0)

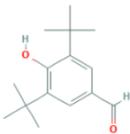
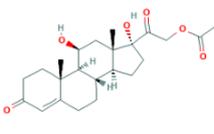
Los productos de combustión son generalmente hidrocarburos aromáticos policíclicos que contienen dos o más anillos de benceno unidos entre sí, formando estructuras polinucleares del tipo aromático (Betancourt y col., 2015). Sus características fisicoquímicas son muy diversas, ya que dependen de la cantidad de anillos que contengan o sus ramificaciones. En su mayoría se presentan en fase vapor y partículas, por lo que se pueden encontrar semivolátiles. Al ser compuestos apolares son insignificamente solubles en el agua, en consecuencia, se limita la propagación por este medio. En esa misma línea, son considerados hidrofóbicos o lipofílicos, es decir que tienden a la afinidad por moléculas orgánicas. Se considera que desde cuatro anillos la solubilidad y volatilidad son muy bajas y se encuentran principalmente en fase de partículas, las que se adhieren al suelo o sedimentos (Choi y col., 2010); presentando valores de Kow altos, pudiendo llegar a ser bioacumulados en organismos. De igual forma, presentan valores de Koc altos tendiendo a la adsorción muy fuerte al suelo/sedimento y con posibilidades de migración insignificante a las aguas subterráneas.

**Tabla 19.** Compuestos Lubricantes y grasas con un mayor reparto en el suelo.

The chemical structure of 2,6-DTBP (2,6-di-tert-butylphenol) shows a central benzene ring with two tert-butyl groups attached at the 2 and 6 positions and a hydroxyl group (-OH) at the 1 position.	The chemical structure of TDO (tridecylol) is a long-chain alkyl alcohol with a hydroxyl group at one end and a methyl group at the other.
2,6-DTBP (CAS:128-39-2)	TDO (CAS:7320-37-8)

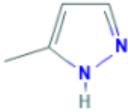
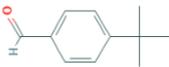
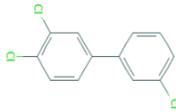
El grupo de lubricantes y grasas presentan grupos funcionales como fenol y éter que le brindan polaridad a la molécula. No obstante, las moléculas están altamente ramificadas, de modo que generan un efecto hidrofóbico más importante, tendiendo a insignificantes o ligeras solubilidades, por ende, no se facilitaría el reparto en el agua. Del mismo modo, los valores de Log Kow son bastante altos, confirmando la tendencia apolar de las moléculas, pudiendo llegar a bioacumularse en organismos en sus membranas lipídicas. Por otro lado, los valores de Log Koc son clasificadas como de fuerte adsorción al suelo/sedimento y con insignificante a lenta migración al agua subterránea.

**Tabla 20.** Compuestos Farmacéuticos con un mayor reparto en el suelo.

	
<p>BHT-OCH (CAS:1620-98-0)</p>	<p>H21 (CAS:50-03-3)</p>

Los fármacos presentan diversos grupos funcionales y estructuras tales como alcoholes, cetonas, aldehídos y ésteres. Ambas moléculas están unidas a compuestos cíclicos de gran peso molecular, por lo que son consideradas como en fase vapor y partículas. Sus grupos funcionales le permiten ser aceptores o dadores de puentes de hidrógeno, de modo que, tienen una ligera solubilidad. Sus valores de Log Kow son clasificados como hidrofílicos, por lo cual no tenderían a bioacumularían en las fases orgánicas de organismos. Por otro lado, los valores de Log Koc son clasificados como de baja adsorción al suelo/sedimento, pudiendo existir migración a las aguas subterráneas.

**Tabla 21.** Compuestos con usos desconocidos con un mayor reparto en el suelo.

			
MHP (CAS:1453-58-3)	BZA (CAS:939 97 9)	PCB-10 (CAS:33146-45-1)	PCB-35 (CAS:37680-69-6)

Los compuestos con usos desconocidos tienen diversos grupos funcionales debido a que no tienen un uso en común conocido. Las aminas y aldehídos son compuestos que le dan polaridad con posibilidad de puentes de hidrógeno, distribuyéndose su reparto en el suelo y agua. En cambio, los halogenuros de alquilo generan momentos dipolares parciales, sin posibilidades de interactuar con moléculas de agua mediante puentes de hidrógeno, por lo cual los compuestos aromáticos halogenados son, en general, insolubles en agua y tienden a tener un reparto al suelo.

### 3.5. Compuestos destacados

La Tabla 22 muestra los compuestos que destacaron por sus propiedades con altos valores de Log Kow y Koc, repartos mayoritarios en suelos/sedimentos y persistencia superior a 3 meses en el modelo.

**Tabla 22.** Compuestos que destacaron sus resultados.

Abreviación	CAS	Compuesto	Uso
TDIF	13674878	Tris(1,3-dicloroisopropil) fosfato	Retardante de llama.
CMT	52315-07-8	Cipermetrina	Biocida.
UVF	25973-55-1	2-(2H-benzotrizol-2-il)-4,6-bis(1,1-dimetilpropil)-fenol	Plastificante.
HMN	4390049	2,2,4,4,6,8,8-heptametil-nonano	Cosmético
BMZ	3896115	Bumetrizol	Cosmético.
DBP	84-74-2	Di-isooctil ftalato	Plastificante.
MBOT	838-88-0	4,4'-metilenebis[2-metilbencenamina]	Cosmético.
TCN	3380-34-5	Triclosán	Cosmético.

El tris(1,3-dicloroisopropil) fosfato (TDIF, CAS: 13674878) es un compuesto aditivo retardante de llama, lo que significa que no está unido químicamente a los materiales tratados. Se cree que los retardantes de llama aditivos tienen más probabilidades de liberarse al medio ambiente durante la vida útil del producto que los retardantes de llama reactivos o químicamente unidos. Según la GHS es un compuesto sospechoso de causar cáncer, debido a que se encuentra evidencia de toxicidad en animales solamente. Por otro lado, existen estudios donde se ha encontrado este compuesto en el polvo doméstico en EE. UU, pudiendo ser inhalado e ingerido constantemente (Stapleton, 2011). Según el modelo es el compuesto evaluado con mayores valores de persistencia, alrededor de 11 meses, llegando a ser considerado como recalcitrante. Otro compuesto es la Cipermetrina (CMT, CAS: 52315-07-8) según la

FIFRA es un insecticida clasificado igualmente de clase B, de alta preocupación. De igual forma la GHS lo clasifica como que podría causar daños a los órganos por exposición prolongada o repetitiva. La Comisión Europea (CE) indica que el valor de la Arfd, el cual representa la cantidad máxima de pesticida que puede ser ingerida por el consumidor sin riesgo para su salud es de 0,00125 mg/kg de peso corporal (CE., s.f.). Este insecticida es un piretroide que actúa mediante la modulación de los canales de sodio de los axones nerviosos, provocando neurotoxicidad en insectos y mamíferos. Los productos que contienen Cipermetrina son insecticidas y se aplica en interiores para controlar hormigas, cucarachas, pulgas y otros insectos. Según los resultados obtenidos genera preocupación, ya que, este compuesto además podría perdurar alrededor de 10 meses. El 2-(2H-benzotriazol-2-il)-4,6-bis(1,1-dimetilpropil)-fenol (UVF., CAS: 25973-55-1) es un estabilizador de la luz UV, resistente y utilizado en plastificantes. Según la GHS puede causar daños ambientales y también a las personas ante exposición prolongada, sin embargo, no existen evidencia de toxicidad comprobada para humanos, esta clasificación es debido a que, si existe evidencia de toxicidad en animales estudiados, ya sea, ratas y perros (GHS., s.f). Se debe destacar que en el modelo este compuesto podría perdurar 8 meses. El compuesto 2,2,4,4,6,8,8-heptametil-nonano (HMN, CAS: 4390049) es una fragancia utilizada en componentes de cuidado personal, clasificado por la GHS como que podría llegar a causar cáncer, ya que no existe evidencia de datos en humanos, sin embargo, si existen estudios en ratas, los que indican el peligro de exposición. (ECHA., s.f.a). Entre los resultados que destacaron de este compuesto fueron los altos valores de Log Kow y Koc, además de una persistencia de 5 meses. El compuesto Bumetrizol (BMZ, CAS: 3896115) es un absorbente de luz UV y resistente, de modo que, es utilizado ampliamente en diferentes productos, sin embargo, en este estudio es considerado como cosmético, debido a los criterios mencionados en metodología, encontrándose principalmente en protectores solares. Según la GHS puede causar

daño ambiental y a largo plazo en las personas, esto debido a que solamente existe evidencia para la vida acuática, sin embargo, no existe evidencia clara en las personas (ECHA., s.f.b). Estos resultados mostraron que este compuesto puede llegar a persistir 5 meses en el modelo. Por otro lado, el Di-isooctil ftalato (DBP, CAS\_84-74-2) es un compuesto utilizado ampliamente como plastificante. Según GHS puede afectar al ambiente, en el cual, si presenta evidencia en el medio acuático (ECHA., s.f.c), también es clasificado como que puede causar daño en las personas, en específico a la fertilidad y fetos, sin embargo, la evidencia existente es en animales, por lo que se les atribuye peligro a las personas de esta forma (ECHA., s.f.c). Entre los resultados que destacaron esta que, a comparación de otros ftalatos, presenta amplias cadenas ramificadas, las cuales le brindan altos valores de Log Kow y Koc (Staples y col., 1997). Sus resultados dan una persistencia en el modelo de aproximadamente 4 meses. El 4,4'-metilenebis[2-metilbencenamina] (MBOT, CAS: 838-88-0) es un compuesto utilizado en cosméticos como los tintes de cabello, según la GHS puede afectar al medio ambiente con evidencia en medios acuosos, sin embargo, es clasificado como que podría causar cáncer a las personas en base a experimentación con animales (Eur- Lex., s.f.a), también así, la IARC lo considera como una sustancia que podría causar cáncer (OMS., 2021). Según los resultados obtenidos, este compuesto puede llegar a perdurar 4 meses. Por último, el Triclosán (TCN, CAS: 3380-34-5) es un antimicrobiano según la FIFRA de clase B, por lo tanto, clasificado como de alta preocupación ante la exposición en las personas, además de la GHS clasificarlo como que podría causar daño ambiental, con evidencia para medios acuosos y posiblemente a las personas con estudios en animales (Eur-lex., s.f.b). Es utilizado hace más de 20 años en productos cosméticos para el cuidado personal, incluidos desodorantes para las axilas, jabones dermatológicos y preparaciones tópicas para la protección de la piel. Según los resultados obtenidos, este compuesto orgánico podría persistir en el ambiente más de 3 meses.

### 3.6. Proyecciones a futuro

Aproximadamente el 83% de los compuestos presentaron una mayoritaria distribución por el suelo, lo que es interpretado en el entorno real como la forma en que estos compuestos podrían llegar a bioacumularse en partículas sólidas como el polvo intradomiciliario. El polvo ha demostrado ser en los últimos años una matriz idónea para la medida de la contaminación, dado que sus características fisicoquímicas facilitan la disolución y absorción de las moléculas de los contaminantes sobre la superficie de las partículas que lo componen. Su alto contenido en materia orgánica hace que los efectos de sensibilización que produce asma o alergia se le sumen los efectos tóxicos que los compuestos orgánicos adheridos a él inducen en la salud humana al entrar en contacto con el organismo (Gómez, 2019). Se debe destacar que las personas en los países desarrollados gastan más del 90% de su tiempo en ambientes interiores, ya sea, domicilios, oficinas, trabajos, entre otros. (Klepeis., 2001), por lo cual, la exposición al polvo intradomiciliario es constante en la vida diaria. Es por ello que genera preocupación, ya que, no solamente los adultos se pueden ver afectados, los niños pequeños son particularmente vulnerables a las exposiciones químicas del polvo ya que gatean, juegan en el suelo y con frecuencia se llevan las manos a la boca (EPA, 2002). Es por esto que, la exposición a compuestos puede ser por diferentes vías, tanto en la fase gaseosa como en las partículas en suspensión y el polvo asentado, por ende, si se quiere analizar la presencia de estos compuestos orgánicos, su acumulación y posibles efectos como parte de estudios relacionados al exposoma químico urbano, se sugiere investigar el polvo intradomiciliario como un reservorio importante. Las personas podrían estar inhalando e ingiriendo constantemente el polvo que se encuentre adherido a estos compuestos orgánicos y según sus propiedades lograr afectar en el tiempo. Los compuestos que destacaron por sus distribuciones, persistencias y propiedades se encuentran en la Tabla 22.

En el caso de querer ampliar la investigación de estos compuestos producto de los resultados obtenidos en las pulseras de silicona y el modelo de EPI-Suite, como se mencionó anteriormente, se debe apuntar al polvo de interiores, ya sea, domicilios, trabajos o recintos cerrados. Se puede utilizar un método activo como las bombas eléctricas, ya que proporciona mediciones más confiables para momentos determinados. En el caso de solamente querer estudiar la presencia de estos compuestos en el polvo, se sugieren métodos pasivos, a causa de que, esta técnica actúa durante largos periodos de tiempo para proporcionar concentraciones medias de los compuestos.

#### IV. CONCLUSIONES

El estudio realizado dio cuenta de que las pulseras de silicona utilizadas en el proyecto FONDECYT 11180151 capturaron una alta variabilidad de compuestos con coeficientes de reparto de Log Kow desde -0,9 a 8,9; de Log Koc desde 0 a 7,6; de Log Kaw desde -11,8 a 3 y Log Koa desde 0,09 a 17,8. Esto significa que las pulseras están capturando compuestos con un rango bastante amplio de propiedades, lo que favorece al estudiar el exposoma, ya que se lograría obtener un extenso rango de posibles exposiciones. Los compuestos según sus propiedades fisicoquímicas, en su mayoría son considerados semi volátiles y de baja polaridad producto de sus estructuras químicas.

Según estos compuestos y la actualización de la clasificación realizada, los usos con más compuestos prioritarios (por su toxicidad) son los Cosméticos, Alimentarios y Plastificantes, con 19, 11 y 11 respectivamente; por lo cual la pulsera de silicona cumplió su función de capturar compuestos que se encuentran relacionados directamente con el espacio personal de las personas y contribuyen a la descripción del exposoma químico urbano, se debe destacar que a pesar de que los compuestos se encontraron en un mismo grupo de usos, no presentaban estructuras similares en todos los casos. Por otro lado, entre las propiedades fisicoquímicas que destacaron entre todos los compuestos, fueron los valores más altos de Log Kow y Log Koc para los Retardante de llamas, Productos de combustión, Plastificantes, Lubricantes y grasas de modo que, además de adherirse con facilidad a partículas sólidas, tienen la posibilidad de bioacumularse en los organismos, por lo que generaron preocupación sus posibles efectos en el tiempo.

Según los resultados de persistencia en el modelo, los grupos que permanecieron más tiempo en el modelo son retardantes de llama, biocidas y farmacéuticos; de modo que podrían estar afectando el entorno de las personas, tal cual como se indica en diferentes estudios como posibles contaminantes emergentes.

Los altos repartos hacia el suelo fueron los que destacaron para esta investigación y según el contexto del estudio en donde se investigó el exposoma en diferentes zonas urbanas, se puede extrapolar a que el suelo puede representar al polvo de interiores como destino final de los compuestos y que las personas se encuentren expuestas constantemente.

Entre las limitaciones de este estudio se encontró que no son considerados los posibles efectos sinérgicos, todas las modelaciones son realizadas individualmente, por consiguiente, las interacciones de compuestos entre sí no cuentan en el entorno. Por último, el entorno es evaluativo, por lo que no se pudo evaluar las variables de las distintas ciudades en que fueron encontrados estos compuestos, de modo que, al ser un entorno estándar no representa la totalidad de la realidad de diferentes lugares, ya que son diversos factores que podrían influir y que no siempre pueden ser controlados. Sin embargo, a pesar de la simplificación del modelo, si se permitió tener una aproximación o idea de donde podrían venir los resultados de las pulseras de silicona y además donde podrían ser encontrados en un futuro los compuestos en reservorios interpretativos a la realidad.

## V. REFERENCIAS

Acceso a la legislación de la Unión Europea. Eur-lex: 4,4'-metilenebis[2-metilbencenamina]. s.f.a. Disponible en <https://eur-lex.europa.eu/eli/reg/2008/1272/2020-01-01>

Acceso a la legislación de la Unión Europea. Eur-Lex: Triclosán. s.f.b. Disponible en: <https://eur-lex.europa.eu/eli/reg/2008/1272/2020-01-01>.

Agencia de Protección Ambiental, EPA. 2012. Cálculos cuantitativos de evaluación de riesgos. Futuros sostenibles / Manual marco P2 2012 EPA-748-B12-001 13. Cálculos de evaluación cuantitativa de riesgos., 1-11 (24), 13056–13066.

Agencia de Protección Ambiental de Estados Unidos. EPA: 2,2,4,4,6,8,8-heptametilnonano. (2021). <https://comptox.epa.gov/dashboard/dsstoxdb/results?search=DTXSID7052101#toxicity-values>

Aronson, D., Boethling, R.S., Howard, P. and Stiteler, W. 2006. Estimating biodegradation half-lives for use in chemical screening. *Chemosphere* 63:1953-1960.

Atkinson, R. 1985. Kinetics and mechanisms of the gas-phase reactions of the hydroxyl radical with organic compounds under atmospheric conditions. *Chemosphere. Rev.* 85: 69-201.

Atkinson, R. and Carter, W.P.L. 1984. Kinetics and mechanisms of the gas-phase reactions of ozone with organic compounds under atmospheric conditions. *Chem. Rev.* 84: 437-470.

Base de datos de productos químicos y productos. CPDat. 2021. Disponible en <https://www.epa.gov/chemical-research/chemical-and-products-database-cpdat>

Bahnick, D.A. and W.J. Doucette. 1988. Use of molecular connectivity indices to estimate soil sorption coefficients for organic chemicals. *Chemosphere* 17:1703-1715.

Biblioteca nacional de medicina, centro nacional de información biotecnológica. Pubchem. 2021. Disponible en <https://www.ncbi.nlm.nih.gov/>

Biermann, H.W., MacLeod, H., Atkinson, R., Winer, A.M., and Pitts, Jr. J.N. 1985. Kinetics of the gas-phase reactions of the hydroxyl radical with naphthalene, phenanthrene, and anthracene. *Environ. Sci. Technol.* 19: 244-248.

Bohlin, P., Jones, K.C., Levin, J.O., Lindahl, R., Strandberg, B. 2010. Field evaluation of a passive personal air sampler for screening of PAH exposure in workplaces. *J. Environ. Monit.* 12, 1437–1444.

Chemical Abstracts Service. CAS. 2021. Disponible en <https://www.cas.org/support/documentation/chemical-substances>.

Chirino Betancourt, Y. J., Benzo, Z., & Fernández, R. 2015. Hidrocarburos Aromáticos Policíclicos en Partículas Atmosféricas Sedimentadas: Un estudio comparativo en diversas áreas en la ciudad de Caracas-Venezuela. *Revista de Investigación*, 39(84), 157-180.

Choi, H., Harrison, R., Komulainen, H. y Saborit, JMD. 2010. Hidrocarburos aromáticos policíclicos. Organización Mundial de la Salud, ed. Directrices de la OMS para la calidad del aire en interiores: contaminantes seleccionados. Estantería NCBI. Ginebra: Organización Mundial de la Salud.

Comisión Europea. Cipermetrina. s.f. Disponible en [https://ec.europa.eu/food/plant/pesticides/eu-pesticides-database/active-substances/?event=as.details&as\\_id=325](https://ec.europa.eu/food/plant/pesticides/eu-pesticides-database/active-substances/?event=as.details&as_id=325)

Dang, D. N., Carvalho, F. P., Nguyen M. A., Nguyen Q. C., Nguyen T. H. Y., Villeneuve, J. P. and Cattini, C. 2001. Chlorinated Pesticides and PCBs in sediments and molluscs from freshwater canals in the Hanoi region, *Environ.Pollut.* 112, 311-320.

Daughton, C. G. 2005. Emerging Chemicals as Pollutants in the Environment: a 21st Century Perspective. *Renewable Res. J. Winter*, 6-23.

Derek C. G. Muir. Philip H. Howard. 2006. Are There Other Persistent Organic Pollutants? A Challenge for Environmental Chemists. *Environ. Sci. Technol.* 40, 7157-7166.

Díaz, F. A., Masa, V. L. M., García, J. A. G., & Corchero, M. J. N. 2020. Concentraciones de ozono troposférico en Extremadura durante la ola de calor del 2003. *Acta de las Jornadas Científicas de la Asociación Meteorológica Española*, (28).

Diéguez CC 2006. Biocidas. Eficacia. Criterios para su evaluación y autorización. *Rev salud ambient.*6(1-2): 56-60.

Dodson, R.E., Perovich, L.J., Covaci, A., Van den Eede, N., Ionas, A.C., Dirtu, A.C., Brody, J.G., Rudel, R.A. 2012. After the PBDE phase-out: a broad suite of flame retardants in repeat house dust samples from California. *Environ. Sci. Technol.* 46

Domínguez-Morueco, S. González-Alonso, and Y. Valcárcel. 2014. Phthalate Occurrence in Rivers and Tap Water from Central Spain. *Sci Total Environ*, 500-501, 139-46.

European Chemicals Agency. ECHA: 2,2,4,4,6,8,8-heptametil-nonano. s.f.a Disponible en: <https://echa.europa.eu/information-on-chemicals/cl-inventory-database>.

European Chemicals Agency. ECHA: Bumetrizol. s.f.b. Disponible en: <https://echa.europa.eu/information-on-chemicals/cl-inventory-database/-/discli/notification-details/44804/1496411>

European Chemicals Agency. ECHA: Diisooctil ftalato. s.f.c. Disponible en <https://echa.europa.eu/information-on-chemicals/cl-inventory-database/-/discli/notification-details/34614/688719>

Escher, B. I., Stapleton, H. M., & Schymanski, E. L. (2020). Tracking complex mixtures of chemicals in our changing environment. *Science*, 367(6476), 388-392

Finlayson-Pitts, B; Pitts, J; 1986. *Atmospheric Chemistry: Fundamentals and Experimental Techniques*, Wiley, New York.

Fransway, A.F., Fransway, P.J., Belsito, D.V., Warshaw, E.M., Sasseville, D., Fowler, J.F.J., DeKoven, J.G., Pratt, M.D., Maibach, H.I., Taylor, J.S., Marks, J.G., Mathias, C.G.T., DeLeo, V.A., Zirwas, J.M., Zug, K.A., Atwater, A.R., Silverberg, J., Reeder, M.J., 2019. Parabens. 30, 3–31.

García, N. M. (2015). Degradación de contaminantes emergentes mediante tio2 inmovilizado e irradiación solar (Doctoral dissertation, Universidad de Almería).

García, S.; Pérez, R. M. 2012. [https://inis.iaea.org/collection/NCLCollectionStore/\\_Public/43/028/43028576.pdf](https://inis.iaea.org/collection/NCLCollectionStore/_Public/43/028/43028576.pdf)

Gilman, G.E. Dunn. 1952. Relationships between analogous organic compounds of silicon and carbon. *J. Polym. Sci.*, 9 253-264.

Gil, M. J., Soto, A. M., Usma, J. I., & Gutiérrez, O. D. 2012. Contaminantes emergentes en aguas, efectos y posibles tratamientos. *Producción+ limpia*, 7(2), 52-73.

Gómez, M. V. 2019. Organic pollutants in indoor dust: method development, site-specific monitoring, and human exposure (Doctoral dissertation, Universitat de Barcelona).

Hayward, S. J.; Gouin, T.; Wania, F. 2010. Comparison of Four Active and Passive Sampling Techniques for Pesticides in Air. *Environ. Sci. Technol.* 44 (9), 3410–3416.

Hong, W. J., Jia, H., Liu, C., Zhang, Z., Sun, Y., & Li, Y. F. 2014. Distribution, source, fate and bioaccumulation of methyl siloxanes in marine environment. *Environmental pollution*, 191, 175-181.

Huerta, J. A. 2015. Propuesta para establecer un sistema de vigilancia de contaminantes ambientales en Colombia. *Biomédica*, 35(2), 8-19.

Jewell, C. Prusakiewicz, JJ. Ackermann, C. Payne, N. Fate, G. Voorman, R. 2007. Hidrólisis de una serie de parabenos por microsomas cutáneos yd citosol de humanos y minicercos yen piel entera en cultivo a corto plazo. *Toxicol Appl Pharmacol.* 225: 221

Kim, UJ, Wang, Y., Li, W. y Kannan, K. 2019. Ocurrencia y exposición humana a retardantes de llama / plastificantes organofosforados en el aire interior y polvo de varios microambientes en los Estados Unidos. *Environment International*, 125, 342-349.

Klepeis, N. E.; Nelson, W. C.; Ott, W. R.; Robinson, J. P.; Tsang, A.M.; Switzer, P.; Behar, J. V.; Hern, S. C.; Engelmann, W. H. 2001. The National Human Activity Pattern Survey (NHAPS): a resource for assessing exposure to environmental pollutants. *J. Exposure Anal. Environ. Epidemiol.* 11 (3), 231–252.

Kolpin, D; Schnoebelen, D. y Thurman, E. M. 2004. Degradados dar una idea de las tendencias espaciales y temporales de los herbicidas en el agua subterránea. *Agua Subterránea*. Vol. 42, p. 601-608

Kwok, E.S.C., Atkinson, R. and Arey, J. 1992. Gas-phase atmospheric chemistry of selected thiocarbamates. *Environ. Sci. Technol.* 26: 1798-1807

Kwok, E.S.C. and Atkinson, R. 1995. Estimation of Hydroxyl Radical Reaction Rate Constants for Gas-Phase Organic Compounds Using a Structure-Reactivity Relationship: An Update. *Atmospheric Environment* 29: 1685-95. [adapted from Final Report to CMA Contract No. ARC-8.0-OR, Statewide Air Pollution Research Center, Univ. of CA, Riverside, CA 92521.

Kwok, E.S.C., Aschmann, S.M., and Atkinson, R. 1996. Rate constants for the gas-phase reaction of selected carbamates and lactates. *Environ. Sci. Technol.* 30: 329-34.

Manzano, C., Lagos, F., Miranda, I. (2021). Predicting the environmental fate of urban contaminants found in three cities of Chile using silicon wristbands and EPI-Suite. *Occurrence and Risks of Pollutants in Latin America*. SETAC. Valdivia, Chile.

Lapworth, D. Goody, D. 2006. Source and persistence of pesticides in a semiconfined chalk aquifer of southeast England. *En: Environmental Pollution*. Vol. 144, p. 1031-1044

Lyman, W. J., Reehl, W. F., & Rosenblatt, D. H. 1990. *Handbook of chemical property estimation methods*. Washington, DC: American Chemical Society.

Mackay, D. 1991. *Multimedia Environmental Models: The Fugacity Approach*, pp 67-183. Lewis Publishers/CRC Press: Boca Raton, FL USA.

Mackay, D., Di Guardo, A., Paterson, S., Kicsi, G. y Cowan, CE. 1996. Evaluación del destino de los productos químicos nuevos y existentes: un proceso de cinco etapas. *Toxicología y química ambiental: una revista internacional*, 15 (9), 1618-1626.

Mackay, D., S. Paterson and W.Y. Shiu. 1992. Generic models for evaluating the regional fate of chemicals. *Chemosphere* 24:695–717.

Manzano, Dodder, Hoh, Morales. 2019. Patterns of personal exposure to urban pollutants using personal passive samplers and gcxgc/ToF-MS. *Environmental Science and Technology*.

Miranda, Ignacio; Manzano, Carlos. 2021 “Huellas Digitales de Contaminación en Ciudades de Chile utilizando captadores pasivos personales: explorando parte del Exposoma.”, (tesis en desarrollo), Universidad de Chile.

Ministerio del Medio Ambiente. 2016. MMA: Calidad del Aire. Disponible en <https://mma.gob.cl/wp-content/uploads/2018/08/Guia-para-Docentes-Sobre-Calidad-del-Aire-003.pdf>

Ministerio del Medio Ambiente. 2018. MMA: Guía de calidad del aire y educación ambiental. Disponible en <chrome-extension://efaidnbmnnnibpcajpcglclefindmkaj/viewer.html?pdfurl=https%3A%2F%2Fmma.gob.cl%2Fwp-content%2Fuploads%2F2018%2F08%2FGuia-para-Docentes-Sobre-Calidad-del-Aire-003.pdf&clen=7126708&chunk=true>

Organización Mundial de la Salud. OMS: Monografía de la IARC. 2021. Disponible en: <https://monographs.iarc.who.int/list-of-classifications>

Organización de las Naciones Unidas para la Alimentación y la Agricultura (FAO). FAO: El aumento de la contaminación del suelo amenaza la inocuidad y la seguridad alimentaria. 2018. Disponible en <http://www.fao.org/news/story/es/item/1173632/icode/>

Organization for Economic Cooperation and Development, OECD. 1989. Compendium of environmental exposure assessment methods for chemicals. OECD Environment Monograph 27. Chemicals Group and Management Committee, Hazard Assessment Panel. Paris, France.

Organization for Economic Cooperation and Development, OECD. 1995. Proceedings, OECD workshop on the environmental hazard/ risk assessment. London, UK, May 24–27, 1994.

Pachés Giner, M. A. V. 2020. Contaminantes emergentes. (Tesis) Universidad politécnica de Valencia.

Pontificia Universidad Católica de Chile. 2011. PUC: La contaminación urbana y los factores geográficos. Chile. Disponible en [http://www7.uc.cl/sw\\_educ/contam/efect/efur011.htm](http://www7.uc.cl/sw_educ/contam/efect/efur011.htm)

Prebhalo, S. E., Berrier, K. L., Freye, C. E., Bahaghighat, H. D., Moore, N. R., Pinkerton, D. K., & Synovec, R. E. (2018). Multidimensional gas chromatography: advances in instrumentation, chemometrics, and applications. *Analytical chemistry*, 90(1), 505-532.

Real Academia Española. RAE: Alimentario. 2020. Disponible en <https://dle.rae.es/alimentario>

Real Academia Española. RAE: Cosmético. 2020. Disponible en <https://dle.rae.es/cosm%C3%A9tico>

Rodríguez, S. S. F., & Gomariz, M. V. B. 2003. Riesgo toxicológico medioambiental de compuestos activos utilizados para la desinfección de torres de refrigeración (Vol. 14). Editorial Complutense.

Romero, M., Diego Olite, F., & Álvarez Toste, M. (2006). La contaminación del aire: su repercusión como problema de salud. *Revista cubana de higiene y epidemiología*, 44(2), 0-0.

Rubinstein, I., Strausz, O. P., Spyckerelle, C., Crawford, R. J., & Westlake, D. W. S. 1977. The origin of the oil sand bitumens of Alberta: a chemical and a microbiological simulation study. *Geochimica et Cosmochimica Acta*, 41(9), 1341-1353.

Sabljić, A. 1987. On the prediction of soil sorption coefficients of organic pollutants from molecular structure: application of molecular topology model. *Environ. Sci. Technol.* 21:358-66.

Salvatore, D., & Reagle, D. 2004. *Estadística y econometría*. McGraw Hill.

Seethapathy, S.; Gorecki, T.; Li, X. J. 2008. Passive sampling in environmental analysis. *J. Chromatogr A*. 1184 (1-2), 234-25

Staples, C. A., Peterson, D. R., Parkerton, T. F., & Adams, W. J. 1997. The environmental fate of phthalate esters: a literature review. *Chemosphere*, 35(4), 667-749.

Stapleton HM, Klosterhaus S, Keller A, Ferguson PL, van Bergen S, Cooper E, Webster TF, Blum A. 2011. Identificación de retardantes de llama en espuma de poliuretano extraída de productos para bebés. *Ciencia y tecnología ambientales*. 45(12): 5323-31.

Stephen, E. 2020. Base de datos de referencia estándar NIST 1ª Disponible en <https://www.nist.gov/srd/nist-standard-reference-database-1a>.

Sistema Globalmente Armonizado de Clasificación y Etiquetado de Productos Químicos. GHS: 2-(2H-benzotriazol-2-il)-4,6-bis(1,1-dimetilpropil)-fenol. s.f. Disponible en: <https://www.nite.go.jp/chem/english/ghs/15-mhlw-0058e.html>

Tajima, S., Araki, A., Kawai, T., Tsuboi, T., Bamai, Y.A., Yoshioka, E., Kanazawa, A., Cong, S., Kishi, R., 2014. Detection and intake assessment of organophosphate flame retardants in house dust in Japanese dwellings. *Sci. Total Environ.* 478, 190-199.

United States Environmental Protection Agency. 2002. *Child-Specific Exposure Factors Handbook*; National Center for Environmental Assessment: Washington, DC.

US Geological Survey 2015. US-GS: Toxic Substances Hydrology Programme. Disponible en <http://toxics.usgs.gov/regional/emc/>

Van der Veen, I., de Boer, J., 2012. Phosphorus flame retardants: properties, production, environmental occurrence, toxicity, and analysis. *Chemosphere* 88 (10), 1119-1153.

Wade. L. 2012. *Química Orgánica*. Naucalpan de Juárez, México. Volumen I. Pearson.

Wang, Z.; Walker, G. W.; Muir, D. C. G.; Nagatani-Yoshida, K. Toward. 2020. a Global Understanding of Chemical Pollution: A First Comprehensive Analysis of Regulatory Industrial Chemical Inventories. *Environ. Sci. Technol.* 54 (5), 2575-2584

Wei, F., Mortimer, M., Cheng, H., Sang, N., & Guo, L. H. 2021. Parabens as chemicals of emerging concern in the environment and humans: A review. *Science of The Total Environment*, 146150.

Wild, C. P. 2005. Complementing the genome with an “exposome”: the outstanding challenge of environmental exposure measurement in molecular epidemiology. *Cancer Epidemiology and Prevention Biomarkers*, 14(8), 1847-1850.

Organización Mundial de la Salud. OMS: Calidad del aire y salud. 2021. Disponible en [https://www.who.int/es/news-room/fact-sheets/detail/ambient-\(outdoor\)-air-quality-and-health](https://www.who.int/es/news-room/fact-sheets/detail/ambient-(outdoor)-air-quality-and-health)

Organización Mundial de la Salud. 2020. OMS: Efectos sobre la salud. 2020. Disponible en [https://www.who.int/phe/health\\_topics/outdoorair/databases/health\\_impacts/es/index2.html](https://www.who.int/phe/health_topics/outdoorair/databases/health_impacts/es/index2.html)

Organización Mundial de la Salud. 2020. OMS: Agua. 2019. Disponible en <https://www.who.int/es/news-room/fact-sheets/detail/drinking-water>

Yassi, A., Kjellstrom, T., De Kok, T., & Guidotti, T. 2002. *Salud ambiental básica*. México DF: PNUMA.

Zenker, Andrea. 2016. Investigación académica e institucional. Disponible en [https://www.agilent.com/cs/library/slidepresentation/public/59915411ES\\_Agilent\\_LC\\_Theory\\_Spanish.pdf](https://www.agilent.com/cs/library/slidepresentation/public/59915411ES_Agilent_LC_Theory_Spanish.pdf)

Zheng, X., Qiao, L., Covaci, A., Sun, R., Guo, H., Zheng, J., Luo, X., Xie, Q., Mai, B., 2017. Brominated and phosphate flame retardants (FRs) in indoor dust from different microenvironments: implications for human exposure via dust ingestion and dermal contact. *Chemosphere* 184, 185–191.

## VI. ANEXO

### Glosario

Los siguientes términos son utilizados por la interfaz de programas EPI-Suite y en la investigación.

- a) Tiempo de vida media: tiempo al cual el compuesto o sustancia llega a la mitad de su concentración inicial.
- b) Biodegradación: Pérdida del compuesto en los compartimientos por medio de reacciones entre microorganismos aeróbicos o anaeróbicos.
- c) Advección: La advección es la eliminación de una sustancia química de un compartimento a través de pérdidas distintas de la degradación (reacción). La tasa de advección en un compartimento dado se determina mediante un caudal ( $m^3 / hora$ ), que se calcula dividiendo el volumen del compartimento por un tiempo de advección.
- d) Emisiones: Acto de descargar algún compuesto o sustancia en compartimientos como el aire, agua y suelo.
- e) Coeficiente de reparto: El coeficiente de reparto de una sustancia, es el cociente o razón entre las concentraciones de esa sustancia en las dos fases de la mezcla formada por dos disolventes inmiscibles en equilibrio. Por tanto, ese coeficiente mide la solubilidad diferencial de una sustancia en esos dos disolventes.
- f) Exposoma: representación total de las exposiciones ambientales y las respuestas biológicas concomitantes a lo largo del curso de la vida del humano.

- g) Persistente: compuesto o sustancia que no se elimina fácilmente y se mantiene a lo largo del tiempo.
- h) Bioacumulación: proceso de acumulación de sustancias químicas en organismos vivos de forma que estos alcanzan concentraciones más elevadas que las concentraciones en su medio o en los alimentos. Las sustancias propensas a la bioacumulación alcanzan concentraciones crecientes a medida que se avanza en el nivel trófico en la cadena alimenticia.
- i) Contaminación/contaminantes: Un contaminante ambiental es una sustancia, una energía, un organismo vivo o sus derivados, que al incorporarse a los componentes del ambiente representa riesgos para la salud humana, o causa daño en los recursos vivos, los sistemas ecológicos, los bienes y los paisajes (Huerta, J. A. 2015).
- j) Contaminante emergente: cualquier producto químico sintético, natural o cualquier microorganismo que no es controlado comúnmente en el medio ambiente. Sin embargo, tienen el potencial para ingresar en él y causar efectos adversos ecológicos (conocidos o sospechosos) o daños sobre la salud humana". (US Geological Survey, 2015).
- k) Entorno evaluativo: entorno con parámetros fisicoquímicos predeterminados, siendo así un entorno específico donde se realiza la modelación.

Tabla 23. Lista de compuestos y sus propiedades fisicoquímicas.

NOMBRE	Abrev.	Log H	Log P	Log S	Log Kow	Log Kaw	Log Koa	Log Koc	Uso
cloruro de bencilo	BC	-3.39	0.09	2.72	2.3	2.214	4.065	2	Plastificantes
butoxipiperonil	PBO	-10.05	-5.28	1.16	4.8	-8.314	13.189	2.803	Biocida
tetrametrina	TM	-5.77	-5.15	0.26	4.7	-4.161	8.891	2.89	Biocida
bencil butil ftalato	BBPth	-5.90	-5.08	0.43	4.7	-4.288	9.018	3.855	Plastificantes
bis(2-etilhexil) adipato	DEHA	-6.36	-6.07	-2.49	8.9	-4.751	13.691	4.69	Plastificantes
dietiltoluamida	DEET	-7.68	-2.70	2.96	2.2	-6.66	8.246	2.06	Biocida
fenitrotión	FNT	-6.03	-4.27	1.58	3.3	-4.42	7.72	3.077	Biocida
o-hidroxi-bifenil	O-HBP	-2.29	0.82	2.25	3.1	-0.674	3.91	1.89	Biocida
triclosano	TCN	-7.68	-5.34	1.00	4.8	-6.066	10.826	3.9	Cosméticos
terbutilazina	TA	-7.64	-6.17	0.95	3.4	-6.027	9.427	2.5	Biocida
cipermetrina	CMT	-6.62	-8.51	-2.40	6.6	-5.008	11.608	4.902	Biocida
dibutil ftalato	DBPth	-5.74	-4.70	1.05	4.5	-4.131	8.631	3.063	Plastificantes
dimetil ftalato	DMPth	-6.71	-2.51	3.60	1.6	-5.094	6.694	2.16	Plastificantes
2-(2-hidroxi-propoxi)-1-propanol	PPG	-13.50	-7.15	4.22	-0.2	-11.892	11.682	1	Cosméticos
1,2-propanediol	PG	-7.89	-0.89	6.00	-0.9	-6.275	5.355	0	Alimentario
à-terpineol	α-TPL	-5.65	-1.37	3.85	3.0	-4.04	7.02	1.9	Cosméticos
alcohol bencílico	BNOH	-6.47	-1.03	4.63	1.1	-4.861	5.961	1.1	Cosméticos
metilparabeno	MPB	-8.65	-3.63	3.40	2.0	-7.04	8.57	1.94	Alimentario
propilparabeno	PPB	-8.37	-3.51	2.70	3.0	-6.76	9.8	2.46	Alimentario
acetato de etilo	EtAc	-3.87	1.97	4.90	0.7	-2.261	2.7	1.26	Alimentario
ácido oléico	OA	-4.35	-6.26	-1.94	7.6	-2.737	10.377	7.25	Alimentario
cumarina	COU	-7.00	-3.01	3.28	1.4	-5.393	6.783	2.15	Cosméticos
2,6-bis(1,1-dimetil-etil)fenol	2,6-DTBP	-5.50	-2.14	0.40	4.9	-3.89	8.81	3.56	Lubricantes y Grasas
1-naftalenol	1NP	-7.22	-3.56	2.94	2.9	-5.61	8.46	2.72	Cosméticos
lilial	LA	-5.07	-2.45	0.90	4.4	-2.992	7.352	2.608	Cosméticos
piperonal	PRL	-6.25	-2.00	3.54	1.1	-4.637	5.687	1.38	Cosméticos
2-butoxietanol fosfato (3:1)	TOBEP	-10.92	-5.92	3.04	3.8	-9.309	13.059	3.1	Retardante de llama
3-(4-metoxifenil)-2-etilhexil ester ácido 2-propanóico	MEEAP	-5.07	-4.64	-0.66	6.1	-3.459	9.559	3.93	Cosméticos
3,5-di-tert-butil-4-hidroxi-benzaldehido	BHT-OCH	-7.78	-5.66	0.78	4.2	-6.419	10.619	2.845	Farmacéutico
bumetrisol	BMZ	-12.93	-8.81	-0.17	5.6	-11.32	16.87	4.644	Cosméticos
2-(2h-benzotrizol-2-il)-4,6-bis(1,1-dimetilpropil)-fenol	UVF	-12.19	-9.71	-1.83	7.3	-10.574	17.824	6.86	Plastificantes
dometrisol	DMT	-13.21	-6.73	1.19	4.3	-11.602	15.912	3.593	Cosméticos
4-(1,1,3,3-tetrametilbutil)fenol	4-t-O	-5.16	-3.32	0.71	5.3	-3.55	8.8	3	Plastificantes
tetrahidro-2-furanometanol,	THFM	-8.39	-0.10	6.00	-0.1	-6.776	6.666	0	Pinturas/Tinturas/Resinas
3-methyl-1h-pirazol,	MHP	-5.39	-0.57	4.66	0.6	-3.779	4.389	1.512	Desconocido
estragol	ETG	-3.34	-0.78	2.25	3.5	-1.724	5.194	2.72	Alimentario
quinolina	QNL	-5.77	-1.22	3.79	2.0	-4.158	6.188	3.189	Pinturas/Tinturas/Resinas

4-(t-butil) benzaldehido	BZA	-4.21	-1.34	1.73	3.6	-2.848	6.468	1.882	Desconocido
decametilciclopentasiloxano,	DSIO	1.52	-0.70	-1.77	8.1	3.13	4.95	7.673	Cosméticos
3-(4-isopropilfenil)-2-metilpropionaldehido	IMPA	-5.06	1.36	1.35	3.9	-3.114	7.024	2.451	Cosméticos
tris(1,3-dicloroisopropil)fosfato	TDIF	-8.58	-6.54	0.85	3.7	-6.972	10.622	4.046	Retardante de llama
tri(2-etilhexil)trimelitato	TTM	-6.35	-9.29	-2.51	8.0	-4.74	12.74	7.61	Plastificantes
tetradecil oxirano	TDO	-2.20	-1.92	-1.19	6.8	-0.586	7.346	4.124	Lubricantes y Grasas
musk ketona	MK	-6.60	-6.52	0.28	4.3	-4.991	9.291	3.94	Cosméticos
di-isooctil ftalato	DBP	-5.74	-4.70	1.05	4.5	-4.131	8.631	3.14	Plastificantes
di-butil ester 2-(z)ácido butenodióico	DBZA	-6.43	-3.21	0.94	7.3	-10.574	17.824	6.862	Lubricantes y Grasas
2-etilhexil éster ácido benzóico	EAB	-3.63	-3.10	0.03	5.2	-1.987	7.177	3.616	Cosméticos
2,2-dimetoxi-1,2-difenil etanona	DDE	-8.42	-4.77	1.82	3.0	-6.803	9.753	2.546	Pinturas/Tinturas/Resinas
bis(2-metilpropil)éster ácido 1,2-benzodicarboxílico	DIBP	-5.55	-4.32	0.79	4.1	-3.941	8.051	3.14	Plastificantes
2,2,4,4,6,8,8-heptametil-nonano	HMN	1.46	-0.57	-2.69	7.8	3.074	4.716	7.403	Cosméticos
1-metoxi-4-metil-benceno	MPC	-2.33	0.08	2.84	2.7	-0.716	3.376	2.83	Alimentario
metil eugenol	ME	-5.25	-1.92	2.70	3.0	-3.64	6.67	2.15	Alimentario
5-propil-1,3-benzodioxol	PB	-0.78	-1.26	1.76	3.6	0.829	2.751	2.48	Cosméticos
2,6-dicloro-1,1'-bifenil	PCB 10	-3.64	-3.72	0.38	5.0	-2.027	7.007	4.138	Desconocido
3,3',4-tricloro-1,1'-bifenil	PCB 35	-3.58	-4.40	-0.53	5.7	-2.163	7.853	4.679	Desconocido
1-metilfenantreno	MF	-4.31	-4.82	-0.57	5.1	-2.696	7.776	4.437	Producto de combustión
hidrocortisona 21-acetato	H21	-11.20	-12.66	1.15	2.2	-9.593	11.783	1.46	Farmacéutico
dietil ftalato	DEPth	-6.21	-3.13	3.03	2.4	-4.603	7.443	2.02	Plastificantes
cafeina	CF	-10.96	-6.05	4.33	-0.1	-9.347	8.995	0.6	Alimentario
anhídrido succínico	SA	-4.80	-2.82	4.38	0.8	-3.184	4.003	0	Alimentario
colesterol	CT	-3.78	-9.11	-1.02	8.7	-2.166	10.906	6.31	Alimentario
acetato de bencilo	BA	-4.96	-0.75	3.49	2.0	-3.347	5.316	2.45	Cosméticos
acenaftileno	ACY	-3.94	-2.18	1.21	3.9	-2.332	6.59	3.7	Producto de combustión
pireno	PY	-4.92	-5.347	-0.87	4.9	-3.313	8.399	4.7351	Producto de combustión
4,4'-metilenebis[2-metilbencenammina]	MBOT	-10.74	-6.041	1.71	3.3	-8.525	11.805	3.7557	Cosméticos

Tabla 24. Repartos de los compuestos en cada uno de los compartimientos.

Abreviación	CAS	Cantidad masa en Aire (%)	Cantidad masa en Agua (%)	Cantidad masa en Suelo (%)	Cantidad masa en Sedimento (%)	Perst. (h)
BC	100-44-7	10.5	25.8	63.6	0.15	308
PBO	51-03-6	0.000881	17.3	82.6	0.116	1600
TM	7696-12-0	0.0202	18.6	80.6	0.81	1030
BBPth	85-68-7	1.41	21.7	72.2	4.68	526
DEHA	103-23-1	0.479	5.45	32.7	61.4	716
DEET	134-62-3	0.126	18.5	81.2	0.138	1350
FNT	122-14-5	0.18	18	80.6	1.2	1060
O-HBP	95-47-6	0.779	22.8	71.8	4.64	495
TCN	3380-34-5	0.0779	9.08	85.4	5.43	2590
TA	5915-41-3	0.0999	12.3	87.3	0.237	2310
CMT	52315-07-8	0.0463	3.22	71.8	25	7350
DBPth	84-74-2	2.91	26	70.3	0.715	301
DMPth	131-11-3	2.14	21.3	76.4	0.16	623
PPG	25322-694	0.00000911	30.6	69.4	0.0688	640
PG	57556	0.4	34.5	65	0.061	364
α-TPL	98-55-5	0.0439	53.9	45.9	0.106	544
BNOH	100-51-6	0.929	37.2	61.8	0.0885	404
MPB	99-76-3	0.0401	20	79.9	0.107	730
PPB	94-13-3	0.0641	18.5	81.2	0.234	700
EtAc	141-78-6	12.4	34.9	52.6	0.0902	300
OA	112-80-1	0.0481	3.83	28.8	67.4	1240
COU	91-64-5	0.527	24.6	74.7	0.181	511
2,6-DTBP	128-39-2	0.217	17	79.3	3.5	1090
1NP	90-15-3	0.0466	25	74.5	0.509	466
LA	80546	0.357	19.2	80	0.431	998
PRL	120-57-0	0.915	34.1	64.9	0.0967	414
TOBEP	78-51-3	0.000613	18.3	81.2	0.539	466
MEEAP	5466-77-3	0.395	22.5	71.6	5.47	486
BHT-OCH	1620-98-0	0.0974	13.5	85.9	0.0521	1570
BMZ	3896115	0.00000672	6.06	74.4	19.5	3520
UVF	25973-55-1	0.00012	1.23	42.6	56.1	6170
DMT	2440-22-4	0.00000633	11	86.6	2.46	1890
4-t-O	140-66-9	0.268	17.9	80.8	0.988	1040
THFM	97-99-4	0.089	38.3	61.5	0.0717	562
MHP	1453-58-3	0.333	33.1	66.4	0.106	402
ETG	140-67-0	0.446	14.3	84.8	0.412	707
QNL	91225	1.6	23.8	73.3	1.24	484
BZA	939 97 9	1.15	24.9	73.8	0.138	702
DSIO	541-02-6	1.01	2.04	22.8	74.1	2900
IMPA	103-95-7	0.352	20	79.3	0.318	974
TDIF	13674878	0.0135	3.9	91	5.05	7810
TTM	3319-31-1	0.36	5.46	33.6	60.6	722
TDO	7320-37-8	1.92	16.5	76.5	5.06	417
MK	81-14-1	0.492	9.67	83.5	6.36	2410
DBP	84-74-2	0.15	1.89	28.8	69.1	3.17E+03
DBZA	105-76-0	0.769	5.89	32.1	61.2	687
EAB	5444-75-7	2.36	18.2	77.1	2.32	444
DDE	24650-42-8	0.0286	13.3	86.4	0.26	1730
DIBP	84-69-5	1.88	23.7	73.3	1.11	486
HMN	4390049	0.363	1.63	19.1	78.9	4010
MPC	104938	3.47	27.7	68.2	0.699	229
ME	93-15-2	0.16	22.8	76.9	0.198	919
PB	94-58-6	6.51	87.2	4.87	1.48	89.7
PCB 10	33146-45-1	2.53	10.3	79	8.16	1090

PCB 35	37680-69-6	1.6	6.01	71.6	20.8	1950
MF	832-699	0.308	11.6	70.1	18	1240
H21	50-03-3	0.0797	32.2	67.6	0.108	1090
DEPth	84-66-2	2.76	25.4	71.7	0.153	508
CF	58082	0.000248	34.7	65.3	0.0693	609
SA	108305	9.9	43.9	46.2	0.0821	352
CT	57885	0.0122	1.38	30.5	68.1	4750
BA	140-11-4	2.71	25.1	71.9	0.309	462
ACY	208-96-8	0.0691	19.9	76.9	3.08	447
PY	129-00-0	0.106	7.82	60.9	31.2	2280
MBOT	838-88-0	0.0000888	8.31	88.2	3.53	2960