



REMOCIÓN DE CONTAMINANTES
EMERGENTES DE IMPORTANCIA
AMBIENTAL Y SANITARIA

SECRETARÍA DE
MEDIO AMBIENTE Y
RECURSOS NATURALES



INFORME FINAL

TC1003.1 Remoción de contaminantes emergentes de importancia ambiental y sanitaria. Segunda etapa.

Juana E. Cortés Muñoz
Alejandra Martín Domínguez
César G. Calderón Mólgora
Leticia Montellano Palacios.

Diciembre 2010.

RESUMEN EJECUTIVO

Esta segunda etapa del proyecto “Remoción de contaminantes emergentes de importancia ambiental y sanitaria” fue abordada con el enfoque de riesgo, esto es probabilidad-prevención de efectos adversos a la salud pública y al ambiente, por ello se actualizó la revisión bibliográfica de las tecnologías para remoción e inactivación de contaminantes emergentes en procesos de potabilización de agua y se identificaron herramientas para la evaluación de riesgos a la salud pública que incluye a los modelos informáticos para predecir el transporte y el destino de los contaminantes emergentes.

Quizá la principal fuente de contaminantes orgánicos emergentes sean las descargas domésticas por el uso indiscriminado de detergentes, blanqueadores, bloqueadores solares, suavizantes, fragancias, champús y demás artículos para el cuidado personal, así como de fármacos de uso humano y veterinario, productos para el cuidado de animales de compañía, drogas permitidas e ilícitas, plastificantes, propelentes y retardantes para fuego.

El impacto de estos contaminantes en la salud pública y ambiental se debe a la actividad farmacológica de muchas de estas sustancias y de sus metabolitos, y al hecho que ni los sistemas de tratamiento convencionales ni los procesos naturales de autopurificación de los cuerpos receptores (agua o suelos) son eficaces para remover o inactivar a estos contaminantes. De esta forma, compuestos que pueden ayudar a mejorar la calidad de vida entran en los cuerpos de agua superficiales y con frecuencia alcanzan las aguas subterráneas. Esto último es relevante en zonas como por ejemplo el Valle del Mezquital en Hidalgo, en donde el acuífero se localiza en una zona de riego con aguas residuales crudas, a lo cual habría que agregar el uso de agroquímicos y productos veterinarios provenientes de la actividad agropecuaria en la zona.

Se reconoce que existe poca información sobre la presencia de contaminantes emergentes en el agua potable, en buena medida debido a la falta de recursos para el monitoreo y a la tecnología asociada para la detección de sustancias en concentraciones muy bajas (del orden de ng/L). Aún así, en la Unión Europea, Estados Unidos y Canadá a partir de 2000 ha habido una serie de estudios o monitoreos efectuados en el agua del grifo de las casas y se han detectado contaminantes emergentes. Por ejemplo, en Alemania se encontró ácido clofibrico entre 165 y 270 ng/L en agua entubada, lo que fue imputado a la recarga del acuífero con agua residual.

En México la información es aún más limitada y se identificaron solamente algunos trabajos indexados realizados en el Valle del Mezquital, en dos de los cuales se detectaron concentraciones traza de compuestos orgánicos no regulados en el acuífero.

Dado que el monitoreo de las moléculas madre y sus productos de degradación o transformación requieren recursos técnicos, humanos y económicos altos, el uso de modelos informáticos puede ser una herramienta valiosa en la obtención de información para predecir el transporte de las sustancias a los distintos compartimientos ambientales y las matrices en donde los podemos encontrar. Tales modelos incorporan algoritmos para estimar los procesos de transformación fotoquímicos, biológico y químicos.

Por otra parte para dimensionar, estimar o determinar los riesgos a la salud pública asociados con la exposición a contaminantes ambientales se cuenta con herramientas tales como los estudios epidemiológicos y estudios de evaluación de riesgos. Dado que los estudios epidemiológicos se aplican cuando hay evidencias de afectación a la salud de grupos de personas que comparten una o varias características en un espacio y tiempo determinados; por consideraciones éticas y pragmáticas, las metodologías de Evaluación de Riesgos a la Salud por exposición a contaminantes ambientales, son una alternativa para estimar los impactos potenciales de un peligro físico, químico, microbiológico o psicosocial sobre una población humana específica o un ecosistema bajo un conjunto específico de condiciones.

Entre los modelos informáticos identificados para predecir la persistencia y transporte de contaminantes se encuentran los siguientes: BENNX, CalTox, ChemCAN, Chemrange y SCHE, CoZMo-POP, ELPOS, EPI Suite, EQC, GloboPOP, HELD, Level II, Level III, PENX, SimpleBox, TAPL3, VDMX, WANIA, WANX. Cabe aclarar que todos estos modelos son de uso gratuito, el costo o la complicación de su uso estribará en la calidad de la información disponible; todos contienen información sobre un ambiente normalizado, pero este se puede modificar, con excepción de excepción de EPI Suite, que no permite ningún cambio.

Con base en monitoreos hechos en una zona de estudio y el uso de estos modelos es posible estimar los contaminantes que se esperarían encontrar en las fuentes de agua para uso y consumo humano.

De los procesos de tratamiento para potabilizar agua apta para consumo humano considerando los contaminantes emergentes, las membranas de ósmosis inversa y de nanofiltración son de los más eficaces. La atención se ha enfocado en membranas de menor presión de operación: ósmosis inversa de ultrabaja presión y de nanofiltración. El interés que han despertado ambos tipos de membranas se deriva de que se ha observado que tienen capacidad para remover, con altos niveles de eficiencia, a muchas de las sustancias comprendidas dentro de los

contaminantes emergentes y a que sus costos de operación son, o aparentan ser, menores que los de la ósmosis inversa convencional. Dada la amplia gama de sustancias que integran a los contaminantes emergentes, las características fisicoquímicas que presentan son diversas y no todas ellas pueden ser eficientemente rechazadas, si bien hay varios investigadores que han tratado de modelar el comportamiento de las membranas para el rechazo de uno o varios contaminantes emergentes, a la fecha no se ha logrado establecer un modelo matemático/numérico totalmente confiable, que prediga con precisión la concentración que se puede esperar en el agua tratada, especialmente para compuestos orgánicos no polares, de bajo peso molecular y de radio molecular pequeño. La mejor aproximación es un modelo cualitativo que arroja resultados en el sentido de rechazo bajo, medio, alto o muy alto, pero no es capaz de cuantificar la concentración de compuestos orgánicos en el agua tratada, especialmente.

En cuanto a las pruebas de tratabilidad se refiere se probaron tres membranas comerciales de NF con rechazos nominales de 89%, 90% y 90% de NaCl, cada una de ellas se probó con cuatro sustancias diferentes: Atenolol, Estradiol, Nimesulida y Sildenafil. Los niveles de rechazo que mostraron las membranas fueron altos para Atenolol, Nimesulida y Sildenafil. En el caso del estradiol, la eficiencia real de remoción no pudo ser cuantificada porque se utilizó etanol para lograr diluir la sustancia en el agua y la molécula de etanol es no polar y el tamaño molecular es menor que el tamaño de poro de las membranas. Como era de esperar, las membranas con mayor rechazo nominal (905) fueron más eficientes en la separación de las sustancias que la membrana con rechazo nominal de 89%.

ÍNDICE GENERAL

1. INTRODUCCIÓN	7
1.1. OBJETIVO GENERAL	8
1.2. OBJETIVOS PARTICULARES	8
2. METODOLOGÍA	9
3. USO DE MODELOS MULTIMEDIA EN LA EVALUACIÓN DE RIESGOS A LA SALUD PÚBLICA ASOCIADOS CON LA EXPOSICIÓN A CONTAMINANTES EN AGUA	12
3.1. ANTECEDENTES	12
3.1.1. DEMANDA DE AGUA	12
3.1.2. NATURALEZA DEL RIESGO: RIESGOS MICROBIOLÓGICOS VS RIESGOS QUÍMICOS	14
3.1.3. FUENTES DE CONTAMINANTES QUÍMICOS EMERGENTES Y NO REGULADOS	22
3.2. HERRAMIENTAS DISPONIBLES PARA LA IDENTIFICACIÓN Y EVALUACIÓN DE RIESGOS A LA SALUD PÚBLICA ASOCIADOS CON LA EXPOSICIÓN A QUÍMICOS AMBIENTALES	29
3.3. TRANSFORMACIÓN Y TRANSPORTE O MOVILIDAD AMBIENTAL DE CONTAMINANTES QUÍMICOS EN LA EVALUACIÓN DE LA EXPOSICIÓN	46
3.4. ESTRUCTURA DE LOS MODELOS MULTIMEDIA O MULTICOMPARTIMENTALES	51
3.4.1. SISTEMAS EULERIANOS, LANGRANGIANOS Y DE DIFUSIÓN	51
3.4.2. MODELOS POR SISTEMAS “REAL” Y DE “ESTIMACIÓN”	51
3.4.3. BALANCE DE MASA COMPARTIMENTAL	52
4. PRUEBAS DE TRATABILIDAD	67
4.1. MARCO TEÓRICO	67
4.1.1. POSIBLES BENEFICIOS ECONÓMICOS DE LA NF VS OI	69
4.1.2. LAS MEMBRANAS COMO FUENTE DE CONTAMINANTES EMERGENTES.	70
4.2. PRUEBAS CON MEMBRANAS.	73
4.2.1. PREDICCIÓN DEL COMPORTAMIENTO DE LAS MEMBRANAS PARA EL RECHAZO DE COMPUESTOS ORGÁNICOS.	73



REMOCIÓN DE CONTAMINANTES
EMERGENTES DE IMPORTANCIA
AMBIENTAL Y SANITARIA

SECRETARÍA DE
MEDIO AMBIENTE Y
RECURSOS NATURALES



4.2.2. PRUEBAS DE TRATABILIDAD EN LABORATORIO.	73
5. BIBLIOGRAFÍA	82
ANEXO. SALIDA DE LOS MODELOS EPISUITE	84

ÍNDICE DE TABLAS

Tabla 1. Búsqueda y análisis de información de instituciones, agencias y organizaciones nacionales e internacionales	9
Tabla 2. Otras bases de datos	10
Tabla 3. Sitios web	10
Tabla 4. Revistas y textos consultados.....	11
Tabla 5. Requerimientos de agua para proteger la salud pública	15
Tabla 6. Microorganismos patógenos y oportunistas emergentes, reemergentes y no regulados que han sido detectados en aguas y aguas residuales.....	17
Tabla 7. Listado de contaminantes químicos emergentes propuesto para México	21
Tabla 8. Grupos que dan origen a la presencia de contaminantes emergentes en el ambiente	22
Tabla 9. Clasificación de los estudios epidemiológicos	31
Tabla 10. Aplicabilidad de los diseños de estudios epidemiológicos observacionales..	31
Tabla 11. Ventajas y desventajas de los diseños de estudios epidemiológicos observacionales	32
Tabla 12. Pasos en la evaluación de la exposición	38
Tabla 13. Fuentes frecuentes de liberación de contaminantes químicos en sitios en los cuales no se ha llevado a cabo ninguna medida de remediación	40
Tabla 14. Matriz de rutas potenciales de exposición.....	40
Tabla 15. Ecuación genérica para el cálculo de la ingestión de químicos.....	41
Tabla 16. Relaciones estadísticas individuales, para movilidad de contaminantes emergentes (K_{oc}).....	47
Tabla 17. Rangos de la constante de la ley de Henry para definir la volatilidad de un compuesto químico	48
Tabla 18. Rangos del coeficiente de carbono orgánico para definir la capacidad de sorción de compuestos orgánicos	48
Tabla 19. Estimación de la tendencia de un compuesto para permanecer en solución	48
Tabla 20. Parámetros de destino ambiental de los contaminantes emergentes y potencial de bioconcentración	49
Tabla 21. Modelos utilizados para predecir la persistencia y transporte de contaminantes químicos.....	52
Tabla 22. Parámetros de los compartimientos en ambientes rico y pobre en agua.....	58
Tabla 23. Parámetros ambientales en la modelación de los contaminantes detectados en la cuenca del río Atoyac.....	59
Tabla 24. Vida media de reacción de algunos de los analitos detectados en aguas superficiales en México	60
Tabla 25. Vida media de degradación y persistencia total, para algunos de los compuestos orgánicos.....	64



REMOCIÓN DE CONTAMINANTES
EMERGENTES DE IMPORTANCIA
AMBIENTAL Y SANITARIA

SECRETARÍA DE
MEDIO AMBIENTE Y
RECURSOS NATURALES



Tabla 26. Características fisicoquímicas de las sustancias y el rechazo cualitativo esperado	73
Tabla 27. Características de las membranas de nanofiltración utilizadas	74
Tabla 28. Condiciones promedio de operación de las membranas	75

ÍNDICE DE FIGURAS

Fig. 1. Agua-Nexos, y claves de desarrollo sostenible.....	13
Fig. 2. Problemática general de la disponibilidad de agua con un enfoque de riesgos sanitarios y ambientales	14
Fig. 3. Disminución de la hidrottransmisión de patógenos mediante mejoras en el saneamiento y abastecimiento de agua	16
Fig. 4. Cobertura de agua potable y alcantarillado y tasa de mortalidad por enfermedades diarreicas en menores de cinco años.....	17
Fig. 5. Esperanza de vida al nacer y tasa de mortalidad infantil en el ámbito nacional, dos entidades con niveles de desarrollo humano alto y una entidad con nivel muy bajo	17
Fig. 6. Tasas de mortalidad en la población general durante el período de 1990 a 2008	19
Fig. 7. Proceso de selección de 50 contaminantes emergentes prioritarios en México	20
Fig. 8. Modelo conceptual de ingreso-transporte de contaminantes emergentes	25
Fig. 9. Peso de la evidencia, en la evaluación de riesgos a la salud pública por exposiciones a contaminantes en agua.....	30
Fig. 10. Elementos en la evaluación de riesgos de un modelo conceptual	33
Fig. 11. Fases básicas en las metodologías de evaluación de riesgos a la salud	34
Fig. 12. Modelo de evaluación de riesgos a la salud por exposiciones ambientales utilizado en Australia	35
Fig. 13. Metodología de evaluación de riesgos propuesto por López, <i>et al.</i>	36
Fig. 14. Integración general de fuentes, dispersión y exposición utilizadas en los modelos de evaluación de riesgos	38
Fig. 15. Proceso de caracterización del riesgo.....	43
Fig. 16. Derivación de las expresiones para las concentraciones compartimentales en condiciones de equilibrio usando concentraciones constantes	53
Fig. 17. Diagrama esquemático que presenta las relaciones de partición y la secuencia para el cálculo de los valores de Z (fugacidad) para los cinco tipos de químicos y creel criterio de equilibrio.....	55
Fig. 18. Diagrama de criterios de selección para cuatro tipos de químicos.....	57
Fig. 19. Distribución de cloroformo en los compartimientos ambientales. Sólo se consideró descarga al agua.....	61
Fig. 20. Distribución de tetracloroetileno en los compartimientos ambientales. Sólo se consideró descarga al agua.....	62
Fig. 21. Distribución de tolueno en los compartimientos ambientales. Sólo se consideró descarga al agua	62



REMOCIÓN DE CONTAMINANTES
EMERGENTES DE IMPORTANCIA
AMBIENTAL Y SANITARIA

SECRETARÍA DE
MEDIO AMBIENTE Y
RECURSOS NATURALES



Fig. 22. Distribución de 1,4-diclorobenceno en los compartimientos ambientales. Sólo se consideró descarga al agua	63
Fig. 23. Distribución de 1,2-dicloroetano en los compartimientos ambientales. Sólo se consideró descarga al agua.....	63
Fig. 24. Algoritmo para predecir el rechazo de un compuesto orgánico en una membrana (Bellona, <i>et al.</i> 2004).....	68
Fig. 25. Banco de pruebas utilizado para probar a las distintas membranas.....	75
Fig. 26. Comportamiento de las membranas para remover Atenolol.	77
Fig. 27. Comportamiento de las membranas para remover Estradiol	78
Fig. 28. Comportamiento de las membranas para remover Nimesulida.....	79
Fig. 29. Comportamiento de las membranas para remover Sildenafil.....	80

ANEXOS

1. INTRODUCCIÓN

En el acceso al agua potable, además de la problemática que implica el control y prevención de contaminación de las fuentes de abastecimiento por las emisiones y descargas asociadas a las actividades económicas, las descargas domésticas representan una de las principales fuentes de contaminantes biológicos y químicos, destacando los llamados contaminantes emergentes, relacionados con el uso indiscriminado de detergentes, blanqueadores, bloqueadores solares, suavizantes, fragancias, champús y demás artículos para el cuidado personal, así como de fármacos de uso humano y veterinario, productos para el cuidado de animales de compañía, drogas permitidas e ilícitas, plastificantes, propelentes y retardantes para fuego.

El impacto de estos contaminantes en la salud pública y vida silvestre se debe a que muchas sustancias y sus metabolitos son farmacológicamente activas y no son totalmente removidos o inactivados en los sistemas de tratamiento convencionales o por los procesos naturales de autopurificación de los cuerpos receptores (agua o suelos), alcanzando con frecuencia las aguas subterráneas. Esto último es relevante en zonas como por ejemplo el Valle del Mezquital en Hidalgo, en donde el acuífero se localiza en una zona de riego con aguas residuales crudas, a lo cual habría que agregar el uso de agroquímicos y productos veterinarios provenientes de la actividad agropecuaria en la zona.

Un problema relevante identificado para países como México, es el uso de antibióticos, dado que las enfermedades infecciosas aún son una de las principales causas de morbilidad entre la población general y en particular las infecciones gastrointestinales en menores de cinco años. El problema va más allá de las dosis, el punto es la resistencia microbiana, que si bien es un proceso evolutivo natural que lleva años, los actuales usos propician la selección cepas, alterando la diversidad microbiana en los suelos y cuerpos de agua, esto es relevante porque son los microorganismos quienes transforman una gran cantidad de moléculas orgánicas e inorgánicas.

Con respecto al impacto ambiental y en salud de otros contaminantes químicos, destacan aquéllos que alteran el funcionamiento endocrino de los organismos (humanos, aves, mamíferos, peces, vegetales superiores) debido a que muchos de los procesos metabólicos son mediados por hormonas. También son altamente relevantes los que se asocian con neoplasias (tumores), toxicidad de desarrollo, toxicidad reproductiva y neurotoxicidad.

Se reconoce que existe poca información sobre la presencia de contaminantes emergentes en el agua potable, posiblemente debido a la falta de recursos para el monitoreo y porque se requiere de límites de detección muy bajos (del orden de ng/L); sin embargo, en Alemania, p. ej., se han detectado concentraciones de ácido clofíbrico entre 165 y 270 ng/L en agua entubada, lo que fue imputado a la recarga del acuífero con agua residual, asimismo otros autores han llevado a cabo revisiones bibliográficas en las que se reportan concentraciones

del orden de los ng/L y $\mu\text{g/L}$ de fármacos, productos para el cuidado personal y otros contaminantes incluidos en la definición de emergente.

En México la información es aún más limitada y se identificaron solamente algunos trabajos indexados realizados en el Valle del Mezquital, en dos de los cuales se detectaron concentraciones traza de compuestos orgánicos no regulados en el acuífero.

Considerando que este es un problema recientemente analizado en México y las necesidades de agua que se presentan en algunas regiones del país, es necesario, por un lado generar información de laboratorio y campo referente a la cantidad y diversidad de contaminantes emergentes desde la perspectiva de riesgo, es decir prevención de efectos no deseables para la salud pública y los ecosistemas, y por otro lado se debe fortalecer el desarrollo e investigación referente al destino de estos contaminantes en los procesos de tratamiento del agua para su potabilización así como de los mecanismos de transformación y destino o transporte de estos contaminantes en los diferentes compartimientos ambientales y su significado en diferentes escenarios de exposición para la población humana.

Los procesos de transformación identificados, pueden agruparse en procesos de fototransformación, biotransformación y quimiotransformación; las moléculas pueden ser transferidas de un compartimiento ambiental de acuerdo con su estadía físico y sus características fisicoquímicas. Dado que el monitoreo de las moléculas madre y sus productos de degradación o transformación requieren recursos técnicos, humanos y económicos altos, el uso de modelos multimedia puede ser una herramienta valiosa en la obtención de información para evaluar riesgos sanitarios y ambientales asociados con la presencia de contaminantes emergentes en agua. De aquí los objetivos planteados en esta segunda fase del proyecto.

1.1. OBJETIVO GENERAL

Estudio de los mecanismos de transformación y/o transformación de contaminantes orgánicos emergentes como por ejemplo los estrógenos y disruptores endocrino en aguas con fines potables, utilizando procesos de membrana

1.2. OBJETIVOS PARTICULARES

- a) A nivel laboratorio determinar la capacidad de tres membranas comerciales de nanofiltración para remover contaminantes orgánicos emergentes
- b) Identificar modelos multimedia (diferentes compartimientos ambientales) que permitan simular el destino y transporte de contaminantes emergentes para su uso como herramienta en la evaluación de riesgos sanitarios y ambientales

2. METODOLOGÍA

Al igual que en la primera etapa del proyecto, la presente etapa fue abordada con el enfoque de riesgo, esto es probabilidad-prevención de efectos adversos a la salud pública y al ambiente, de aquí que se tengan las siguientes componentes:

- Actualización de información bibliográfica en lo referente a tecnologías de tratamiento para la remoción y/o inactivación de contaminantes emergentes en agua con fines potables
- Identificación de la problemática de disponibilidad del agua en función de la calidad y la cantidad
- Identificación de herramientas para la evaluación de riesgos a la salud pública
- Identificación de modelos multimedia para simular el destino y transporte de contaminantes emergentes

Se revisaron bases de datos internacionales y especializadas (riesgos ambientales, riesgos a la salud pública, toxicología y microbiología), estudios de caso, artículos de revistas arbitradas e indexadas y textos especializados, así como bases de datos de calidad del agua nacionales y, normativa nacional e internacional. Las bases incluyeron: US EPA, ActOR, National Library of Medicine, Toxline, Toxnet, RAIS, IRIS, CDC, IDRC, entre otras bases disponibles en línea.

Se consultó información de textos, revistas e informes institucionales, obtenidos en bases de datos nacionales, de Canadá, Estados Unidos, Australia y de organizaciones internacionales como la Organización Mundial de la Salud y la Unión Europea, entre otras instituciones (Tabla 1, Tabla 2, Tabla 3 y Tabla 4)

Tabla 1. Búsqueda y análisis de información de instituciones, agencias y organizaciones nacionales e internacionales

NACIONAL	ESTADOS UNIDOS Y CANADÁ	CANADÁ, EUROPA Y AUSTRALIA	ORGANISMOS INTERNACIONALES
Comisión Nacional del Agua (CNA)	Center Diseases Control(CDC)	Environment Canada	Banco Mundial
Instituto Nacional de Estadística, Geografía e Informática (INEGI)	US Environmental Protection Agency (USEPA)	Health Canada	Organización Mundial de la Salud (OMS; WHO, por sus siglas en inglés)
Secretaría de Mejoramiento del Ambiente y Recursos Naturales (SEMARNAT)	Integrated Risk Information System (IRIS)	Environmental Health Canada Federal	Organización para la Alimentación y la Agricultura (FAO, por sus siglas en inglés)
Secretaría de Salud (SSA)	National Library of Medicine	Institute of Hydrology BfG	International Agency for Research of Cancer (IARC)
Consejo Nacional de	Center for Health Effects of Environmental	European Molecular Biology Organization	International Development
		Department of the Environment, Water, Heritage and the Arts	

NACIONAL	ESTADOS UNIDOS Y CANADÁ	CANADÁ, EUROPA Y AUSTRALIA	ORGANISMOS INTERNACIONALES
Población (CONAPO)	Contamination Agency for Toxic Substances and Disease Registry (ATSDR)	(Australia) New Zealand Ministry of Health	Research Center (IDCR) European Environ Agency Institute for Health and Consumer Protection (European Commission)

Tabla 2. Otras bases de datos

American Public Health Association	Centro de Consulta del Agua	Toxline
American Society for Microbiology	Medline	Virtual Health Library
American Water Works Association	Toxnet	WWW Virtual Library
Canadian Society of Microbiology	National Library of Medicine	http://www.libreriamedica8a.com
http://www.chbr.noaa.gov/peiar	http://www.chemsynthesis.com/index.html	www.terrabase-inc.com/antibiots-antibacts.html
http://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/		
EbscoHost (http://cenca.imta.mx/)	Scielo (www.scielo.org)	http://www.facmed.unam.mx/bmnd/gi_2k8/prods/PR
Society of Environmental Toxicology and Chemistry: http://www.setac.org/	PAN Pesticide database: http://www.pesticideinfo.org/Index.html	Directory of Open Access Journals, DOAJ (http://www.doaj.org)
http://actor.epa.gov/actor/faces/ACToRHome.jsp	http://www.nlm.nih.gov/medlineplus/spanish/druginfo	Science Direct: (www.sciencedirect.com)
http://www.imss.gob.mx/cuadrosbasicos/	Royal Society of Chemistry: http://www.rsc.org/	International Programme of Chemical Safety: http://www.inchem.org/

Tabla 3. Sitios web

SITIO WEB	OBSERVACIONES
www.epa.gov	Proporciona información referente a la relevancia ambiental y de salud pública de diversos compuestos orgánicos e inorgánicos, así como regulaciones y, métodos analíticos para la detección y cuantificación de la USEPA
www.epa.gov/ogwdw/methods/methods.html	Información sobre el desarrollo de métodos para análisis de agua potable de la USEPA
www.epa.gov/ogwdw/methods/sourcalt.html	Métodos desarrollados por la Oficina de Aguas Subterráneas y agua potable de la USEPA
www.chbr.noaa.gov/CoastalResearch	NOAA's sobre información de toxinas de algas
http://ehp.niehs.nih.gov/roc/toc10.html	Liga a los reportes NTP sobre NDMA, así como sobre otros carcinógenos estudiados y en estudio
http://www.awwarf.org/exsums/256.htm	AWWARF. Estudio Estados Unidos-Canadá sobre la presencia de microcistinas
www.epa.gov/safewater/arsenic.html	Sitio web de la USEPA sobre arsénico
www.epa.gov/ncerqa/grants	Solicitudes de financiamiento a la USEPA

SITIO WEB	OBSERVACIONES
www.epa.gov/scipoly/oscpendo/overview.htm	Programa de tamizaje de disruptores endocrinos de la USEPA
http://www.sani.com.ar/	Vademécum veterinario de Argentina. Incluye 4612 productos para sanidad animal
http://www.vademecum.es/index.cfm	Medio de información de medicamentos, sustancias, principios activos, dopaje, interacciones, equivalencias internacionales y laboratorios farmacéuticos de España
http://www.scorecard.org/	Contiene listados de tóxicos de acuerdo con eventos finales o efectos adversos a la salud humana. También incluye un sistema de calificación (ranking) de compuestos tóxicos
http://www.iupac.org/	Información general así como especializada sobre diversos tópicos en química
http://www.healthandenvironment.org/tddb	Es una base de datos que asocia contaminantes químicos con aproximadamente 180 enfermedades de humanos
http://www.heraproject.com/Index.cfm	Contiene estudios de evaluación de riesgos de ingredientes que forman partes de productos de limpieza domésticos (detergentes), con base en la metodología HERA.

Tabla 4. Revistas y textos consultados

REVISTAS Y TEXTOS ESPECIALIZADOS	
Textos de consulta especializada en materia de: <ul style="list-style-type: none"> • Contaminación ambiental • Salud ambiental • Salud pública • Evaluación de riesgos a la salud y al ambiente 	Desalinization Journal AWWA Mutat. Res Occup. Med. Regul. Toxicol. Pharmacol. Toxicology Reprod. Toxicol Rev. Environ. Contam. Toxicol. Toxicology and Applied Pharmacology Salinity Sci Total Environ. Toxicol. Environ. Health Water Reaserch Water Science and Technology
American Journal of Epidemiology	
Applied and Environmental Microbiology	
British Medical Journal	
Chemosphere	
Chronic Diseases in Canada	
Emerging Infectious Diseases	
Environmental Health Perspectives	
Environ Sci. Technol	
Fundam. Appl. Toxicol.J. Agr. Food. Chem	

3. USO DE MODELOS MULTIMEDIA EN LA EVALUACIÓN DE RIESGOS A LA SALUD PÚBLICA ASOCIADOS CON LA EXPOSICIÓN A CONTAMINANTES EN AGUA

3.1. ANTECEDENTES

Durante décadas, el crecimiento continuo y poco programado de las grandes urbes, y aún en zonas rurales y marginales, no se consideró la disposición final de los residuos sólidos, ni de las aguas residuales, ni la contaminación del aire por acumulación de materiales cuya peligrosidad para los ecosistemas o la salud pública es parcialmente conocida o desconocida en su totalidad, de aquí que el problema de los usos y consumo de agua deba ser abordado de manera holística y desde la perspectiva de riesgo, tanto para los ecosistemas como para la salud pública.

Asimismo, se desestimó el efecto de la mala disposición de excretas tenía sobre la calidad de los cuerpos de agua, hasta que enfermedades hidrotansmisibles causaron epidemias de consecuencias fatales para las poblaciones. A principios de la segunda mitad del siglo XIX, John Snow, mediante el estudio de datos estadísticos, identificó el principal factor de riesgo o causa del brote de cólera que se presentó en Londres. A través de la comparación de datos, determinó que las localidades abastecidas de agua de río contaminada con aguas residuales, eran la causa de dicho brote [White, 1999]; de este período se tienen los primeros datos sobre desinfección de agua en una planta de abastecimiento de Londres.

En la década de 1890, se instituyó el uso de hipoclorito como medida para prevenir brotes enfermedades infecciosas gastrointestinales tales como la fiebre tifoidea y a partir de entonces, ha sido evidente el valor de la desinfección del agua para consumo y, el tratamiento y disposición adecuados de las excretas, para prevenir y controlar enfermedades infecciosas intestinales y otras enfermedades transmisibles relacionadas con el uso y consumo de agua.

Así, los problemas ambientales fueron estudiados y regulados únicamente con base en los efectos agudos o de corto plazo para las poblaciones potencialmente expuestas a microorganismos patógenos; posteriormente, fueron considerados efectos crónico-degenerativos tales como los carcinogénicos, o en el caso del arsénico, están ampliamente documentados los efectos sobre el sistema cardiovascular.

3.1.1. Demanda de agua

En la actualidad es posible afirmar que existen riesgos ambientales conocidos y por tanto pueden prevenirse, éstos son los relacionados con microorganismos patógenos hidrotansmisibles y, riesgos químicos, cuya magnitud y dimensión se desconocen en su

totalidad, por lo que diversos gobiernos de Europa, Australia y Estados Unidos, así como autoridades a nivel mundial, están concentrando esfuerzos en determinar las implicaciones toxicológicas de la exposición humana tanto a contaminantes conocidos como a aquéllos recientemente identificados desarrollando estándares de calidad y niveles de detección analítica confiables, identificando estrategias de prevención y manejo de residuos, además de trabajar en el establecimiento de normas regulatorias o legislaciones apropiadas, para cuyo cumplimiento es necesario contar con:

- Información de riesgos sanitarios y ambientales
- Tecnologías de tratamiento para potabilización del agua, suficientemente eficientes y efectivas para asegurar que los riesgos a la salud pública se minimizan y son socialmente aceptables

Por otro lado, es importante dimensionar la problemática relacionada con la competencia de los diversos sectores de usuarios y claves para el desarrollo sostenible (Fig. 1).

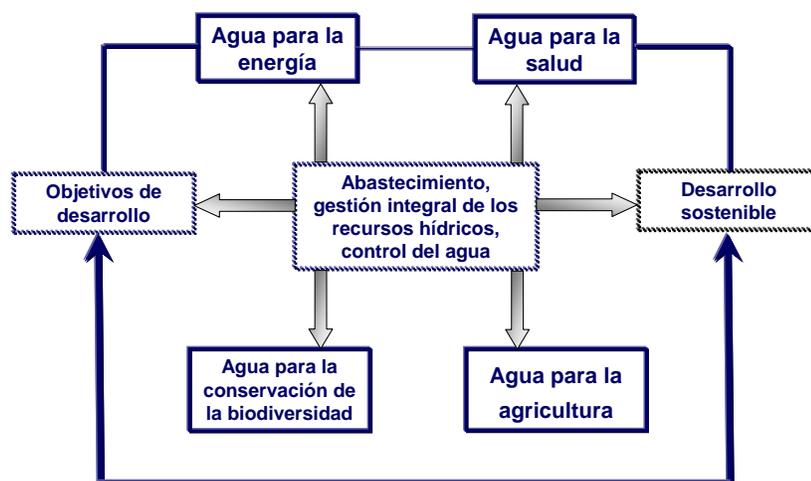


Fig. 1. Agua-Nexos, y claves de desarrollo sostenible

Fuente: Tomado de: J.J. Bogardi & A. Szollosi-Nagi, 2003

El problema es complejo, y se debe considerar que además de la presión que hay con respecto a la demanda de agua para satisfacer las necesidades básicas, seguridad alimentaria, desarrollo sostenible y protección de los ecosistemas, existen factores tales como el crecimiento demográfico, procesos de contaminación natural del agua, contaminación de origen antrópico (considerablemente superior a la contaminación natural y cambio climático), que afectan la disponibilidad del agua en términos de la cantidad y calidad. Los instrumentos con los cuales se cuenta en la actualidad para dar solución a esta problemática, son: políticas

de manejo, como ya se anotó un marco normativo y legislativo, valoración del agua y la gestión de riesgos que incluye la evaluación, manejo y comunicación de los mismos a la población (Fig. 2).

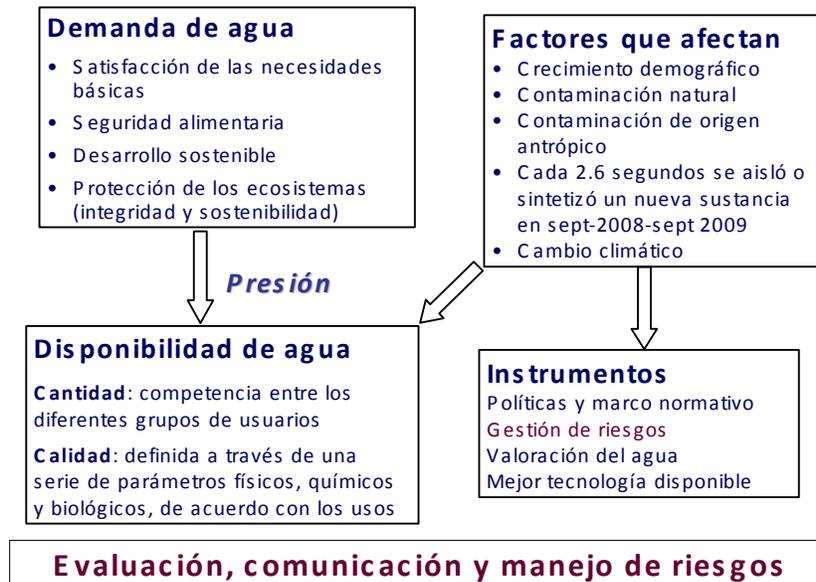


Fig. 2. Problemática general de la disponibilidad de agua con un enfoque de riesgos sanitarios y ambientales

Para dimensionar, estimar o determinar los riesgos a la salud pública asociados con la exposición a contaminantes ambientales se cuenta con herramientas tales como los estudios epidemiológicos y estudios de evaluación de riesgos.

Cada una de estas herramientas tiene alcances y limitaciones, relacionadas con: la fuente de generación o emisión del agente peligroso, características o naturaleza del agente, características del individuo expuesto, así como con las vías, dosis, frecuencia e intensidad de la exposición.

3.1.2. Naturaleza del riesgo: riesgos microbiológicos vs riesgos químicos

En la literatura es posible identificar diferentes conceptos de riesgo, en el contexto del presente trabajo, se consideran dos tipos de riesgo definidos por la Organización Mundial de la Salud (OMS):

- Riesgos tradicionales. Son los vinculados con la pobreza y deficiencias en el desarrollo, tales como la falta o limitaciones en el acceso a los servicios de abastecimiento de

agua potable y alcantarillado, servicios de limpieza urbana, vivienda, contaminación intramuros por combustión de carbón, petróleo u otros combustibles

- b) Riesgos modernos. Aquellos relacionados con el desarrollo pero que carecen de salvaguardas, significando riesgos ambientales para la salud de las comunidades potencialmente expuestas a agua contaminada, industria intensiva, empleo de plaguicidas en agricultura, contaminación atmosférica vehicular e industrial, contaminación radiactiva, entre otros tipos de contaminación.

Con relación a los riesgos tradicionales, para la protección de la salud pública el primer punto es por supuesto tener acceso a los servicios de saneamiento y agua para satisfacer las necesidades básicas, higiene personal y de la vivienda (Tabla 5).

Tabla 5. Requerimientos de agua para proteger la salud pública

NIVEL DE SERVICIO	MEDIDA DE ACCESO	NECESIDADES IDENTIFICADAS	IMPORTANCIA PARA LA SALUD
Sin acceso Frecuentemente el volumen colectado es inferior a 5 L/hab/día	Más de 1,000 metros o un tiempo total de 30 minutos para colectar agua	Consumo: no puede asegurarse Higiene: no es posible a menos que ocurra en la fuente	Muy alto
Acceso básico Es poco probable que el volumen promedio exceda 20 L/hab/día	Entre 100 y 1,000 metros o tiempo de colecta entre 5 y 30 minutos	Consumo: asegurado Higiene: Lavado de manos y es posible higiene básica para los alimentos; dificultades para el baño y lavandería a menos que ocurra en la fuente	Alto
Acceso intermedio El volumen promedio es de aproximadamente 50 L/hab/día	El agua llega a una toma en el terreno o dentro de 100 metros o en un tiempo total de colecta de 5 minutos	Consumo: asegurado Higiene: Asegurada toda la higiene personal y alimentaria básicas; podría asegurarse la lavandería y baño	Bajo
Acceso óptimo El volumen promedio es igual o mayor a 100 L/hab/día	Servicio continuo mediante red a múltiples tomas en el interior de la casa	Consumo: todas las necesidades cubierta Higiene: Todas las necesidades podrían estar cubiertas	Muy bajo

Fuente: Organización Mundial de la Salud, 2004

Lo anterior, significa que las enfermedades infecciosas de origen hídrico pueden ser prevenidas, simplemente incrementando las coberturas de agua entubada y alcantarillado, o bien mejorando los servicios, como lo demuestran los modelos tradicional y de Püss, *et al.* [2003], que estiman que el riesgo de enfermedades infecciosas intestinales de origen hídrico pueden reducirse hasta 2.78 veces (Fig. 3).

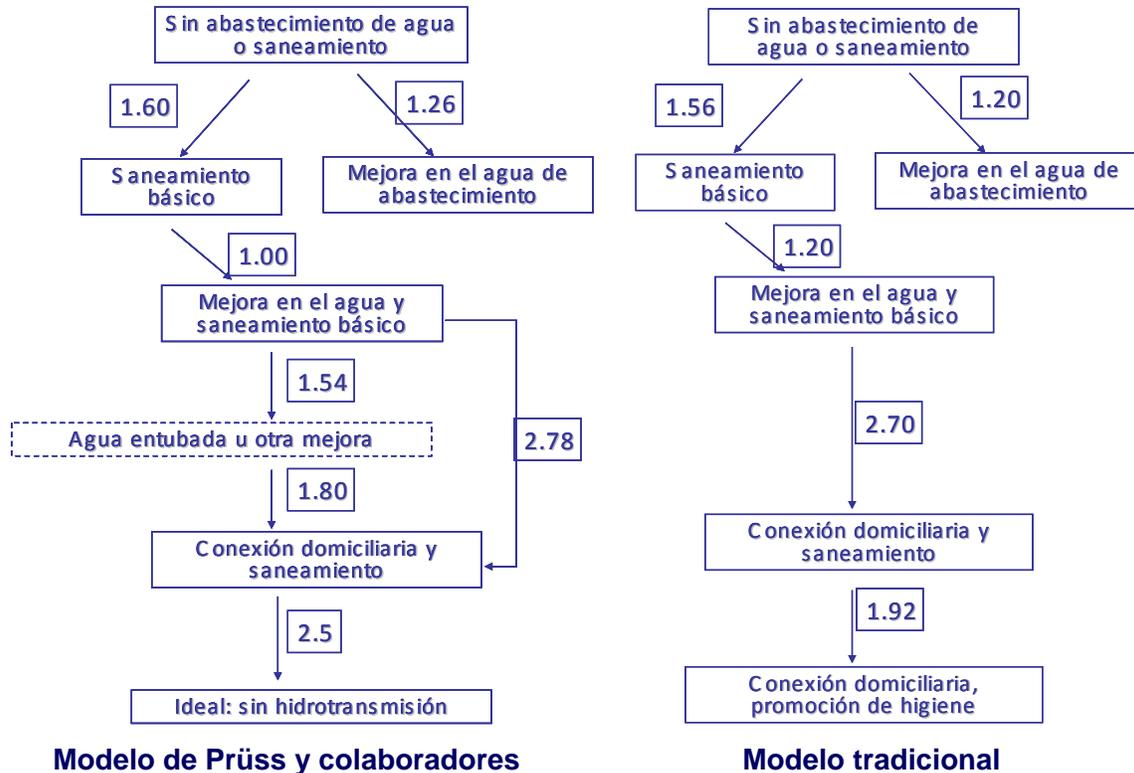


Fig. 3. Disminución de la hidrotransmisión de patógenos mediante mejoras en el saneamiento y abastecimiento de agua

Las estadísticas de mortalidad en la población general y en menores de cinco años, así como el incremento en la esperanza de vida al nacer son consistentes con estos modelos, al menos de manera cualitativa para México, como puede observarse en las Fig. 4 y Fig. 5.

Como puede observarse, la esperanza de vida está íntimamente ligada al decremento en la tasa de mortalidad infantil (Fig. 5); en entidades con coberturas de agua entubada cercana al 100% y alcantarillado superior al 90% (Distrito Federal y Guadalajara), la esperanza de vida es mayor y la tasa de mortalidad inferior, con respecto a lo que prevalece entidades con rezago en esta materia, como es el caso del estado de Chiapas.

No obstante lo anterior, la población continúa padeciendo enfermedades infecciosas de origen hídrico, asociados a agentes etiológicos diversos, entre los que se encuentran los patógenos emergentes y re-emergentes (Tabla 6).

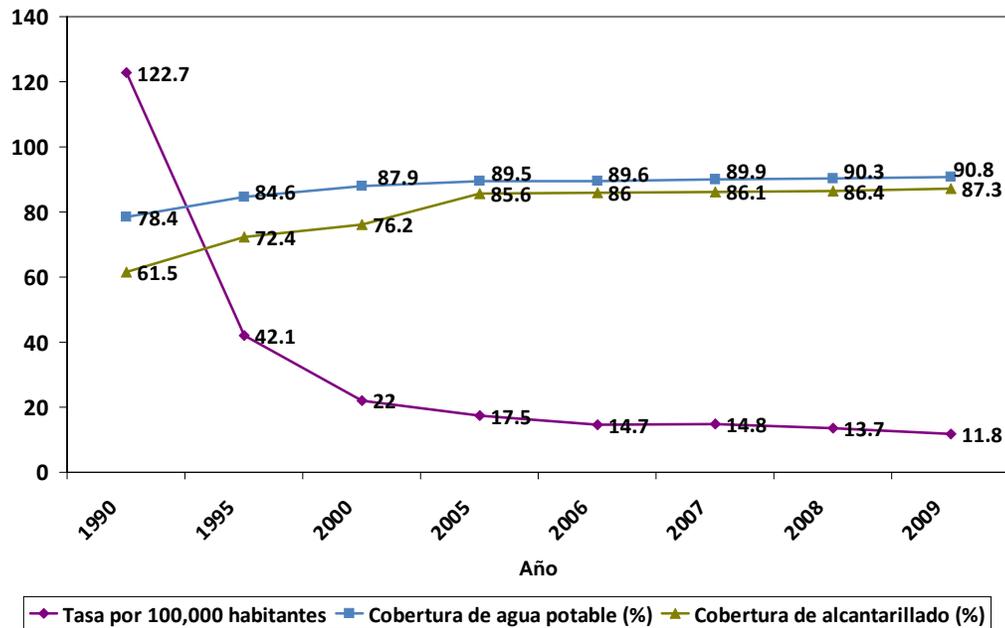


Fig. 4. Cobertura de agua potable y alcantarillado y tasa de mortalidad por enfermedades diarreicas en menores de cinco años

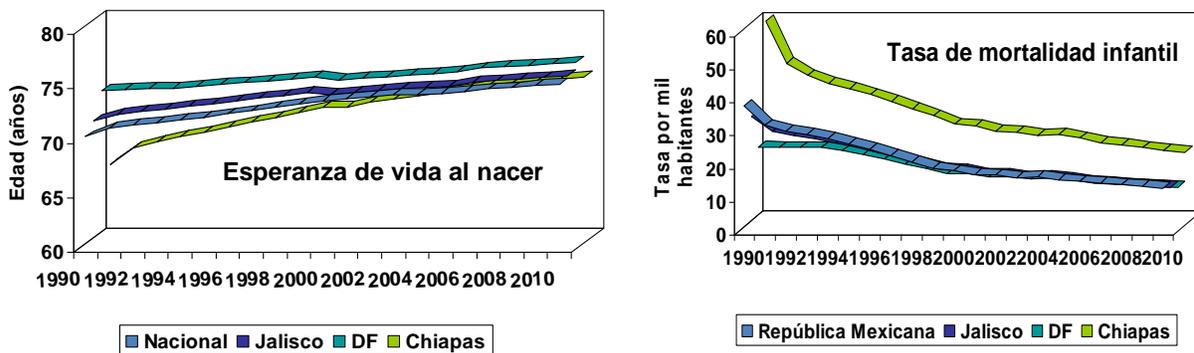


Fig. 5. Esperanza de vida al nacer y tasa de mortalidad infantil en el ámbito nacional, dos entidades con niveles de desarrollo humano alto y una entidad con nivel muy bajo

Tabla 6. Microorganismos patógenos y oportunistas emergentes, reemergentes y no regulados que han sido detectados en aguas y aguas residuales

BACTERIAS	VIRUS	PROTOZOARIOS
<i>Aeromonas hydrophila</i> <i>Escherichia coli</i> O:157 <i>Helicobacter pylori</i> <i>Mycobacterium avium</i> <i>Simonella spp</i>	Bacteriófagos. F+ Infectan cepas masculinas de <i>E. coli</i> (poseen pilis); específicos de heces. Grupos II y III son específicos de cepas humanas y, I y IV de animales	Amibas de vida libre (<i>Acanthamoeba</i>) <i>Entamoeba histolytica</i> <i>Cyclospora cayetanensis</i> <i>Microsporidia</i>

BACTERIAS	VIRUS	PROTOZOARIOS
<i>Shigella</i> spp <i>Vibrio</i> spp <i>Yersinia</i> spp	Enterovirus	<i>Cryptosporidium</i> <i>Toxoplasma gondii</i>
Métodos analíticos		
Enriquecimiento, asilamiento en medios selectivos, identificación mediante baterías de pruebas bioquímicas y confirmación serológica (ELISA)	Enriquecimiento, asilamiento en medios selectivos, identificación mediante baterías de pruebas bioquímicas y confirmación serológica (ELISA)	Enriquecimiento, asilamiento en medios selectivos, identificación mediante baterías de pruebas bioquímicas y confirmación serológica (ELISA)

Actualmente, con el desarrollo y mejora de herramientas de diagnóstico microbiológico, se sabe que de las 1,407 especies de microorganismos que se sabe causan enfermedades en seres humanos, 177 (13%) especies se consideran emergentes o reemergentes y, de ellas, 77 (37%) son virus o priones; 54 (10%), bacterias; 22 (7%), hongos; 14 (25%), protozoos y 10 (3%), helmintos. Estos patógenos no están asociados con un hospedero animal específico y pueden persistir en reservorios animales diversos, ya sean mamíferos o no, además de poseer una flexibilidad biológica que les permite aprovechar las oportunidades epidemiológicas que se presentan [Woolhouse and Sonya, 2005].

En México, ha sido clara esta transición epidemiológica, las tasas de mortalidad por enfermedades infecciosas y parasitarias han disminuido considerablemente y ha habido un incremento importante en las tasas de mortalidad por neoplasias y enfermedades del aparato circulatorio, enfermedades de los sistemas endocrino, nervioso central y periférico, sistema digestivo, o bien daños a nivel reproductivo y del desarrollo (Fig. 6).

Es en este punto, en el que la presencia de contaminantes químicos en el ambiente cobra relevancia, particularmente con respecto a los contaminantes emergentes y los no regulados, que incluyen un amplio espectro de compuestos de origen antrópico tales como los productos de síntesis química y los generados indirectamente por actividades humanas (p. ej., los subproductos de desinfección del agua y metabolitos de fármacos), así como otros productos y subproductos de origen natural (como p. ej., la geosmina y las cianotoxinas).

De particular importancia, son las emisiones y descargas continuas al ambiente relacionadas con el uso de fármacos y otros bienes de consumo como son los productos utilizados en el cuidado personal y la higiene, los cuales se reconoce son una fuente no puntual contaminación poco factible de controlar.

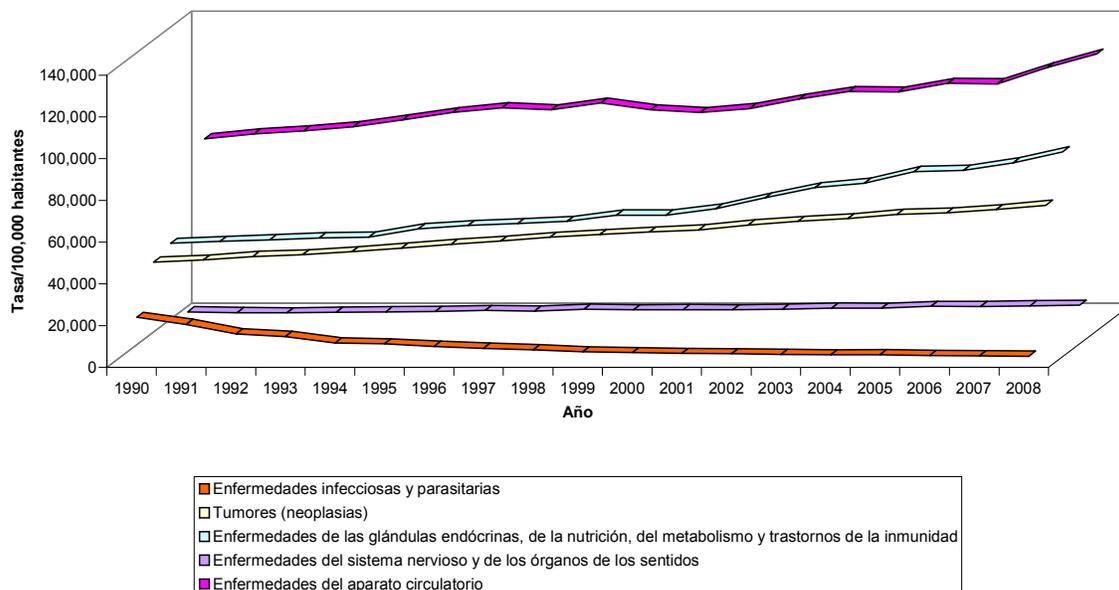


Fig. 6. Tasas de mortalidad en la población general durante el período de 1990 a 2008

Por otro lado, si bien el universo de contaminantes orgánicos pudiera parecer vasto, el de los potenciales compuestos escapa al universo conocido; Daughton [2004], plantea (con información de otro autor) un escenario hipotético de compuestos sintetizados y estableciendo algunos límites, los autores estiman más de 10^{60} diferentes estructuras que es posible obtener con un total de 30 átomos de C, N, O ó S; esta cantidad se incrementa considerablemente si se amplía el espectro a otros átomos como F, Cl, Br, I y P.

Estas consideraciones conllevan una gran incertidumbre asociada a la especificidad, sensibilidad y precisión de los métodos analíticos y de estimación de riesgos ambientales y a la salud pública aunado a que con el actual estilo de vida, es claro que la proliferación de nuevos fármacos y productos para el cuidado personal e higiene, así como los que se desarrollen para fines económicos o industriales (e incluso los desarrollos para la ciencia, la investigación y la tecnología *per se*), será un proceso en ascenso, lo que resulta un reto para la evolución y diseño de sistemas de monitoreo ambiental y biológico viables, que sean un soporte confiable para las necesidades inherentes a la protección del ambiente, la vida silvestre y la salud pública, para lo cual se identificó las siguientes necesidades [Cortés, *et al.*, 2009]:

- Identificación y caracterización de los efectos adversos a la salud pública, la vida silvestre y al ambiente en general
- Desarrollo y adaptación de tecnologías de tratamiento de aguas residuales

- Desarrollo y adaptación de tecnologías para potabilización del agua
- Asegurar en la medida de lo posible la inocuidad del agua para uso y consumo humano (siempre habrá incertidumbre)
- Evaluar los impactos de las tecnologías de tratamiento de agua, así como prevenir y mitigar efectos adversos; por ejemplo ¿qué hacer con los residuos? ¿cómo tratarlos para su disposición?

No existe un listado aceptado o definido de contaminantes emergentes en el ambiente; sin embargo, existen intentos por priorizarlos bajo criterios diversos, entre los que destacan: concentraciones en muestras ambientales, frecuencia con la cual se detectan, transporte entre los diferentes compartimientos ambientales, ubicuidad ambiental, persistencia, reactividad de la molécula original y sus metabolitos, biomagnificación a través de la cadena trófica, bioacumulación, toxicidad, peso de la evidencia para un efecto terminal, volumen de producción y remoción en los sistemas de tratamiento de agua.

Con esta base, en la primera fase del presente proyecto se identificaron 50 contaminantes (Fig. 7) de importancia potencial alta en México, destacando los volúmenes de uso, relevancia en salud pública, el interés por su acción toxicológica y el interés científico por su mecanismo de acción [Cortés, *et al.*, 2009].

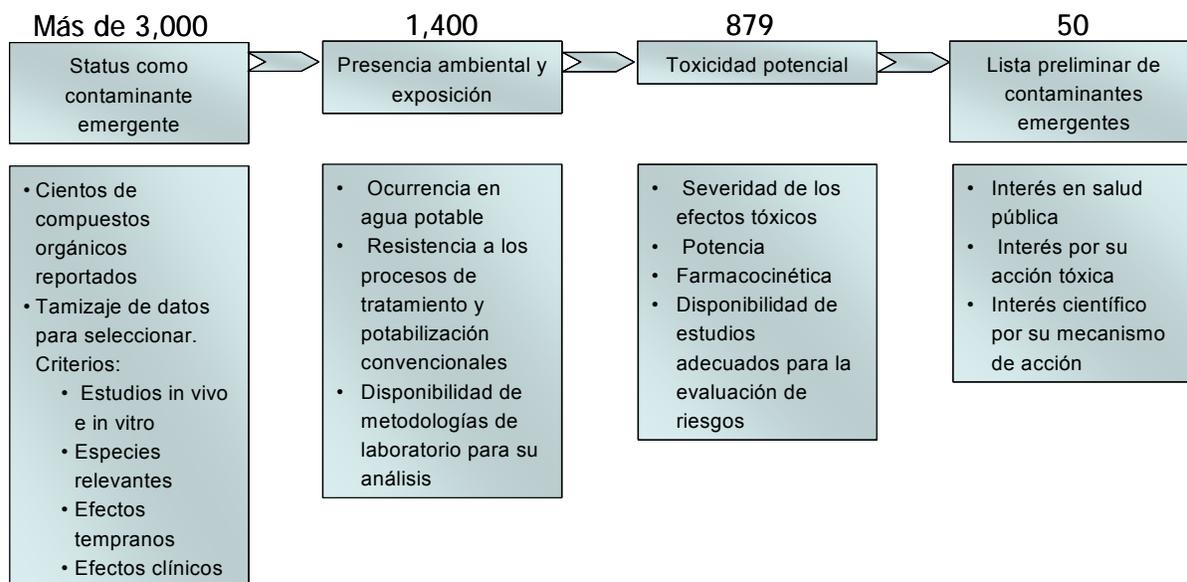


Fig. 7. Proceso de selección de 50 contaminantes emergentes prioritarios en México

Cabe señalar que de las 879 moléculas identificadas como prioritarias por su toxicidad potencial, 450 son disruptores endocrinos; 365 tienen potencial para causar toxicidad del desarrollo; 227 son neurotóxicas; 92 son carcinógenos reconocidos (hay evidencia epidemiológica de causalidad) y, 88 tienen potencial tóxico reproductivo.

Los compuestos identificados como prioritarios en México son los listados en la Tabla 7, y es importante considerar que en la actualidad los antibióticos son medicamentos regulados y su venta requiere receta médica.

Tabla 7. Listado de contaminantes químicos emergentes propuesto para México

GRUPO	OBSERVACIONES	COMPUESTOS	
Esteroides y hormonas	Endocrinos. Asociado a algunos tipos de cáncer Alta tasa de uso, p. ej., anticonceptivos, terapia de reemplazo hormonal	1 Estradiol 2 Testosterona 3 Estrona 4 α -etinilestradiol 5 β -etinilestradiol	
Productos para el cuidado personal	Uso diario y generalizado Ubicuos en el ambiente acuático Datos de monitoreo ambiental y en humanos sugieren persistencia y bioacumulación de los almizcles	6 Galaxolida 7 Tonalida y otros PCP 8 Triclosán (enjuague bucal) 9 Oxibenzona 10 DEET (repelente de insectos)	
Industriales	Ubicuos en el ambiente acuático Algunos subproductos son más tóxicos que la molécula original Algunos persistentes y bioacumulables Algunos asociados a: disrupción endocrina, cáncer y daño en sistema nervioso central y otros órganos y sistemas	11 Pentaclorofenol (PCP) 12 Nonilfenoles 13 Bisfenol A 14 Bis-2-etilhexilftalato 15 Compuestos organoestánicos (organotinas) 16 Butilbencilftalato (BuBeP)	
Fármacos	Mayor consumo en México Algunos han sido detectados en aguas residuales y efluentes tratados Liberación constante al ambiente Efectos desconocidos a organismos no blanco	17 Atenolol 18 Sulfasalazina 19 Ibuprofeno 20 Diclofenaco 21 Nimesulida 22 Ketoprofeno 23 Metil de Acido Salisílico 24 Acido mefenámico 25 Gemfibrozil 26 Acido clofibrico y metabolitos 27 Bezafibrate	28 Carbamacepina 29 Salvasartán 30 Metilprednisolona 31 Taladafilo 32 Dexametasona 33 Clorfenamina 34 Astemisol 35 Amlodipino 36 Diltiazem 37 Pentoxifilina 38 Avilamicina 39 Metoprolol 40 Citrato de sildenafilo

GRUPO	OBSERVACIONES	COMPUESTOS	
Antibióticos	Se ha demostrado selección de cepas resistentes a antibióticos circulando en el ambiente Uso indiscriminado en México, tanto en medicina humana como en veterinaria	41 Sulfametoaxol 42 Trimetroprima 43 Ciprofloxacino 44 Roxitromicina 45 Norfloxacino 46 Sulfadiazina	47 Cloranfenicol 48 Conazol 49 Imidazoles y triazoles 50 Sulfacloropiridazina

Es importante enfatizar en que para la mayoría de los contaminantes emergentes, la ocurrencia, evaluación del riesgo a la salud pública e información ecotoxicológica es prácticamente nula, o no está disponible, por lo que no puede predecirse cuáles serían sus efectos en humanos y organismos acuáticos; asimismo, cabe mencionar que este tipo de estudios se han realizado básicamente en ecosistemas acuáticos de Europa y Estados Unidos [Barceló, 2003; López de Alda y Barceló, 2008].

3.1.3. Fuentes de contaminantes químicos emergentes y no regulados

La naturaleza de los contaminantes emergentes es diversa y su presencia es básicamente el resultado de las actividades humanas, por lo que son ubicuos [Barceló, 2003]. Son sustancias farmacológica y toxicológicamente activas, sintetizadas para su uso doméstico, en agricultura, industrias, medicina humana y veterinaria, entre otras actividades, e incluyen los subproductos de fabricación y los productos de su degradación [López de Alda y Barceló, 2008].

Los contaminantes emergentes incluyen grupos como: detergentes de tipo alquilfenol etoxilado, fármacos, productos de higiene personal, aditivos de gasolinas, plastificantes y subproductos de desinfección del agua potable (Tabla 8).

Tabla 8. Grupos que dan origen a la presencia de contaminantes emergentes en el ambiente

ORIGEN	OBSERVACIONES
Fármacos	<ul style="list-style-type: none"> • Uso en medicina humana y veterinaria (ganado, aves y especies acuáticas comestibles, mascotas y animales domésticos) • Introducción al ambiente: <ul style="list-style-type: none"> ○ Excretas, sudoración y vómito ○ Disposición inadecuada de medicamentos no utilizados ○ Lixiviación al agua subterránea ○ Desechos sólidos hospitalarios y domésticos ○ Disposición de animales sacrificados ○ Descargas de aguas residuales municipales, domésticas, hospitalarias, industriales y de otro tipo de instalaciones, incluyendo descargas clandestinas ○ Disposición de medicamentos proporcionados para fines humanitarios, farmacias y médicos ○ Efluentes de plantas de tratamiento de aguas residuales descargadas en

ORIGEN	OBSERVACIONES
	<p>cuerpos receptores, en condiciones de operación adecuada o con fallas</p> <ul style="list-style-type: none"> ○ Recarga artificial de acuíferos
Drogas de abuso	<ul style="list-style-type: none"> ● Existe gran interés en determinar la presencia, el destino y los posibles efectos de las drogas más consumidas y sus principales metabolitos en el medio ambiente acuático, así como en estimar a partir de los datos ambientales obtenidos en aguas superficiales y residuales el consumo de drogas [López de Alda y Barceló, 2008]
Productos para el cuidado personal	<ul style="list-style-type: none"> ● Incluye: cosméticos, fragancias, jabones, detergentes, repelentes de insectos, bloqueadores solares, cremas para preservar la piel en buen estado y desinfectantes <ul style="list-style-type: none"> ○ Descarga de aguas residuales conteniendo compuestos regulados y no regulados ○ Descargas de aguas residuales municipales, domésticas, hospitalarias, industriales y de otro tipo de instalaciones, incluyendo descargas clandestinas de desechos sólidos
Retardantes de flama bromados	<ul style="list-style-type: none"> ● Se emplean en una gran variedad de productos comerciales, tales como muebles, plásticos, tejidos, pinturas, aparatos electrónicos, entre otros
Cloroalcanos (parafinas cloradas)	<ul style="list-style-type: none"> ● Empleo fundamentalmente como aditivos en fluidos de corte y lubricantes usados en carpintería metálica y en la industria automovilística, y como plastificantes en materiales de PVC, en pinturas, adhesivos, entre otros. los cloroalcanos de cadena corta se han incluido en la lista de sustancias prioritarias en el agua de la UE
Compuestos perfluorados	<ul style="list-style-type: none"> ● Compuestos de uso industrial que han sido utilizados durante décadas en un amplio número de sectores, y que ahora se descubren como contaminantes muy peligrosos y ampliamente distribuidos en el medio ambiente. Destacan el perfluorooctano sulfonato (PFOS) y el ácido perfluorooctanoico o PFOA. <ul style="list-style-type: none"> ○ El perfluorooctano sulfonato se ha usado como refrigerante, tensoactivo, y polímero, en preparados farmacéuticos, retardantes de llama, lubricantes, adhesivos, cosméticos, insecticidas, entre otros ○ El PFOA, se utiliza en la fabricación de fluoropolímeros (PTFE) y fluoroelástomeros (PVDF) empleados en una gran variedad de productos comerciales como tejidos, alfombras, recipientes alimentarios, y automóviles, además de en espumas antiincendios
Plaguicidas y otros agroquímicos	<ul style="list-style-type: none"> ● Uso agropecuario: incrementar la producción de alimentos. ● Incluye: fármacos, complementos alimenticios, herbicidas parasiticidas, fungicidas, hormonas de crecimiento, hormonas sexuales, anabólicos, complementos alimentarios ● Introducción al ambiente: <ul style="list-style-type: none"> ○ Aspersión de antibióticos, herbicidas, parasiticidas, fungicidas y nutrimentos ○ Disposición inadecuada de recipientes ○ Disposición inadecuada de residuos de producto ○ Lixiviación a los acuíferos ● Es importante señalar que la mayoría de los productos de degradación de plaguicidas son compuestos polares, muchos de ellos quirales
Detergentes de tipo alquilfenol etoxilado	<ul style="list-style-type: none"> ● Los alquilfenol etoxilados (APEs) pertenecen a la categoría de tensoactivos no iónicos, comúnmente conocidos desde hace más de cuarenta años por su alta eficacia, economía, así como por su facilidad de manejo y formulación. ● Los nonilfenol etoxilados (NPEs) constituyen el mayor grupo de compuestos dentro de esta categoría. Estos se utilizan principalmente en la limpieza Industrial e Institucional, detergentes domésticos, tratamiento de textiles y cuero, metalurgia,

ORIGEN	OBSERVACIONES
	<p>agroquímicos, emulsiones de polimerización, pintura, y en menor volumen</p> <ul style="list-style-type: none"> Tienen además un sinnúmero de aplicaciones diversas como por ejemplo en la industria petroquímica o papelera De acuerdo con las recomendaciones de la Comisión Europea, se prohibirá el uso de NP y NPE en: detergentes y limpiadores domésticos, productos de cuidado personal, limpieza Industrial e institucional, agentes del proceso textil, agentes de proceso del cuero y la piel, metalurgia (desengrasantes, lubricantes, aceites de corte), agentes de proceso del papel y veterinaria
Plastificantes	<ul style="list-style-type: none"> Los ftalatos son plastificantes que dan flexibilidad y durabilidad a productos del policloruro de vinilo (PCV), y su concentración en los artículos Ha sido en general de 50% en adelante del peso final del producto, de acuerdo con la flexibilidad que éste requiere. Como los plastificantes no son polimerizados dentro de la matriz del plástico, pueden desprenderse con el tiempo y el uso, y liberarse al ambiente, momento en el que puede ocurrir la exposición en los humanos, especialmente al ponerse en contacto con sustancias lipofílicas. Estos ésteres del ácido ftálico son considerados como contaminantes ubicuos en alimentos, aire, suelo y sedimentos. Los ftalatos se bioacumulan en invertebrados, peces y plantas, pero no se biomagnifican porque los animales superiores metabolizan y excretan los ftalatos eficientemente
Subproductos de desinfección del agua potable	<ul style="list-style-type: none"> Resultan de la reacción de halógenos y materia orgánica durante el proceso de desinfección de agua potable. Incluyen yodo-ácidos, bromonitrometanos, iodo-trihalometanos, formas bromadas de caarono, bromoamidas, α-bromopirrol, así como nitrosodimetilamina y nitrosaminas La pre-ozonación parece incrementar la formación de halonitrometanos

Fuente: Cortés, *et al.*, 2009

La ocurrencia de este tipo de contaminantes en efluentes domésticos ha sido reportada desde la década de 1980; no obstante, en la actualidad existe poca información de monitoreo que permita estimar la exposición humana y de las formas de vida silvestre. Las concentraciones a las que se han encontrado en aguas superficiales o en aguas subterráneas se sitúan normalmente en el rango de ng/L o mg/L, mientras que en suelos y sedimentos, en donde pueden persistir durante largos periodos de tiempo, alcanzan concentraciones de hasta g/Kg. Sin embargo, lo que ha despertado una mayor preocupación ha sido el hallazgo de algunos de ellos en fuentes de abastecimiento para uso y consumo humano [López de Alda y Barceló, 2008].

En el caso particular del agua potable, la principal preocupación no está asociada con la exposición aguda, sino con los efectos a mediano y largo plazos provocados por la exposición crónica a bajas dosis, por lo que diversos grupos de investigadores, principalmente en países industrializados de Europa, así como en Estados Unidos y Australia, han llevado a cabo estudios para identificar y cuantificar contaminantes emergentes.

En principio, el impacto de estos contaminantes en la salud pública y vida silvestre se debe a que muchas sustancias y sus metabolitos son extremadamente bioactivas y se introducen de manera inconsciente y permanente en los diferentes compartimientos ambientales, ya sea como sustancias puras o como mezclas complejas a través de diferentes rutas, especialmente a través de los efluentes de aguas residuales crudas o tratadas, ya que este tipo de contaminantes no son totalmente removidos o inactivados en los sistemas de tratamiento convencionales o por los procesos naturales de autopurificación de los cuerpos receptores (agua o suelos), alcanzando con cierta frecuencia las aguas subterráneas (Fig. 8) [Blasco and DelValls, 2008; Nikolaou, *et al.* 2007; Godfrey, *et al.*, 2007].

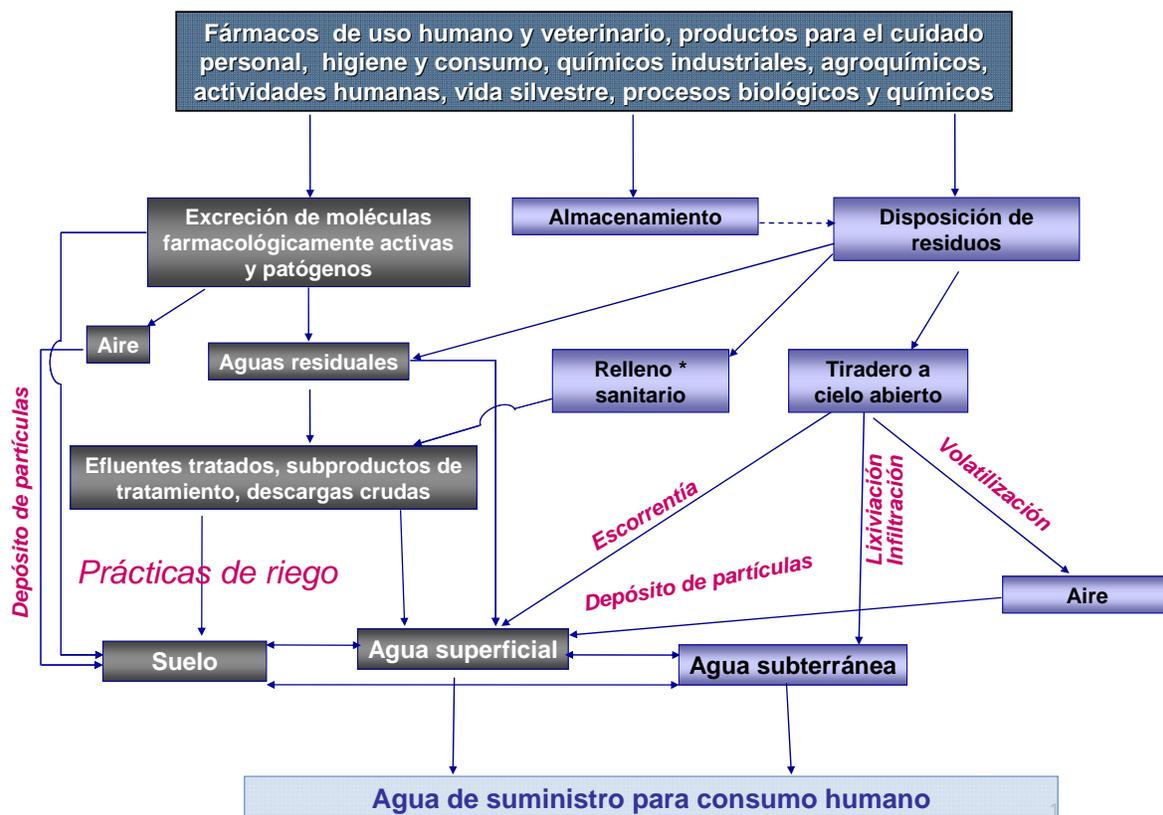


Fig. 8. Modelo conceptual de ingreso-transporte de contaminantes emergentes
Fuente: Adaptado de Blasco and DelValls, 2008

Los fármacos que se han detectado en el ambiente acuático, ya sea en su forma original o sus metabolitos, incluyen analgésicos/antiinflamatorios, antibióticos, antiepilépticos, β -bloqueadores, reguladores lipídicos, medios de contraste utilizados para radiografías de rayos X, anticonceptivos orales y esteroides entre otros, además de broncodilatadores, tranquilizantes y anabólicos [Stan and Heberer, 1997; Ternes, 1998; Halling-Sørensen *et al.*

1998; Daughton and Ternes, 1999; Richman and Castensson, 2008], y destaca el uso de antibióticos en cantidades semejantes a las de los plaguicidas en la agricultura, ganadería y silvicultura.

En particular, las principales fuentes de contaminación por fármacos, incluyen la disposición de medicamentos caducos y no utilizados en los hogares [Bound and Voulvoulis, 2005], las aguas residuales municipales [Snack, *et al.*, 2004] y de hospitales, lixiviados de rellenos sanitarios [Nikolaou *et al.* 2006], así como la disposición de residuos de drogas ilícitas y subproductos de síntesis al alcantarillado como consecuencia de la operación clandestina de las instalaciones de laboratorio o bien de comercialización, que con mucha probabilidad arrojan al sanitario materias primas crudas y drogas sintetizadas. También debe mencionarse que en el proceso de desarrollo y prueba de nuevos fármacos, implica una gran probabilidad de liberación de contaminantes al ambiente, aunque las concentraciones serían realmente muy bajas.

Desde el punto de vista de gestión de riesgo, independientemente de las fuentes de liberación al ambiente, si bien la lista de fármacos y productos para el cuidado personal, así como de la de los metabolitos y productos de degradación de ambas familias de contaminantes emergentes puede ser infinita, solamente algunas de las moléculas son consideradas prioritarias, debido a que sólo para un número determinado de éstos se ha demostrado su presencia en muestras ambientales, incluyendo fuentes de abastecimiento, subproductos de procesos de tratamiento de agua y efluentes de plantas potabilizadoras, por lo que pueden tener significado para la vida acuática y para la salud humana.

La posibilidad de que los contaminantes emergentes, que se arrojan al ambiente a través de diversas rutas, causen efectos potenciales adversos a la salud humana y la biota, se ha documentado en la literatura científica por varias décadas, aún antes de 1990 [Daughton and Ternes, 1999]; solamente que su importancia ha pasado inadvertida por razones tales como que la producción de fármacos para uso en la medicina humana se considera un impacto menor al ambiente en comparación con otros procesos industriales y con el beneficio que implica mejorar la condición de salud de los pacientes. En cuanto al uso de fármacos en medicina veterinaria, estos se dirigen principalmente a incrementar la velocidad en la ganancia de peso de ganado bovino, ovino, porcino, aves de corral y especies acuáticas, resolviendo en cierta medida las necesidades alimentarias (no necesariamente nutricias).

En comparación con otros compuestos químicos hay poca información sobre transformación y destino, especialmente acerca de biotransformación, hidrólisis y fototransformación de fármacos y productos para el cuidado personal. Su baja volatilidad sugiere que su distribución en el ambiente ocurrirá principalmente mediante transporte acuoso y dispersión a través de la

cadena alimentaria. La naturaleza polar y no volátil de los fármacos impide su liberación del ambiente acuático [Sirbu, *et al.* 2006] e incluso, en algunos casos, puede haber impacto en las aguas destinadas al uso y consumo humano [Zinder, *et al.*, 2003], sin que haya fronteras geográficas o climáticas para las sustancias sintéticas [EMEA, 2003]; p. ej., se han detectado fármacos en zonas que se considera tienen un bajo nivel de contaminación como es el caso del parque Nacional de Yellowstone en EEUU [Daughton and Ternes, 1999].

Algunas moléculas de fármacos pueden ser excretadas en su forma libre; otras son metabolizadas y dan lugar a múltiples metabolitos, lo que depende en gran medida del paciente, la especie, la dosis y la vida media del fármaco en el organismo; p. ej., en los mamíferos, el sistema oxidasa P450 microsomal es la ruta principal de transformación de fármacos con la consecuente formación de metabolitos polares, mismos que son más fácilmente excretados por los organismos [Ingelman-Sundberg, 2009; Baynes and Hodgson, 2004].

En cuanto a algunos fármacos de uso veterinario y humano, éstos son transformados a formas químicas más solubles al conjugarse con péptidos o con azúcares [Testa and Krämer, 2006; 2007]. La subsiguiente transformación de productos, esto es metabolitos y conjugados resultantes del metabolismo de las células eucariotas y procariotas, así como de alteración fisicoquímica, da lugar a una mayor diversidad de los miles de moléculas altamente bioactivas [Daughton and Ternes, 1999] en el ambiente acuático.

Al igual que en los mamíferos, la disposición metabólica de xenobióticos lipofílicos (como es el caso de muchos fármacos) en especies de vertebrados acuáticos se encuentra gobernada por reacciones de tipo fase I y fase II; la primera es un sistema monooxigenasas, reductasas e hidrolasas que agregan grupos funcionales reactivos a la molécula; la fase II usa conjugación covalente (glucuronidación), para transformar las moléculas hidrofóbicas a hidrofílicas para que puedan ser excretadas con mayor facilidad en la orina [Guarino and Lech, 1986; James, 1986].

En peces, muchas drogas y metabolitos, especialmente aquéllos con peso molecular superior a los 400 Da, se concentran más en la bilis que en sangre o grasa [Guarino and Lech, 1986].

En el caso de los antibióticos utilizados en veterinaria para promover el crecimiento y ganancia de peso de los animales, puede haber impactos graves sobre la selección de cepas de bacterias resistentes a los antibióticos empleados para el control de infecciones en humanos [Smith, *et al.* 2002; Philips, *et al.* 2004], desde luego, estas bacterias tienen el potencial de dispersarse a través del agua y los alimentos. La resistencia de los microorganismos a los antimicrobianos, ha emergido en enteropatógenos zoonóticos, bacterias comensales y bacterias patógenas de animales. Dicha resistencia a antimicrobianos emerge del uso

veterinario de este tipo de productos y la subsiguiente transferencia de genes de resistencia entre animales, productos animales y el ambiente [McEwen and Fedorka-Cray 2002].

En agua potable se ha documentado la sobrevivencia de bacterias cultivables con capacidad para diseminar a otras bacterias genes de virulencia, incluida la resistencia a antibióticos [Walia *et al.* 2004].

Una vez que los antibióticos han sido ingeridos, metabolizados y excretados por los organismos, su destino es diverso; en el caso de los antibióticos utilizados en terapia humana, éstos alcanzan los sistemas de tratamiento de aguas residuales por medio de la orina y las heces, las bajas eficiencias de remoción para este tipo de compuestos permiten su acceso a los cuerpos receptores, en donde están sujetos a varios procesos bióticos y abióticos de transformación ambiental. En cuanto a los antimicóticos y antibacterianos utilizados en la agricultura, éstos pueden llegar al ambiente acuático por procesos semejantes a los de los plaguicidas, donde la infiltración en el suelo y la biodegradación juegan sin duda un papel importante.

En general, los antibióticos que se degradan lentamente y presentan bajas tasas de adsorción en partículas de suelo y sedimento pueden ser introducidos, con relativa facilidad, al agua superficial y al agua subterránea, con lo que pueden ser transportados a grandes distancias; cabe destacar que probablemente este tipo de compuestos sean más resistentes a ser eliminados por los procesos de tratamiento de agua convencionales.

Por el contrario a los fármacos, los productos para el cuidado personal y otros productos de uso frecuente no pasan a través del cuerpo humano y otros organismos (ganado, aves y especies acuáticas) por lo que llegan al ambiente como resultado de su uso cotidiano durante las diversas actividades humanas [Sirbu, 2006]. En consecuencia, para una evaluación realista del medio acuático es necesario un estudio integrado agua subterránea-suelo/sedimento-agua superficial-suelo.

En la transformación y transporte de los contaminantes químicos, la estereoquímica y la quiralidad juegan un papel muy importante. Un compuesto químico que presenta formas quirales (imágenes de espejo, los pares de moléculas quirales se llaman enantiómeros) puede tener propiedades de dos o más distintos químicos (dependiendo del número de puntos de asimetría), pero cada uno tiene la misma composición y dos estructuras dimensionales. Esto puede ser más difícil aún, cuando se presentan isómeros de moléculas quirales complejas que presentan al menos dos centros estereogénicos (mesoisómeros), un ejemplo de estereoquímica compleja es el retardante de flama hexa-bromo-ciclododecano, que comprende seis pares de enantiómeros y cuatro mesoformas, lo que da un total de 16 esteroisómeros, que si bien tienen la misma composición, las propiedades químicas son diferentes.

3.2. HERRAMIENTAS DISPONIBLES PARA LA IDENTIFICACIÓN Y EVALUACIÓN DE RIESGOS A LA SALUD PÚBLICA ASOCIADOS CON LA EXPOSICIÓN A QUÍMICOS AMBIENTALES

La contaminación ambiental ocurre por mezclas químicas, presentes en uno o más compartimientos ambientales y que afecta a diversas comunidades o grupos poblacionales de diferentes niveles evolutivos en riesgo, lo que implica abordar un problema de alta complejidad, básicamente desde dos perspectivas, la epidemiológica y la de las metodologías de evaluación de riesgos, que requieren a su vez de una o más metodologías específicas para su estudio, considerando los siguientes puntos:

- a) Características y dimensiones del sitio de interés (p. ej., local, regional, nacional, global)
- b) Poblaciones potencialmente expuestas (humanos, flora y fauna silvestres)
- c) Recursos humanos, infraestructura y recursos financieros disponibles
- d) Infraestructura para monitoreo y análisis ambiental y biológico, debidamente acreditados y certificados ante las instancias nacionales e internacionales calificadas para este fin
- e) Información técnica sobre el sitio de interés
- f) Conocimiento de las fuentes de generación o emisión de los contaminantes de interés
- g) Datos de monitoreo ambiental referentes a los contaminantes de interés y sus metabolitos y,
- h) Información de las características fisicoquímicas y actividad biológica de los contaminantes de interés, ya sea como molécula madre o sus metabolitos

La información referente a los contaminantes de interés o sus metabolitos, incluye estudios *in vitro* e *in vivo*, y la información ambiental que se tenga de éstos dependerá de la disponibilidad de metodologías de análisis para detectar contaminantes en concentraciones traza y ultra-traza, así como de selección adecuada de los modelos biológicos utilizados para determinar los efectos farmacológicos o toxicológicos.

Mediante estudios *in vitro*, se ha demostrado el potencial de disrupción endocrina de algunos contaminantes orgánicos emergentes en concentraciones que se encuentran en el orden los pico a los nanogramos por litro de agua, en tanto que este efecto ha sido observado en estudios *in vivo*, específicamente en mamíferos como hámster, ratas y ratones, en concentraciones que van de los nano a los microgramos por litro; esto por supuesto conlleva

una gran incertidumbre si se requiere extrapolar a poblaciones humanas, pues habrá que considerar la variabilidad entre especies e intraespecie. La evidencia de los efectos en humanos, es escasa, ya que los datos que se tienen se originan en estudios de caso por exposiciones en poblaciones laborales, poblaciones altamente expuestas o exposiciones agudas accidentales y/o voluntarias (Fig. 9).

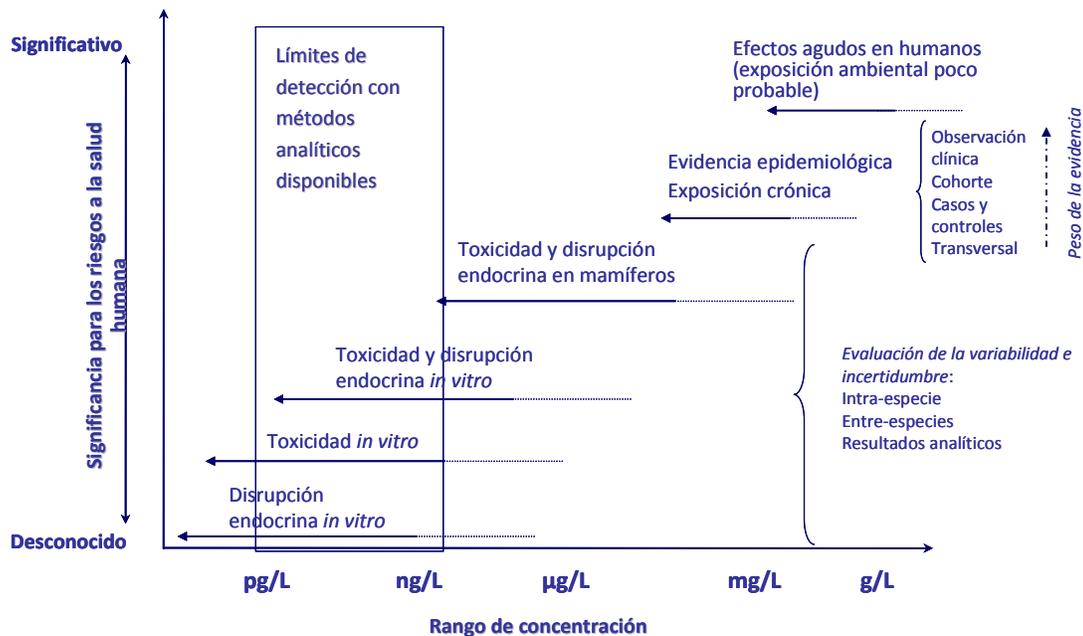


Fig. 9. Peso de la evidencia, en la evaluación de riesgos a la salud pública por exposiciones a contaminantes en agua

Desde el punto de vista de salud pública, el enfoque epidemiológico es el más conservador, siempre que se tenga un diseño cuidadoso y desarrollado con metodologías rigurosas y robustas. Con este criterio, para la Agencia de Control de Enfermedades (CDC) de los Estados Unidos, los contaminantes prioritarios en agua potable son: metil-tertbutil éter (MTBE), subproductos de desinfección (DBP's) y disruptores endocrinos (ED).

La epidemiología ambiental, además de dar información directa sobre poblaciones humanas, fortalece la protección de la salud pública de los riesgos ambientales, como consecuencia de los avances en el uso de herramientas precisas que incluyen modelos biológicos, software, métodos de diagnóstico e información disponible en la literatura. Un aspecto importante, es el peso de la evidencia; p. ej., un estudio experimental aleatorizado, puede ser considerado como un estudio de causalidad, en tanto que los estudios observacionales serán de asociación, siendo los de cohorte prospectiva los que mayor peso de la evidencia tienen y los ecológicos

los de menor peso. En la Tabla 9, se sintetizan las características de los diferentes tipos de estudios epidemiológicos en orden descendente con respecto al peso de la evidencia.

Tabla 9. Clasificación de los estudios epidemiológicos

TIPO DE ESTUDIO	ASIGNACIÓN DE LA EXPOSICIÓN	NÚMERO DE OBSERVACIONES POR INDIVIDUO	CRITERIO DE SELECCIÓN DE LA POBLACIÓN DE ESTUDIO	TEMPORALIDAD DEL ANÁLISIS	UNIDAD DE ANÁLISIS
Experimental	Controlada (aleatorizada)	Dos o más	Ninguno	Prospectivo	Individuo o grupo
Pseudo-experimental	Por conveniencia	Dos o más	Ninguno	Prospectivo	Individuo o grupo
Cohorte	Fuera del control del investigador	Dos o más	Exposición	Prospectivo o retrospectivo	Individuo
Casos y controles	Fuera del control del investigador	Una o más	Efecto	Retrospectivo	Individuo
Encuesta (transversal)	Fuera del control del investigador	Una	Ninguno	Retrospectivo	Individuo
Ecológico	Fuera del control del investigador	Dos o más	Ninguno	Retrospectivo	Grupo o población

Fuente: López y Hernández, 2007

Los estudios observacionales presentan algunas ventajas y desventajas en cuanto a su campo de aplicación, costos, fuentes de información, tiempo necesario para su desarrollo y costos (Tabla 10 y Tabla 11).

Tabla 10. Aplicabilidad de los diseños de estudios epidemiológicos observacionales

	ECOLÓGICO	TRANSVERSAL	CASOS Y CONTROLES	COHORTE
Investigación de enfermedades raras	++++	-	+++++	-
Investigación de causas raras	++	-	-	+++++
Pruebas para causa de efectos múltiples	+	++	-	+++++
Estudio de exposiciones múltiples y determinantes	++	++	++++	+++
Medición de la asociación en el tiempo	++	-	+ ^a	+++++
Medición directa de la incidencia	-	-	+ ^b	+++++
Investigación de períodos de latencia prolongados	-	-	+++	+ ^c /-

+...+++++: indica el grado de aplicabilidad; -no aplicable; a si es prospectivo; b: si está basado en población; c: si es un estudio de cohorte retrospectivo o histórico

Fuente: Department of Health and Ageing and enHealth Council

De las tablas 9, 10 y 11, se puede concluir que el desarrollo de estos estudios no es trivial y requieren recursos humanos altamente especializados, además de los costos y requerir períodos de tiempo que dependen de la magnitud de la ventana de exposición para observar un efecto ya sea temprano (uso de biomarcadores de efecto antes de que se presentes síntomas clínicos) o clínico.

Tabla 11. Ventajas y desventajas de los diseños de estudios epidemiológicos observacionales

	ECOLÓGICO	TRANSVERSAL	CASOS Y CONTROLES	COHORTE
Probabilidad de				
Sesgo de selección	No aplica	Medio	Alto	Bajo
Sesgo de recordatorio	No aplica	Alto	Alto	Bajo
Pérdidas al seguimiento	No aplica	No aplica	Bajo	Alto
Confusión	Alto	Medio	Medio	Bajo
Tiempo requerido	Bajo	Medio	Medio	Alto
Costo	Bajo	Medio	Medio	Alto

Fuente: Department of Health and Ageing and en Health Council

En algunas situaciones, en las que las aguas residuales han sido reutilizadas intencionalmente con fines potables, los estudios epidemiológicos han mostrado, en esquemas de reúso bien manejados, que no hay efectos adversos tales como incremento en los niveles de infecciones, cáncer u otras enfermedades, sugiriendo que el aumento en el riesgo se asocia con agua reciclada en condiciones deficientes o cuando hay un mal manejo del proceso. No obstante, es importante considerar los alcances y limitaciones de este tipo de estudios, principalmente por los altos costos que involucra, la complejidad y las dificultades para caracterizar la exposición (tiempo-espacio, frecuencia, exposición a múltiples contaminantes y las concentraciones en diferentes compartimientos ambientales).

Dado lo anterior, y a múltiples consideraciones éticas, una alternativa a los estudios epidemiológicos, son las metodologías de Evaluación de Riesgos a la Salud por exposición a contaminantes ambientales, siendo ésta el proceso mediante el cual se estiman los impactos potenciales de un peligro físico, químico, microbiológico o psicosocial sobre una población humana específica o un ecosistema bajo un conjunto específico de condiciones para un cierto período de tiempo.

La aplicación de esta metodología, que se remonta a la identificación y evaluación de riesgos a la salud en sitios contaminados, fue desarrollada originalmente por la Agencia para las Sustancias Tóxicas y el Registro de Enfermedades (ATSDR, por sus siglas en inglés) dependiente de la Agencia de Protección Ambiental de los Estados Unidos (US EPA, por sus siglas en inglés), y la misma USEPA, emitió una metodología alterna a la de la ATSDR, también para sitios peligrosos.

La metodología de la USEPA, estima el riesgo en salud, basándose en datos ambientales del sitio y la de la ATSDR se basa tanto en los datos ambientales como en los antecedentes de salud registrados en el área de influencia del sitio.

Conceptualmente, para llevar a cabo una evaluación de riesgos a la salud, siempre será necesario identificar las fuentes (contaminantes, concentraciones, temporalidad y localidades

potencialmente afectadas) las vías de exposición (medio, tasas de migración de contaminantes, temporalidad, pérdida y ganancia de funciones) y los receptores o población potencialmente expuesta (Fig. 10).



Fig. 10. Elementos en la evaluación de riesgos de un modelo conceptual

Dada la potencialidad de la evaluación de riesgos a la salud por factores ambientales para aplicarse en regiones diversas, algunos grupos de investigadores han llevado a cabo modificaciones y adaptaciones con la finalidad de aplicarlas lo más realísticamente posible a las necesidades y condiciones de cada país, pero básicamente estas metodologías constan de cuatro fases (Fig. 11):

- Identificación del peligro o colección de datos relevantes del sitio
- Evaluación de la exposición
- Evaluación de la toxicidad
- Caracterización del riesgo

En el proceso, se puede tener como objetivo la evaluación de riesgos a nivel individual, o bien para grupos poblacionales. Los riesgos individuales pueden ser para el individuo promedio, para los altamente expuestos o para individuos particularmente susceptibles.

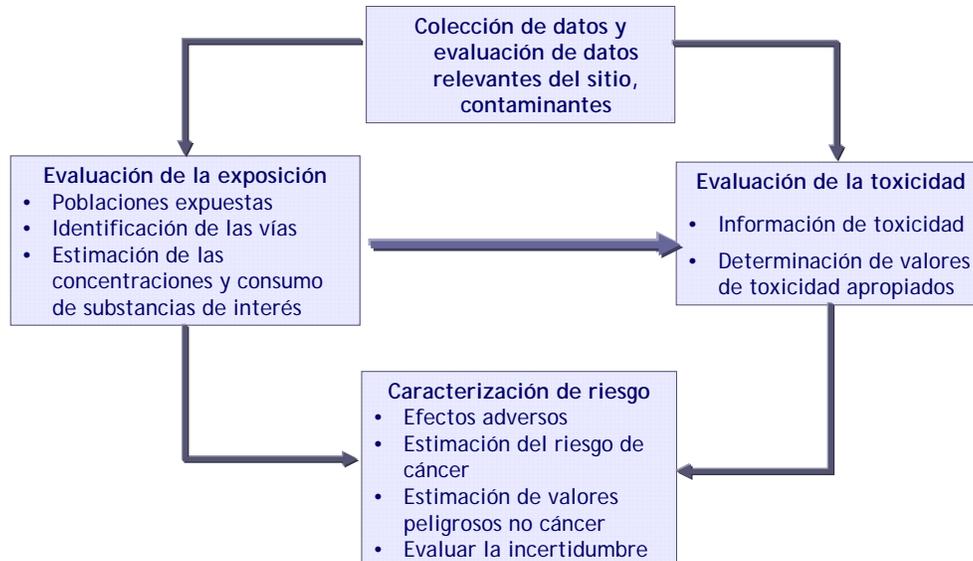


Fig. 11. Fases básicas en las metodologías de evaluación de riesgos a la salud
Fuente; USEPA, 1989

En el ámbito Federal, en Australia se dispone de diversos modelos de evaluación de riesgos tanto con fines administrativos y regulatorios como para fines de investigación: químicos industriales, agricultura y veterinaria, medicamentos y químicos utilizados en medicina, y aditivos para alimentos, contaminantes, productos de procesamiento y toxinas. El modelo utilizado para evaluar riesgos a la salud por exposiciones ambientales, consta de cinco fases (Fig. 12):

- aspectos de identificación;
- identificación del peligro;
- evaluación dosis-respuesta;
- evaluación de la exposición para una población relevante y,
- la caracterización del riesgo

Cada una de estas etapas es altamente dependiente de la anterior, y como en otras metodologías, la evaluación de la exposición involucra la frecuencia, intensidad y magnitud de dicha exposición, así como un cierto grado de incertidumbre.



Fig. 12. Modelo de evaluación de riesgos a la salud por exposiciones ambientales utilizado en Australia

Fuente: Department of Health and Ageing and Health Council, 2002

López.*et al.* (s/f), en México, proponen un modelo que como la ATSDR, utiliza información relacionada con la salud de la población blanco en el sitio, la cual incluye (Fig. 13):

- Evaluar la información física, geográfica e histórica del sitio de estudio
- Descripción de las condiciones de salud y su relación con el uso de tóxicos
- Identificación y análisis de los tóxicos utilizados
- Determinar las implicaciones del uso tóxicos en la salud, basadas en los datos disponibles sobre efectos en la salud específicos a la comunidad y otra información toxicológica y médica general
- Identificar y evaluar las rutas de exposición completas y potenciales (mecanismos de transporte ambiental y vías de exposición humana)
- Analizar el uso de tóxicos como factor de riesgo y contaminación en el área y establecer indicadores por medio contaminado. Comparación contra EMEG (valor de referencia)

- g) Determinar las conclusiones y recomendaciones concernientes a la amenaza a la salud que posee el uso de tóxicos

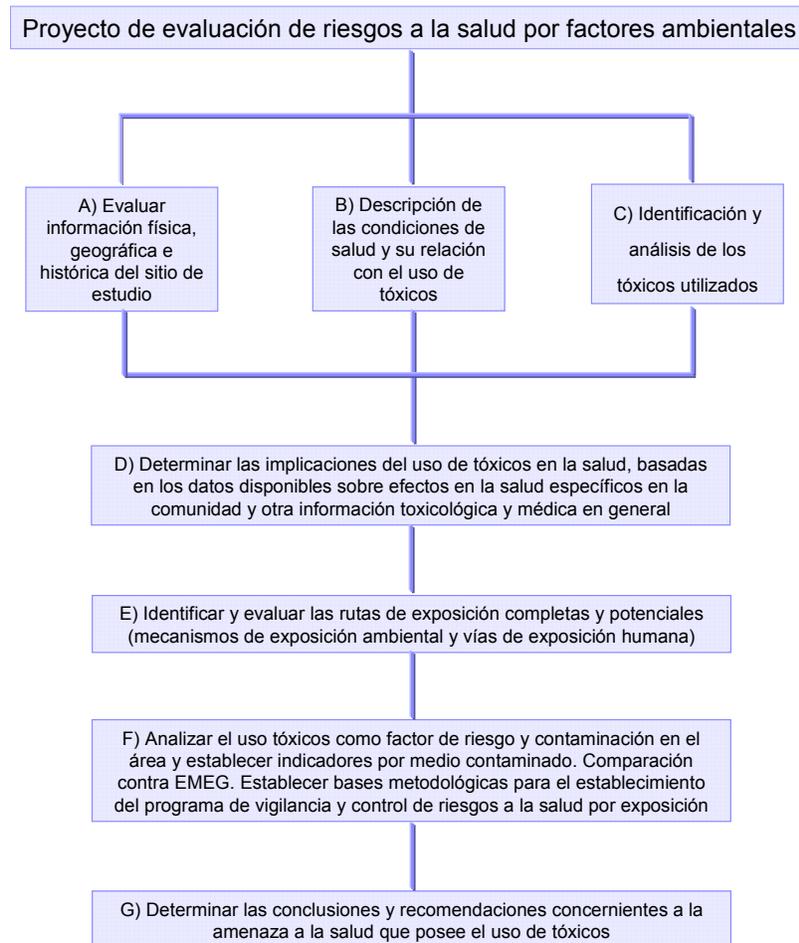


Fig. 13. Metodología de evaluación de riesgos propuesto por López, *et al.*

En todas las propuestas metodológicas, el proceso inicia con la colección y análisis de datos del sitio y con la identificación de sustancias de interés potencial a fin de determinar la relevancia de éstos para la evaluación de la toxicidad y riesgo de exposición. Con ello es posible caracterizar el riesgo de exposición, así como evaluar los elementos que conforman el modelo conceptual de evaluación (Fig. 10).

En la evaluación de datos es necesario considerar varios aspectos:

- La combinación de datos obtenidos durante el estudio y la que se encuentra en investigaciones anteriores
- La evaluación de métodos analíticos y la calidad de los datos con respecto a los límites de cuantificación de las muestras
- Evaluación de la calidad de los datos con respecto a los criterios de calidad y a los blancos
- Evaluación preliminar de los compuestos identificados
- Comparación de la contaminación potencial del sitio con los antecedentes

Desarrollar un conjunto de datos para ser usado en la evaluación de riesgo, y si es posible limitar el número de sustancias a ser evaluadas a través del proceso.

El tamizado y la ponderación toxicidad-concentración, debe hacerse para cada una de las sustancias tóxicas de interés y para cada una de las vías de exposición, de acuerdo con lo siguiente:

$$R_{ij} = (C_{ij})(T_{ij}) \quad (\text{Ec. 1})$$

En donde:

R_{ij} = factor de riesgo para el químico i en el medio j

C_{ij} = concentración del químico i en el medio j

T_{ij} = valor de toxicidad para el químico i en el medio j (por ejemplo, el factor de pendiente o 1/dosis de referencia)

$$R_j = R_{1j} + R_{2j} + R_{3j} + \dots + R_{ij} \quad (\text{Ec. 2})$$

En donde:

R_j = factor de riesgo total para el medio j

$R_{1j} + \dots + R_{ij}$ = factores de riesgo para los químicos 1 al i en el medio j

Estos cálculos son utilidad únicamente para reducir el número de químicos que deberán ser evaluados a través del procedimiento de evaluación en su totalidad.

El siguiente paso es la evaluación de la exposición, definida ésta como el contacto del organismo humano con un agente químico. Su magnitud está determinada por la medición o estimación de la cantidad de agente en los diferentes compartimentos ambientales, disponible para las fronteras o barreras de intercambio (inhalación, ingestión, dérmica) con los receptores (Fig. 14) durante un período de tiempo específico, de tal manera que la evaluación es la

determinación cualitativa o cuantitativa, de la magnitud, frecuencia, duración y ruta de exposición.

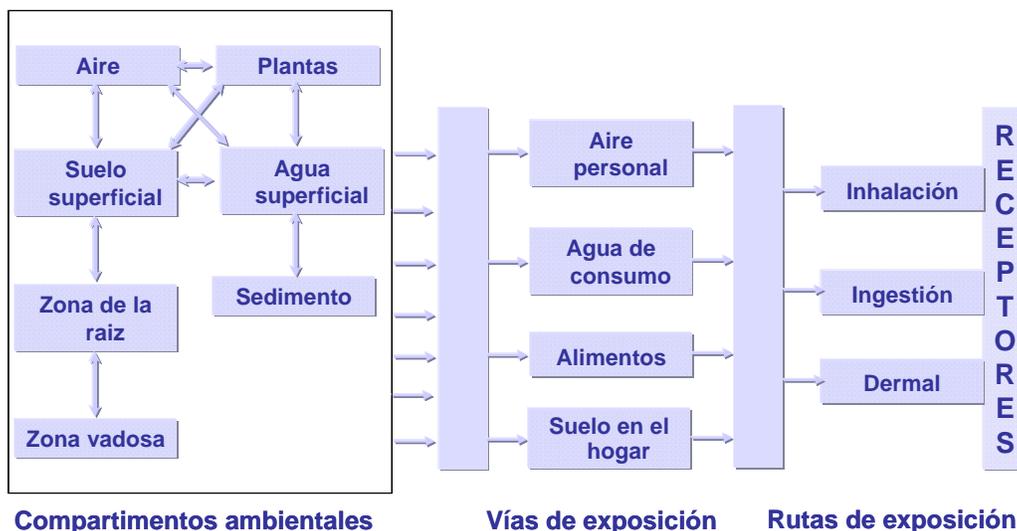


Fig. 14. Integración general de fuentes, dispersión y exposición utilizadas en los modelos de evaluación de riesgos

El procedimiento general para conducir una evaluación de la exposición se sintetiza en la Tabla 12.

Tabla 12. Pasos en la evaluación de la exposición

PASO	ACTIVIDAD
Caracterización del sitio de exposición	Características físicas del sitio Clima, meteorología, geología, vegetación, tipo de suelo, agua subterránea, localización y descripción de las aguas superficiales
	Características de las poblaciones potencialmente expuestas Determinar la población que actualmente se localiza en el sitio Datos de actividades económicas y recreativas, pesca Usos del suelo (residencial, comercial, recreativo) Tiempo que la población ha pasado y pasa en el sitio Si las actividades ocurren intra o extramuros, estacionalidad Determinar si el sitio por sí mismo puede ser usado por la población local o existen barreras que impiden el acceso
Identificación de las vías de exposición	Identificación de fuentes y medio receptor En la Tabla 13 se listan fuentes que liberan contaminantes, mecanismos de liberación y medios receptores
	Evaluación de las transformaciones y transporte en el medio que libera contaminantes Transporte (en la corriente de agua, en sedimento suspendido o en la atmósfera) Transformaciones físicas (volatilización) Transformaciones químicas (fotólisis, hidrólisis, óxido-reducción) Acumulación en uno o más medios

	<p>Algunos de los parámetros importantes específicos para cada agente químico son:</p> <ul style="list-style-type: none"> • Coeficiente de partición carbono orgánico-agua (K_{OC}) • Coeficiente de partición suelo o sedimento-agua (K_d) • Coeficiente de partición agua-octanol en equilibrio (K_{OW}) • Solubilidad • Constante de la ley de Henry • Presión de vapor • Difusividad • Factor de bioconcentración (BCF, por sus siglas en inglés) • Vida media en un medio específico <p>Identificación de los puntos y rutas de exposición Considerar los focos de población y los patrones de actividad en el área, incluyendo aquellos subgrupos que pueden ser de interés <i>Cualquier punto de contacto con el medio contaminado es un punto de exposición</i> Para las exposiciones de la población que se encuentra fuera del sitio, las concentraciones de exposición generalmente se dan en las cercanías o en dirección al viento En la Tabla 13 se presenta una matriz de rutas de exposición/población</p> <p>Integración de la información sobre las fuentes, liberación, transformaciones y transporte, puntos de exposición, y rutas de exposición Es importante señalar que en ocasiones no es posible cuantificar la exposición en los pasos subsecuentes debido a la falta de datos en los cuales estimar la liberación de un contaminante, la concentración ambiental o el consumo humano</p>
<p>Cuantificación de la exposición</p>	<p>Cuantificación de la máxima concentración razonable Hay tres tipos de variables que se utilizan para estimar la ingesta o consumo de contaminante:</p> <ul style="list-style-type: none"> • Variable relacionada con la sustancia: concentración de la exposición • Variables que describen la población expuesta: tasa de contacto, frecuencia y duración de la exposición, peso corporal • Variable determinada para la exposición: tiempo promedio <p>Consideraciones de tiempo <i>Las exposiciones a concentraciones bajas de contaminante por largos períodos de tiempo son las de mayor interés</i> En las exposiciones por corto período de tiempo, es necesario considerar: concentración del contaminante, su persistencia y la población expuesta</p> <p>Determinación de las concentraciones de exposición Las concentraciones pueden ser estimadas a través del uso de datos de monitoreo directos, o bien combinando datos de monitoreo y modelos de transformación y transporte de contaminantes</p> <p>Estimación de las concentraciones de exposición para cada uno de los medios</p> <ul style="list-style-type: none"> • Agua potable • Suelo • Agua superficial, considerando tiempo y espacio • Sedimentos • Alimentos <p>Estimación de la ingestión de químicos Ver ecuación genérica (Tabla 15).</p>

Tabla 13. Fuentes frecuentes de liberación de contaminantes químicos en sitios en los cuales no se ha llevado a cabo ninguna medida de remediación

MEDIO RECEPTOR	MECANISMO DE LIBERACIÓN	FUENTE DE LIBERACIÓN
Aire	Volatilización	Aguas superficiales Agua superficial contaminada Superficie del suelo contaminado Cuenca contaminada
	Generación de polvos	Superficie de suelo contaminada Pilas de desecho
Agua superficial	Escorrentía	Superficie de suelo contaminado
	Flujo eventual de agua	Aumento de los volúmenes de agua en lagos y lagunas Derrames, fugas de contenedores
	Vertido	Descargas de aguas residuales sin tratamiento
Agua subterránea	Lixiviación	Desechos superficiales o enterrados Suelo contaminado
Suelo	Lixiviación	Desechos superficiales o enterrados
	Escorrentía	Superficies de suelos contaminados
	Flujo eventual de agua	Aumento de los volúmenes de agua en lagos y lagunas Derrames, fugas de contenedores
	Generación/depósito de polvos	Superficies de suelos contaminados Desechos
Sedimentos	Escorrentía, flujos eventuales de agua	Desechos superficiales: lagunas, fuentes, contenedores Superficies de suelos contaminados
	Lixiviación	Desechos superficiales o enterrados Suelos contaminados
	Vertido	Descargas de aguas residuales sin tratamiento
Biota	Toma (contacto directo, ingestión, inhalación)	Suelo contaminado, agua superficial, sedimento, agua subterránea o aire

Tabla 14. Matriz de rutas potenciales de exposición

MEDIO DE EXPOSICIÓN/ RUTA DE EXPOSICIÓN	POBLACIÓN RESIDENCIAL	POBLACIÓN COMERCIAL/INDUSTRIAL	POBLACIÓN RECREATIVA
Agua subterránea			
Ingestión	L	A	--
Contacto dérmico	L	A	--
Agua superficial			
Ingestión	L	A	L, C
Contacto dérmico	L	A	L, C
Sedimento			
Ingestión incidental	C	A	C
Contacto dérmico	C	A	L, C
Aire			
<i>Inhalación de sustancias en fase de vapor</i>			
Intramuros			
Extramuros	L	A	--

MEDIO DE EXPOSICIÓN/ RUTA DE EXPOSICIÓN	POBLACIÓN RESIDENCIAL	POBLACIÓN COMERCIAL/INDUSTRIAL	POBLACIÓN RECREATIVA
<i>Inhalación de partículas</i>	L	A	L
Intramuros	L	A	--
Extramuros	L	A	A
Suelo/polvo			
Ingestión incidental	L	A	L, C
Contacto dérmico	L	A	L, C
Alimentos			
<i>Ingestión</i>			
Pescados y mariscos	L	--	L
Carne	L	--	L
Productos frecuentes	L, C	--	L
Huevo	L	--	L
Vegetales	L	--	L

L = La exposición ocurre durante todo el período de vida; C = La exposición en niños puede ser significativamente más alta; A = Exposición para adultos (las exposiciones más altas ocurren probablemente durante las actividades ocupacionales); -- = La exposición de la población por esta vía o ruta probablemente no ocurra

Tabla 15. Ecuación genérica para el cálculo de la ingestión de químicos

$I = C \times \frac{CR \times EFD}{BW}$	
En donde:	
<i>I</i>	= Ingesta; la cantidad de contaminante químico que traspasa la barrera del organismo (mg/kg de peso corporal-día)
Variable relacionada con el químico	
<i>C</i>	= Concentración del químico, la concentración promedio que está en contacto durante el período de exposición (p. ej., mg/litro de agua)
Variables que describen a la población expuesta	
<i>CR</i>	= Tasa de contacto; la cantidad del medio contaminado que está en contacto por unidad de tiempo o evento (p. ej., litros/día)
<i>EFD</i>	= Frecuencia y duración de la exposición; describe cuánto y con qué frecuencia ocurre la exposición. Casi siempre se calcula usando dos términos (EF y ED)
	<i>EF</i> = Frecuencia de la exposición (días por año)
	<i>ED</i> = Duración de la exposición (años)
<i>BW</i>	= Peso corporal; es el promedio del peso corporal durante el período de exposición (kg)
Variables determinadas por la evaluación	
<i>AT</i>	= Tiempo promedio; período promedio de la exposición (días)

Una vez evaluada la exposición, se lleva a cabo la evaluación de la toxicidad a fin de ponderar el peso de la evidencia disponible sobre el potencial que tienen los contaminantes en particular para causar efectos en la salud de la población expuesta, permite obtener cuando es posible, una estimación de la relación entre la magnitud de la exposición al contaminante y el incremento en la probabilidad y/o severidad de los efectos.

Esta evaluación consiste en:

- a) Análisis de información cualitativa y cuantitativa para las sustancias a ser evaluadas. Datos en humanos, en animales y otra información de soporte
- b) Identificar los períodos de exposición para los cuales los valores de toxicidad son necesarios
- c) Considerar los valores de toxicidad para efectos no carcinogénicos
 - Dosis de referencia crónica (RfD). Es una estimación del nivel de exposición diario para la población humana, incluyendo subpoblaciones sensibles, sin que haya probables efectos deletéreos durante la vida. Los RfD's se desarrollaron específicamente para proteger de la exposición a contaminantes durante plazos largos
 - Nivel en el cual no existen efectos adversos observables (NOAEL, por sus siglas en inglés), este es un dato clave obtenido de estudios dosis-respuesta
 - Mínimo nivel en el cual se presentan efectos observables (LOAEL, por sus siglas en inglés)
 - El uso del NOAEL y del LOAEL requiere incluir factores de incertidumbre (UF, por sus siglas en inglés) adicionales
 - UF de 10. Variación dentro de la población, esto es protección de subpoblaciones sensibles (niños, ancianos, mujeres embarazadas)
 - UF de 10. Extrapolación de animales a humanos. Este factor considera la variabilidad entre humanos y otros mamíferos
 - UF de 10. Cuando el NOAEL se deriva de estudios subcrónicos en lugar de un estudio crónico como base para una RfD crónica
 - UF de 10. Extrapolación, cuando se utiliza el LOAEL en lugar del NOAEL
 - También se utiliza un factor de modificación (MF, por sus siglas en inglés), va de >0 a 10. Se incluye para reflejar una evaluación profesional cualitativa de las incertidumbres en el estudio que se considere crítico y en la base de datos completa del químico, no haya factores de incertidumbre explícitos. El valor base es 1
- d) Determinar los valores de toxicidad para efectos carcinogénicos
- e) Síntesis de la información de toxicidad

El paso final es la caracterización del riesgo, esto es, revisar los resultados de toxicidad y evaluaciones de exposición, cuantificar los riesgos para cada una de las sustancias de interés

o para sustancias múltiples, combinar los riesgos a través de las diferentes vías de exposición (Fig. 15).

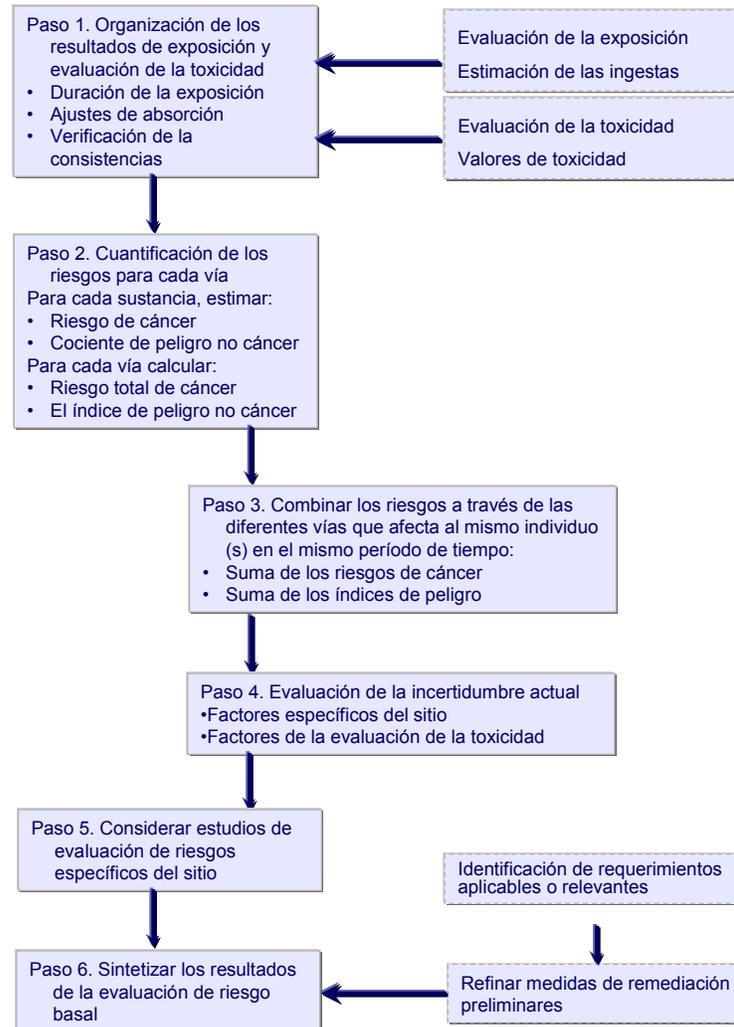


Fig. 15. Proceso de caracterización del riesgo

Las ecuaciones para cuantificar el cociente e índice de peligro, y el exceso de riesgo de cáncer se presentan a continuación.

a) Cociente de peligro de efectos sistémicos o no carcinogénicos

La medida utilizada para describir el potencial de toxicidad no carcinogénica de una sustancia, no está expresada como la probabilidad de que un individuo sufra un efecto adverso, así, el potencial para efectos no carcinogénicos se evalúa comparando un nivel de exposición

durante un período especificado, con la dosis de referencia derivada de un período similar. Si el nivel de exposición excede el umbral ($E/RfD > 1$), debe haber atención en los efectos no carcinogénicos.

$$CPNC = \frac{E}{RfD}$$

En donde:

CPNC = Cociente de peligro no cáncer

E = Nivel de exposición (o ingesta)

RfD = Dosis de referencia

E y RfD se expresan en las mismas unidades y representan el mismo período de exposición (por ejemplo, crónico, subcrónico o corto plazo).

b) *Índice de peligro de efectos no cáncer*

Para evaluar el potencial total de efectos no carcinogénicos debidos a más de una sustancia, se calcula el índice de peligro. Esta es una estimación que asume que las exposiciones simultáneas a concentraciones menores al umbral de varias sustancias, puede dar lugar a efectos adversos a la salud; también asume que la magnitud de dichos efectos serán proporcionales a la suma de las exposiciones subumbral para exposiciones aceptables. Si el índice es mayor que la unidad, hay peligro de efectos no cáncer en la población expuesta.

$$HI = E_1/RfD_1 + E_2/RfD_2 + \dots + E_i/RfD_i$$

En donde:

HI = Índice de peligro no cáncer

E_i = Nivel de exposición o ingesta para el tóxico 1 al i

RfD_i = Dosis de referencia para el tóxico 1 al i ; y

E y RfD se expresan en las mismas unidades y representan el mismo período de exposición.

El índice de peligro crónico para efectos no cáncer, se obtiene substituyendo el nivel de exposición (o ingesta) E_i , por la ingesta crónica diaria CDI_i , calculada en la evaluación de la exposición para cada sustancia y cada vía de exposición, de manera análoga se puede calcular el índice de peligro subcrónico

c) *Cálculo del riesgo de cáncer para sustancias individuales*

En este caso, se estima el incremento en la probabilidad de que un individuo desarrolle cáncer durante el período de vida como resultado de la exposición a un carcinógeno potencial.

El factor de pendiente se aplica para convertir la ingesta promedio diaria (*CDI*) de la sustancia durante el período de vida. Debido a que en la mayoría de los casos las exposiciones ambientales son a bajas dosis, se asume que en la curva de la relación dosis-respuesta será lineal en la porción de bajas dosis en el modelo multi-estadios, así el factor de pendiente es una constante y el riesgo estará directamente relacionado a la ingesta.

$$Riesgo = CDI \times SF$$

En donde:

Riesgo = La probabilidad adimensional de que un individuo desarrolle cáncer
CDI = Ingesta crónica promedio diaria por un período de 70 años (mg/kg-día)
SF = Factor de pendiente, expresado en (mg/kg-día)⁻¹

Los efectos carcinogénicos de sustancias múltiples se estiman con la siguiente ecuación, que asume que las ingestas de las sustancias individuales son pequeñas.

$$Riesgo_T = \sum Riesgo_i$$

En donde:

Riesgo_T = El riesgo total de cáncer, expresado como probabilidad adimensional
Riesgo_i = El riesgo estimado para la *i*ésima sustancia

Es indispensable señalar que un componente muy importante en la evaluación de la exposición es la incertidumbre, esto es, la decisión se debe basar en las fuentes y grado de incertidumbre asociados a la estimación de la exposición, por ejemplo:

- Muestreo y análisis ambiental
- Transformaciones y transporte de contaminantes. Considerar que las sustancias tóxicas en peces están en equilibrio con las concentraciones en el agua puede dar origen a una ligera sobreestimación de la exposición
- Estimación de los parámetros de exposición:
 - Subestimación moderada. Estimar la exposición con base en los parámetros estándar o convenidos sobre: peso corporal, período de exposición, esperanza de vida al nacer, características de la población, estilo de vida, pueden no ser representativas de la población de estudio
 - Sobreestimación moderada. Asumir que la cantidad ingerida o que entra al organismo es constante y representativa de la población expuesta

- Sobreestimación moderada a alta. Asumir que la exposición es diaria a través de toda la vida para los residentes
- Sobreestimación moderada a alta. Usar datos “hot spot” de suelo como límite superior de la exposición

3.3. TRANSFORMACIÓN Y TRANSPORTE O MOVILIDAD AMBIENTAL DE CONTAMINANTES QUÍMICOS EN LA EVALUACIÓN DE LA EXPOSICIÓN

La exposición potencial, puede ser determinada mediante diferentes metodologías, que incluyen evaluaciones cualitativas que indican peligro del potencial para la exposición; índices de exposición; algoritmos para tamizaje que proporcionan indicación cuantitativa de la exposición y modelos complejos y aproximados a la realidad como son los utilizados en las evaluaciones de riesgos. Entre los determinantes de la exposición se encuentran las propiedades fisicoquímicas de los contaminantes, pues de éstos dependen sus transformaciones y transporte o movilidad ambiental:

- Adsorción a sólidos y sedimentos (K_d o K_{oc})
- Vida media en los diferentes compartimientos ambientales (DT_{50} o t_{50})
- Presión de vapor
- Constante de la ley de Henry
- Solubilidad en agua
- Hidrofobicidad
- Disociación

Esta información puede ser obtenida de bases de datos obtenidas en ensayos experimentales, o bien en literatura en la que se reportan estimaciones o aproximaciones predictivas. La complejidad de las técnicas con las cuales se obtiene la información es variable y va desde el uso de modelos de regresión lineal simple a aquéllas que se basan en técnicas de análisis multivariado que utilizan descriptores moleculares complejos. Boxall *et al.* [2007], presentan una recopilación de relaciones estadísticas para estimar la movilidad de contaminantes emergentes (Tabla 17).

Para la evaluación de la exposición y del potencial toxicológico de los contaminantes, es necesario estimar la posibilidad de éstos se encuentren en uno o más compartimientos ambientales, con base en los principios fisicoquímicos de cada sustancia; esto es, una vez que un compuesto químico es emitido al ambiente, ya sea en fase gaseosa, sólida o en solución, no permanecerá estático necesariamente, por el contrario, dependiendo de sus características

fisicoquímicas y vida media de reacción en agua, suelo y atmósfera, será más o menos probable encontrarlo en uno o más compartimientos ambientales, como han propuesto MacKay *et al.* [1996]. Así, p. ej., la fracción de la población que reside en las cercanías de las descargas de aguas residuales y en algunas zonas de los cuerpos receptores, están potencialmente más expuestas a contaminantes a través de diferentes rutas, que quienes viven a mayor distancia.

Tabla 16. Relaciones estadísticas individuales, para movilidad de contaminantes emergentes (K_{oc})

PARÁMETRO DE ENTRADA	RELACIÓN	PREDICCIÓN ESPACIAL/CLASES QUÍMICAS
K_{ow}	$\text{Log } K_{oc} = 0.903 \text{ log } K_{ow} + 0.094$	Amplia variedad
K_{ow}	$\text{Log } K_{oc} = 0.679 \text{ log } K_{ow} + 0.663$	Amplia variedad
K_{ow}	$\text{Log } K_{oc} = 0.544 \text{ log } K_{ow} + 1.377$	Variedad, principalmente plaguicidas
K_{ow}	$\text{Log } K_{oc} = 0.810 \text{ log } K_{ow} + 0.100$	Hidrofóbicos
K_{ow}	$\text{Log } K_{oc} = 0.520 \text{ log } K_{ow} + 1.020$	No hidrofóbicos
K_{ow}	$\text{Log } K_{oc} = 1.030 \text{ log } K_{ow} - 0.610$	Amplia variedad
K_{ow}	$\text{Log } K_{oc} = 0.630 \text{ log } K_{ow} + 0.900$	Fenoles sustituidos, anilinas, nitrobenzenos, benzonitrilos clorados
K_{ow}	$\text{Log } K_{oc} = 0.470 \text{ log } K_{ow} + 1.090$	Plaguicidas, acetamidas, carbamatos, ésteres, fenil-ureas, fosfatos, triazinas, triazoles y uracilos
K_{ow}	$\text{Log } K_{oc} = 0.545 \text{ log } K_{ow} + 0.943$	Ureas
K_{ow}	$\text{Log } K_{oc} = 0.433 \text{ log } K_{ow} + 0.919$	Carbamatos
K_{ow}	$\text{Log } K_{oc} = 0.402 \text{ log } K_{ow} + 1.071$	Plaguicidas
K_{ow}	$\text{Log } K_{oc} = 0.904 \text{ log } K_{ow} - 0.539$	PAH's, aromáticos
K_{ow}	$\text{Log } K_{oc} = 0.937 \text{ log } K_{ow} - 0.006$	Triazinas
K_{ow}	$\text{Log } K_{oc} = 1.029 \text{ log } K_{ow} - 0.180$	Hidrocarburos clorados, plaguicidas
K_{ow}	$\text{Log } K_{oc} = 1.000 \text{ log } K_{ow} - 0.210$	PAH's, aromáticos
K_{ow}	$\text{Log } K_{oc} = (-0.508 \text{ log } WS + 0.953 - Fc)$	Amplia variedad
WS	$\text{Log } K_{oc} = -0.55 \text{ log } WS + 3.64$	Variedad, principalmente plaguicidas
WS (mg/L)	$\text{Log } K_{oc} = 0.51[(\text{log } WS - 0.01 (\text{MP } 0.25))] + 0.8$	Variedad, principalmente plaguicidas
WS (fracción mol)	$\text{Log } K_{oc} = -0.83 \text{ log } WS - 0.01 (\text{MP } 25) - 0.93$	PAH's, hidrocarburos clorados, plaguicidas
WS (moles/L)	$\text{Log } K_{oc} = -0.380 \text{ log } WS + 1.177$	Ureas
WS (moles/L)	$\text{Log } K_{oc} = -0.410 \text{ log } WS + 0.978$	Carbamatos
WS (mg/L)	$\text{Log } K_{oc} = -0.356 \text{ log } WS + 3.010$	Plaguicidas
WS ($\mu\text{g/L}$)	$\text{Log } K_{oc} = -0.686 \text{ log } WS + 4.273$	PAH's, PAH's heterocíclicos, aminas aromáticas, hidrocarburos clorados
WS ($\mu\text{g/L}$)	$\text{Log } K_{oc} = -0.580 \text{ log } WS + 4.240$	Hidrocarburos no polares
WS ($\mu\text{g/L}$)	$\text{Log } K_{oc} = -0.557 \text{ log } WS + 4.277$	Hidrocarburos clorados
WS	$\text{Log } K_{oc} = \text{log } WS + 0.440$	PAH's, aromáticos

K_{ow} : coeficiente de partición octanol agua; K_{oc} :

WS: Solubilidad en agua

Existen factores propios a la naturaleza química de los contaminantes que pueden influir en su transporte y destino en el ambiente, como son: la solubilidad en agua, constante de la ley de Henry, coeficiente de partición carbono orgánico, coeficiente de partición octanol/agua, difusividad, factor de bioconcentración, tasas de transformación y degradación, y vida media; en agua u otros medios, por ejemplo:

- Los compuestos muy solubles en agua se adsorben con baja afinidad a los suelos, por lo que son rápidamente transportados desde el suelo contaminado hasta los cuerpos de agua superficial e incluso subterránea; y,
- Cuando la presión de vapor de un contaminante es alta con respecto a su solubilidad en agua, la constante de la ley de Henry (H_c) también es alta y el compuesto se evaporará e integrará a la atmósfera; así, un contaminante cuya constante de Henry es alto, tiene mayor posibilidad de volatilizarse que de permanecer en agua y esto sugiere que la inhalación es la vía de exposición, en tanto que si el contaminante químico tiene mayor solubilidad en agua con respecto a su presión de vapor, éste se disuelve principalmente en agua [IEH, 2004].

La Agencia para el Registro de Sustancias Tóxicas y Enfermedades de los Estados Unidos (ATSDR, por sus siglas en inglés), propone algunos rangos de la constante de la ley de Henry y del coeficiente de partición carbón orgánico (K_{oc}) para calificar la volatilidad, capacidad de sorción a suelo y tendencia a mantenerse en solución de diferentes sustancias químicas (tablas 17 a la 19).

Tabla 17. Rangos de la constante de la ley de Henry para definir la volatilidad de un compuesto químico

VOLATILIDAD	RANGO DE VALORES (atmm^3/mol)	VOLATILIDAD	RANGO DE VALORES (atmm^3/mol)
No volátil	$<3 \times 10^{-7}$	Volatilidad moderada	1×10^{-5} a 1×10^{-3}
Baja volatilidad	3×10^{-7} a 1×10^{-5}	Alta volatilidad	$>1 \times 10^{-3}$

Fuente: ATSDR, 2005

Tabla 18. Rangos del coeficiente de carbono orgánico para definir la capacidad de sorción de compuestos orgánicos

SORCIÓN A SUELO	RANGO DE VALORES DE K_{oc} (mL/g de C_{org})	SORCIÓN A SUELO	RANGO DE VALORES DE K_{oc} (mL/g de C_{org})
Muy débil	<10	Moderada a fuerte	1,000 a 10,000
Débil	10 a 100	Fuerte	10,000 a 100,000
Moderada	100 a 1,000	Muy fuerte	$>100,000$

Fuente: ATSDR, 2005

Los parámetros de destino ambiental de los contaminantes (K_{oc} , K_{ow} y la constante de la ley de Henry), pueden ser utilizados cuando los cuerpos de almacenamiento de agua,

conteniendo especies acuáticas que pueden bioconcentrar contaminantes químicos y sedimentos a los cuales dichos químicos se adsorben, es fuente de abastecimiento. Estos tres parámetros permiten estimar el potencial de bioconcentración, de adsorción a sedimentos o suelo, y evaporarse del agua, respectivamente [Walker, 1995], como se presenta en la Tabla 20.

Tabla 19. Estimación de la tendencia de un compuesto para permanecer en solución

CONSTANTE DE LA LEY DE HENRY	COEFICIENTE DE PARTICIÓN OCTANOL/AGUA	TENDENCIA A PERMANECER EN SOLUCIÓN
$> 1 \times 10^{-4}$	>4	Baja
$\geq 1 \times 10^{-4}$	2.5 a 4	Media o posible
$< 1 \times 10^{-4}$	<2.5	Alta

Fuente: ATSDR, 2005

Tabla 20. Parámetros de destino ambiental de los contaminantes emergentes y potencial de bioconcentración

Log K_{ow}	POTENCIAL DE BIOCONCENTRACIÓN	K_{oc}	POTENCIAL DE SORCIÓN	CONSTANTE DE LA LEY DE HENRY	POTENCIAL DE EVAPORACIÓN
<3	Baja	$<2,700$	Baja	$>10^{-2}$	Alta
3 – 8	Moderada a alta	$>2,700$	Alta	$10^{-2} - 10^{-7}$	Moderada
>8	Baja			$<10^{-7}$	Baja

Fuente: NAP, 1999

Con los datos de los parámetros (Los parámetros de destino ambiental de los contaminantes (K_{oc} , K_{ow} y la constante de la ley de Henry), pueden ser utilizados cuando los cuerpos de almacenamiento de agua, conteniendo especies acuáticas que pueden bioconcentrar contaminantes químicos y sedimentos a los cuales dichos químicos se adsorben, es fuente de abastecimiento. Estos tres parámetros permiten estimar el potencial de bioconcentración, de adsorción a sedimentos o suelo, y evaporarse del agua, respectivamente [Walker, 1995], como se presenta en la Tabla 20.

Tabla 19), es posible estimar el potencial de los contaminantes para permanecer en los almacenamientos de agua potable:

- Alto potencial para permanecer en agua (baja bioconcentración, adsorción y potencial de evaporación): acetanilidas, fenoles, triazinas y ureas
- Moderado potencial para permanecer en el agua (moderada bioconcentración, adsorción o potencial de evaporación): haluros alifáticos (aldrín, dieldrín y hexaclorobutadieno pueden bioconcentrarse o adsorberse a suelo o sedimento), haluros aromáticos (el DDE puede bioconcentrarse o adsorberse a suelo), hidrocarburos aromáticos, ésteres de ácido carbámico, éteres, halofenoles, hidracinas, nitroaromáticos, fosforotioatos, fosforoditioatos y fosfortioatos

- Bajo potencial para permanecer en el agua (moderada bioconcentración, adsorción pero alto potencial de evaporación): haluros alifáticos (1,1-dicloropropeno y 2,2-dicloropropano), hidrocarburos aromáticos (p-isopropiltolueno)

El log K_{OC} , K_{OW} y la constante de la ley de Henry y el juicio de expertos pueden ser utilizados para estimar el potencial de los contaminantes químicos emergentes para permanecer en agua potable.

Es importante señalar que existen factores propios al sitio, que afectan las transformaciones y transporte de los contaminante, entre estos factores se encuentran: el índice de precipitación anual, temperatura, velocidad y dirección de los vientos, geomorfología, hidrogeología, corrientes de aguas superficiales, características del suelo, flora y fauna, así como las obras para servicios (alcantarillas, drenaje).

El criterio para considerar a un compuesto como prioritario, incluye además de información suficiente para estimar las fracciones de ingreso al organismo humano, la persistencia ambiental, con base en la vida media de degradación en cada compartimiento ambiental. Así, un compuesto es persistente si cumple uno de los cuatro criterios siguientes:

- a) Vida media en aire: 48 horas
- b) Vida media en agua: 4,320 horas (180 días)
- c) Vida media en suelo: 4,320 horas (180 días)
- d) Vida media en sedimento: 8,760 horas (365)

Por otro lado, específicamente en agua, el destino de los contaminantes está fuertemente influido por su biodegradabilidad y características fisicoquímicas, incluyendo la polaridad. La mayoría de los contaminantes del agua que han sido estudiados, se sitúan en el grupo de más baja polaridad y alta volatilidad.

Con respecto al potencial para entrar a las fuentes de agua potable, los contaminantes altamente polares e hidrofílicos son de gran importancia debido a su alta movilidad en agua [NAP, 1999].

En general se considera que las sustancias bioacumulativa hidrofóbicas, solubles en grasa que tienen altos coeficientes de partición octanol-agua ($K_{OW} \geq 100,000$) se biomagnificarán; no obstante existen dudas acerca de sustancia moderadamente hidrofóbicas. En el caso compuestos de metales y metaloides como el cobre, cadmio, zinc y arsénico, no hay evidencia de biomagnificación [Barwick and Maher, 2003]; para el mercurio, esta propiedad ha sido ampliamente demostrada [Barbosa *et al.* 2003; PNUMA, 2002].

3.4. ESTRUCTURA DE LOS MODELOS MULTIMEDIA O MULTICOMPARTIMENTALES

3.4.1. Sistemas Eulerianos, Langrangianos y de difusión

Las ecuaciones establecidas para predecir la transformación y transporte de los contaminantes, dependen en gran medida de los objetivos que se tengan, en este contexto, los modelos más frecuentes son los que plantean compartimientos, cajas o Eulerianos, en los que el ambiente se divide en segmentos dentro de un cierto número de volúmenes o cajas, las cuales se fijan en el espacio y son frecuentemente tratadas como homogéneas, esto es composición química bien mezclada y de aquí la ventaja de que solamente se requiera definir la concentración en cada caja (compartimiento).

En otro tipo de modelos (Langrangianos) se define una parcela de aire o agua, y el químico en ella, y en el tiempo hay movimiento de un lugar a otro, sea cual sea el modelo seleccionado, en teoría se deben obtener resultados semejantes. Aparentemente, son los modelos compartimentales los que han sido más ampliamente utilizados con fines regulatorios [Mackay, 2001].

Los modelos de difusión pueden ser una herramienta valiosa cuando se desea un panorama general del transporte de un químico a escala global en la atmósfera o en los océanos, o cuando se pretende estimar la dispersión cercana a las fuentes de emisión de los químicos.

3.4.2. Modelos por sistemas “real” y de “estimación”

En un sistema “real”, se tiene información de las propiedades de los químicos, concentraciones de ingreso a regiones bien definidas, por lo que es posible establecer un modelo que describa la situación específica para el sitio y, la validación es posible comparando la salida del modelo con lo observado.

En los modelos en los cuales el ambiente es ficticio, sólo es posible estimar y no hay correspondencia con un área particular, pero es realista, esto aplica a la evaluación de un gran número de sustancias químicas.

Ambos sistemas utilizan las mismas ecuaciones, solamente difieren en los parámetros ambientales. Esta aproximación es particularmente aplicable para propósitos de regulación internacional ya que la evaluación no es específica para una región. Ejemplos de este tipo de modelos son los EQC, CalTox, SimpleBox, entre otros (Tabla 21).

Tabla 21).

Tabla 21. Modelos utilizados para predecir la persistencia y transporte de contaminantes químicos

MODELO	DESCRIPCIÓN
BENX	Modelos de persistencia y transporte de amplio rango
CalTox	Estimativo de Nivel III, desarrollado en California, incluye exposición
ChemCAN	Modelo regional Nivel III con una base de datos de ambientes regionales canadienses
Chemrange y SCHE	Modelo multi-caja circular para calcular persistencia y transporte de amplio rango
CoZMo-POP	Modelo regional específicamente para grandes cuencas o ambientes costeros
ELPOS	EUSES/Caja simple para calcular persistencia total, CTD en aire y agua
EQC	Calcula en un modelo particular Niveles I, II y III, en un ambiente fijo
GloboPOP	Modelo global
HELD	Versión en tercera dimensión del modelo SCHE
Level II	Model Nivel II con un ambiente definido por el usuario
Level III	Modelo Nivel III con ambiente definido por el usuario
PENX	PEN1: modelo basado en concentración steady-state, ha sido usado por la EPA
SimpleBox	Modelo regional Nivel III usado por la Unión Europea
TAPL3	Modelo de transporte y persistencia Nivel III con ambiente definido por el usuario, emisiones fijadas
VDMX	Modelos de persistencia y LRT basado e SimpleBox
WANIA	Modelo de fugacidad Level III de tres compartimentos (aire, agua, suelo)
WANX	WAN1: Incluye procesos de pérdida advectiva a escala global WAN2: No incluye advección

Fuente: MacKay, 2001

3.4.3. Balance de masa compartimental

El primer paso en el desarrollo de un modelo es dividir el ambiente en un determinado número de compartimentos, con un volumen definido y fijado en el espacio ()



Fig. 16. Derivación de las expresiones para las concentraciones compartimentales en condiciones de equilibrio usando concentraciones constantes

Fuente: Mackay, 2001

$$\frac{dm}{dt} = T_{IN} + E + F_{IN} + S - (T_{OUT} + F_{OUT} + R)$$

En donde:

$m = VC$
 $V = \text{volumen}$
 $C = \text{concentración}$

Si:

$T_{OUT} = VCk_t$
 $F_{OUT} = VCk_F$
 $R = VCk_R$

Entonces:

$$\frac{dVC}{dt} = T_{IN} + E + F_{IN} + S - VC(k_t + k_F + k_R)$$

En equilibrio

$$\frac{dm}{dt} = \frac{dVC}{dt} = 0$$

Así

$$C = \frac{T_{IN} + E + F_{IN} + S}{V(k_T + k_F + k_R)}$$

Tempo de residencia:

$$TR = \frac{Masa}{Tasadesalida} = \frac{m}{VC(k_T + k_F + k_R)} = \frac{1}{k_T + k_F + k_R}$$

Esta ecuación se extiende a más compartimentos:

$$\tau_{OR} = m_{total} / R_{total} = m_{total} / (m_1 k_1 + m_2 k_2 + \dots) = \sum f_i \cdot k_{Ri}^{-1}$$

Mackay, et al. [1996], proponen un proceso de cinco estadíos para evaluar el transporte de compuestos químicos conocidos y nuevos. El proceso requiere clasificar a cada compuesto químico en uno de cinco tipos, dependiendo de sus características fisicoquímicas y aplica al desarrollo y entendimiento del transporte de una sustancia en el ambiente después de que ésta ha sido liberada al ambiente y para predecir las concentraciones a las cuales los organismos estarán expuestos en varios medios ambientales. Los estadíos son los siguientes:

- a) Clasificación de la sustancia
- b) Compilación de datos históricos de descarga y concentración
- c) Estimación o evaluación genérica de destino, que involucra el uso de modelos de cuatro niveles. Deduce las características generales de la conducta del químico en un ambiente genérico a 25 °C
- d) Evaluación regional o remota en campo. Estima el transporte del químico en una región de 10^4 a 10^6 km² e identifica situaciones locales que se derivan en estudios posteriores
- e) Evaluación local o cercana en campo. Evalúa la conducta local en regiones y medios de alto uso y exposición.

Como ya se anota con anterioridad, todas las sustancias se desplazan entre los compartimientos ambientales (aire, agua, suelo/sedimento y biota) y como consecuencia son objeto de partición ambiental. Las sustancias se desplazarán desde su punto de entrada en el ambiente hasta el compartimiento ambiental hacia el cual tienen mayor afinidad y pueden moverse de un compartimiento a otro, lo cual depende del tipo de químico y sus características fisicoquímicas (Fig. 17).

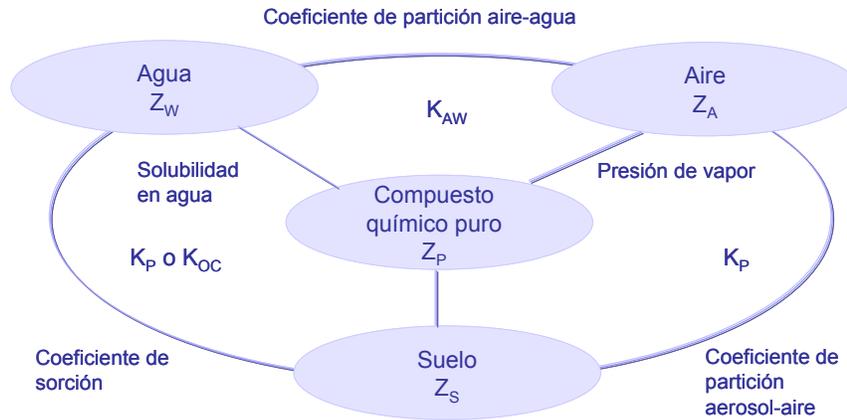


Fig. 17. Diagrama esquemático que presenta las relaciones de partición y la secuencia para el cálculo de los valores de Z (fugacidad) para los cinco tipos de químicos y creel criterio de equilibrio

Fuente: Mackay, *et al.*, 1996

La fugacidad (f) es un antiguo concepto fisicoquímico, que ha sido definida como la tendencia de una sustancia química a escaparse de una fase a otra. Esta propiedad puede calcularse en unidades de presión (Pa).

Se ha propuesto un modelo evaluativo de 1 km^2 , llamado "unidad de mundo", que se divide en seis compartimientos con cantidades definidas de materiales. Este modelo introduce el concepto de la capacidad ambiental, Z , para cada compartimiento.

$$Z = \text{mol} \cdot \text{m}^{-3} \times \text{Pa}^{-1}$$

A partir de esta ecuación se pueden calcular las concentraciones teóricas ($C = \text{mol} \cdot \text{m}^{-3}$) después de una emisión de una cantidad determinada de un compuesto químico en la "unidad de mundo".

$$C = fZ$$

Cuando las fugacidades son iguales en todos los compartimientos, se establece un equilibrio; esto ocurre cuando

$$f_1 = f_2$$

En consecuencia:

$$C_1 / Z_1 = C_2 / Z_2$$

y

$$C1/ C2 = Z1/ Z2 = K12$$

K12 es el coeficiente de partición que determina la distribución de la sustancia entre dos fases, 1 y 2.

Las capacidades de cada compartimiento (Z), pueden determinarse como una función de los coeficientes de partición. Si se puede suponer que hay equilibrio, buena mezcla, ausencia de reacción y ausencia de advección, se pueden calcular la distribución relativa de masa y las concentraciones relativas.

En la práctica, después de aplicar el modelo de fugacidad (nivel I) se puede saber en cuál compartimiento se encuentra la mayor parte del compuesto y en dónde están las concentraciones más altas en la "unidad de mundo". El nivel II, que es más complejo, también está en equilibrio e incluye reacciones de transformación y advección. La cinética de la transformación puede derivarse de la bibliografía y, para obtener el tiempo de persistencia en un ambiente dado, puede elaborarse una matriz de transformación. El nivel III es un sistema más complejo de estado constante, que no está en equilibrio y da una idea del flujo del transporte entre las fases.

El modelo es de tipo genérico, fue descrito por primera vez por Mackay, *et al.* (1992), y se basa también en el modelo EQC (MacKay *et al.*, 1996); en cualquier caso, la herramienta requiere las propiedades fisicoquímicas del compuesto (volátil, no volátil o insoluble en agua), incluyendo la vida media de reacción en cada compartimiento, y considera un área total de 100,000 km², consistente en volúmenes definidos de aire, agua, suelo y sedimentos (Webster, 1998; Mackay, *et al.*, 1996).

En este marco, los cinco tipos de químicos son los siguientes:

- a) Tipo I. La sustancia se distribuye en todas las fases: Z es medible en todas las fases y se requieren los coeficientes de partición
- b) Tipo 2. La sustancia no tiene partición importante en aire; esto es, no es volátil pero Z y los coeficientes de partición son requeridos para todas las fases. Todos los coeficientes de partición son normalmente referidos al agua y el coeficiente de partición aire-agua es esencialmente insignificante
- c) Tipo 3. La sustancia no tiene partición en agua; esto es, no es soluble: Z es cero o cercano a cero en agua pero medible en otras fases. Las vidas medias son requeridas

para todos los medios excepto para agua. Los autores sugieren un punto de corte de solubilidad de 10^{-6} g/m³ así, todos los PCB's son de tipo I

- d) Tipo 4. El valor de Z es casi cero en aire y en agua; probablemente el químico esté en fase pura en el ambiente, bien sorbido en superficies.



Fig. 18. Diagrama de criterios de selección para cuatro tipos de químicos

Fuente: Mackay, *et al.*, 1996

Los químicos tipo 4 pueden ser ligeramente liposolubles. Los autores sugieren como criterios presión de vapor de 10^{-7} Pa y una solubilidad menor a 10^{-6} g/m³

- e) Tipo 5. Químicos que están presentes en más de una especie química, p. ej., el mercurio y se distribuyen en prácticamente todos los compartimentos ambientales

En la Figura 18 se esquematizan los criterios de selección para los diferentes tipos de químicos

Como ejemplo de la aplicación del modelo nivel III en condiciones de equilibrio y no dinámico (EQC), se toman algunos contaminantes orgánicos que han sido detectados en aguas residuales y aguas superficiales de ríos y lagunas en México.

Se asume que hay equilibrio termodinámico e incluye proceso advectivos y de reacción, y si bien puede no dar una descripción precisa de las transformaciones de una compuesto químico dado, éste incluye información suficiente y confiable sobre factores clave que controlan su persistencia; proporciona una descripción realista de su distribución, incluyendo las pérdidas por degradación y advección así como los procesos de transporte entre compartimentos (Webster *et al.*, 1998).

Finalmente, el modelo Nivel III genera un balance de masas completo y estima tanto la concentración como la fugacidad del compuesto químico bajo condiciones estáticas para cada compartimento ambiental, deduce todos los flujos por reacción y transporte intermedio. Calcula la persistencia ambiental o tiempo de residencia como cantidad total del químico en el ambiente en condiciones estables dividido por la tasa de pérdida total (o tasa de entrada total, dado que son iguales en condiciones estáticas).

Debido a que el modelo Nivel III fue desarrollado en Canadá, que es un país con zonas ampliamente cubiertas con agua, consideramos que para regiones como la que nos ocupa, es

necesario modificar algunos de los parámetros ambientales, ya que en general nuestro ambiente es pobre en agua. Para esto, se tomó como base el trabajo de Breitkopf, *et al.* [2000], que plantea parámetros diferentes para un área industrial típica en el centro de Alemania (Los parámetros ambientales adicionales para la modelación de la distribución y pérdida de los compuestos detectados en las aguas y aguas residuales de la cuenca son los que se encuentran en el software para condiciones ambientales estándar (Tabla 23).

Por otro lado, en lo referente a la entrada de compuestos químicos al ambiente, solamente se considera la concentración presente en agua, dado que se desconocen las emisiones a la atmósfera y a los suelos y se incluyen aquéllos analitos cuyos valores de vida media de reacción se encuentra disponible en la literatura (Tabla 24).

Tabla 22), sin modificar los parámetros de transporte del modelo regional genérico original ni el contenido de carbón orgánico en suelo, agua y sedimento (MacKay, *et al.*, 1992) y suponiendo la tasa de precipitación promedio estimada en 0.0001 m/h.

Los parámetros ambientales adicionales para la modelación de la distribución y pérdida de los compuestos detectados en las aguas y aguas residuales de la cuenca son los que se encuentran en el software para condiciones ambientales estándar (Tabla 23).

Por otro lado, en lo referente a la entrada de compuestos químicos al ambiente, solamente se considera la concentración presente en agua, dado que se desconocen las emisiones a la atmósfera y a los suelos y se incluyen aquéllos analitos cuyos valores de vida media de reacción se encuentra disponible en la literatura (Tabla 24).

Tabla 22. Parámetros de los compartimientos en ambientes rico y pobre en agua

PARÁMETRO	UNIDADES	AMBIENTE RICO	AMBIENTE POBRE
Volumen de aire	m ³	6.05x10 ¹²	6.05x10 ¹²
Volumen de agua	m ³	8.5x10 ¹⁰	7.7x10 ⁸
Volumen de suelo	m ³	2.7x10 ⁸	8.8x10 ⁸
Volumen de sedimento	m ³	1.3x10 ⁸	4.6x10 ⁶
Área aire/suelo	m ²	1.8x10 ⁹	5.904x10 ⁹
Área aire/agua	m ²	4.3x10 ⁹	1.54x10 ⁸
Volumen de la fracción de aerosol		2.0x10 ⁻¹¹	2.0x10 ⁻¹¹
Volumen de la fracción de la biota en agua		1.0x10 ⁻⁶	1.0x10 ⁻⁶
Volumen de la fracción de sedimento en agua		5.0x10 ⁻⁶	1.3x10 ⁻⁵

PARÁMETRO	UNIDADES	AMBIENTE RICO	AMBIENTE POBRE
Volumen de la fracción de agua en suelo		0.3	0.3
Volumen de la fracción de aire en suelo		0.2	0.2
Volumen de la fracción de agua en sedimento		0.8	0.8
Tiempo de residencia por advección en aire	Horas	6.0	8.0
Tiempo de residencia por advección en agua	Horas	600	800

Tabla 23. Parámetros ambientales en la modelación de los contaminantes detectados en la cuenca del río Atoyac

DIMENSIONES Y DENSIDADES	ÁREA m ²	PROFUNDIDAD m	VOLUMEN Fracción	VOLUMEN m ³	DENSIDAD kg/m ³
<i>Aire</i>	6.05E+12	2000	-	1.21E+16	1.206
Aire: Vapor	-	-	-	1.21E+16	1.206
Aerosol	-	-	2.00E-11	242000	1500
<i>Agua</i>	7.70E+08	10	-	7.70E+09	1000.005
Agua	-	-	-	7.70E+09	1000
Partículas suspendidas	-	-	0.000005	38500	2000
Peces	-	-	0.000001	7700	1000
<i>Suelo</i>	6.05E+12	0.1	-	6.05E+11	1500.241
Fracción aire	-	-	0.2	1.21E+11	1.206
Fracción agua	-	-	0.3	1.81E+11	1000
Sólidos	-	-	0.5	3.02E+11	2400
<i>Sedimento</i>	7.70E+08	0.01	-	7700000	1360
Agua	-	-	0.7	5390000	1000
Sólidos	-	-	0.3	2310000	2200
Carbón orgánico y advección					
<i>Fracciones (masa)</i>	g/g		Tiempo de residencia de advección		
Sólidos en suelo	0.02			Horas	Días
Sólidos en sedimento	0.05		Aire	50	2.08
Partículas suspendidas	0.167		Agua	20000	833
			Suelo	-	-
Lípidos en pez	0.05	g/g	Sedimento	70000	2917
<i>Velocidades de transporte</i>					
Aire: aire-agua MTC	3	26280			
Agua: aire-agua MTC	0.03	262.8			
Tasa de lluvia	0.0001		0.876		
Velocidad de depósito de aerosol seco	11		96360		
Difusión de la fase suelo-aire MTC	0.04		350.4		
Difusión de la fase suelo-agua MTC	0.00001		0.0876		

DIMENSIONES Y DENSIDADES	ÁREA m ²	PROFUNDIDAD m	VOLUMEN Fracción	VOLUMEN m ³	DENSIDAD kg/m ³
Capa de frontera suelo-aire MTC	1		8760		
Sedimento-agua MTC	0.0004		3.504		
Velocidad de depósito de sedimento	0.00000005		0.000438		
Velocidad de resuspensión de sedimento	1.1E-08		0.00009636		
Tasa de escurrimiento suelo-agua	0.00008		0.7008		
Tasa de escurrimiento de sólidos de suelo	0.00000004		0.0003504		
Scavenging ratio (unitless)	200000				

Tabla 24. Vida media de reacción de algunos de los analitos detectados en aguas superficiales en México

ANALITO	AGUA	SEDIMENTO	AIRE	SUELO	REFERENCIAS
Acetona	7.8 a 18 horas	Insignificante	22 días	Insignificante	ATSDR
Benceno	8 a 16 días 11 días	Insignificante 220 días	4 horas a 2 días 5.9 días	11 días 190 días	ATSDR Dennis, <i>et al.</i> 1994 y Hertwich, <i>et al.</i> 1999
Clorobenceno	2 semanas a ≈100 días 109 días	150 días 334 días	20 a 40 horas 16.5 días	194-345 días 75 días	ATSDR Hertwich, 1999
1,4 diclorobenceno	38 días	180 días	38 días	520 días	Dennis, <i>et al.</i> , 1994
Cloroformo	≈44 días	2 a 37 días	≈60-80 días	4.1 días	ATSDR, IPCS Beelen and Vlaardingen (2006)
Cloruro de metileno	1,400 días	1,100 días	3.2 días	280 días	Dennis, <i>et al.</i> , 1994
Cloruro de vinilo	1,400 días 1,351 días	1,100 días 1,114 días	3.2 días 3.22 días	280 días 278 días	Dennis, <i>et al.</i> , 1994 Hertwich, <i>et al.</i> , 1999
Dibromoclorometano	43 minutos a 16 días con una vida media típica de reacción de 46 horas	Insignificante*	280 días*		* TOXNET
1,2 dicloroetano	820 días	430 días	45 días	110 días	Dennis, <i>et al.</i> , 1994
Dietilftalato	170 días	1,700 días	170 días	550 días	Wania and MacKay, 2000
Metiltert-butileter (MTBE)	4.1 horas (volatilización)		5.6 días		Irwin <i>et al.</i> , 1997
Tetracloroetileno	90 días 25 días	510 días 515 días	51 días 51 días	590 días 594 días	Dennis, <i>et al.</i> , 1994 Hertwich, <i>et al.</i> , 1999

ANALITO	AGUA	SEDIMENTO	AIRE	SUELO	REFERENCIAS
Tolueno	30 días 13 días	900 días 107 días	2 días 2.375 días	90 días 28 días	European Union, 2003 Hertwich, et. Al., 1999
Tricloroetileno	120 días	220 días	3.5 días	930 días	Dennis, <i>et al.</i> , 1994

* Tiempo de residencia

Como puede observarse en las figuras 19 a la 23, las propiedades fisicoquímicas de los compuestos orgánicos, favorecen que éstos se distribuyan en agua, atmósfera y suelo (ANEXO I), y aunque están en mayor proporción en agua, aún cuando la población no ingiera directamente el agua, la inhalación e ingestión de partículas de suelo en la región constituyen rutas de exposición para los residentes. Asimismo, si se habla de una fuente de abastecimiento, esta agua deberá ser tratada para su potabilización.

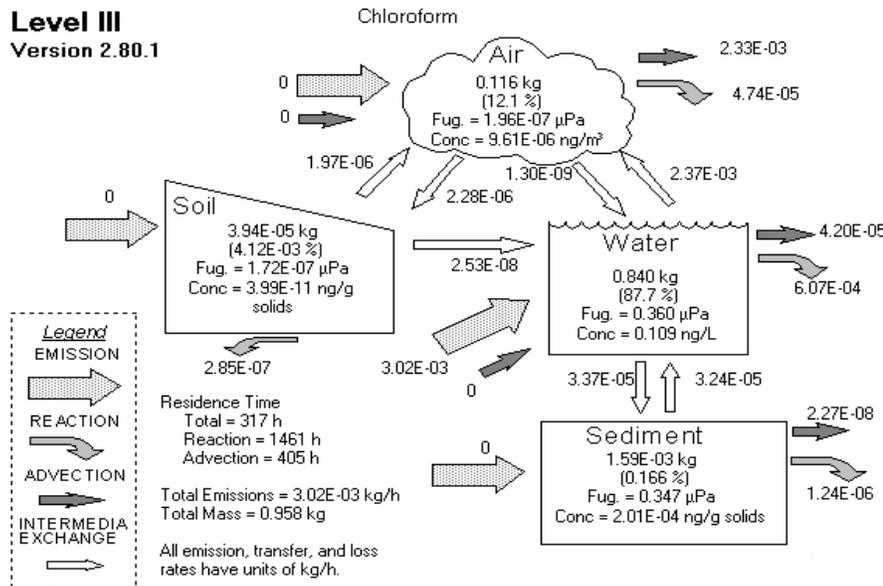


Fig. 19. Distribución de cloroformo en los compartimientos ambientales. Sólo se consideró descarga al agua

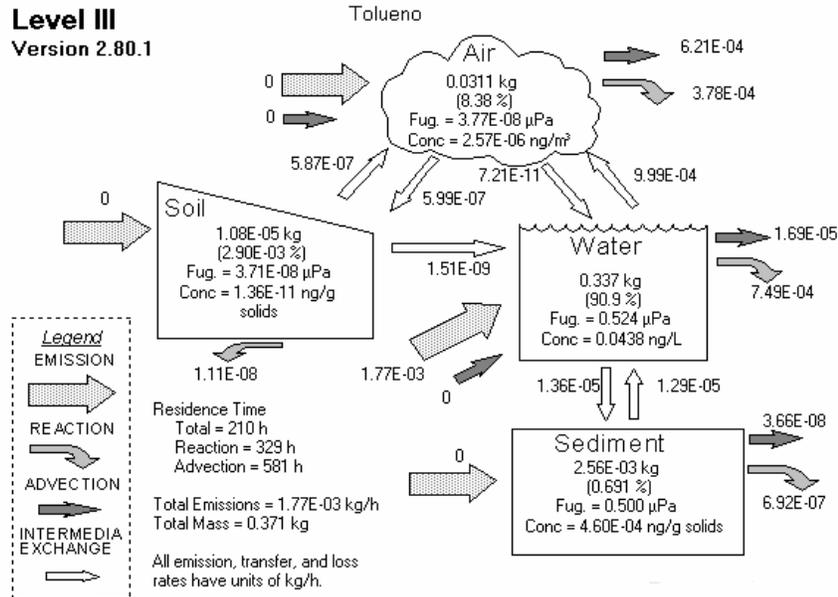


Fig. 20. Distribución de tetracloroetileno en los compartimientos ambientales. Sólo se consideró descarga al agua

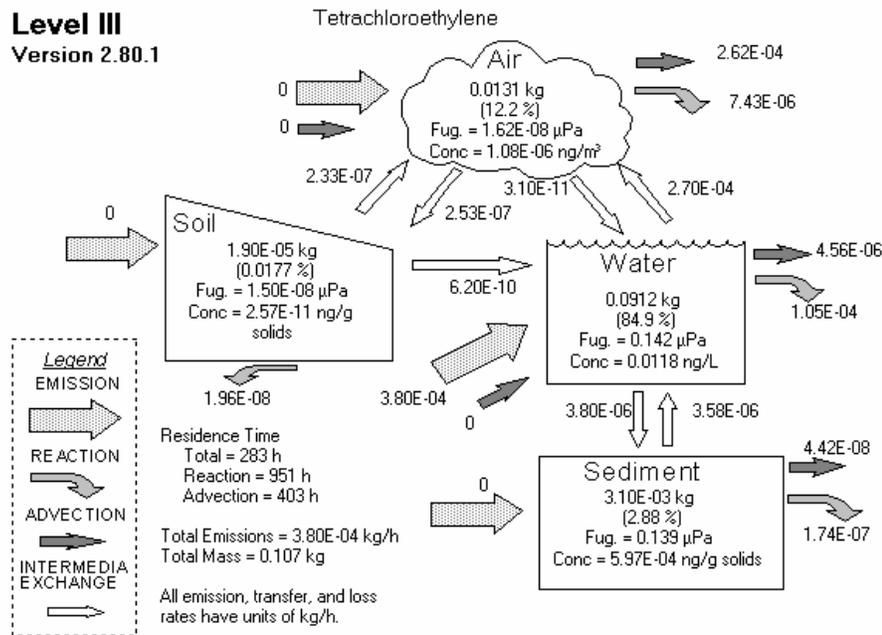


Fig. 21. Distribución de tolueno en los compartimientos ambientales. Sólo se consideró descarga al agua

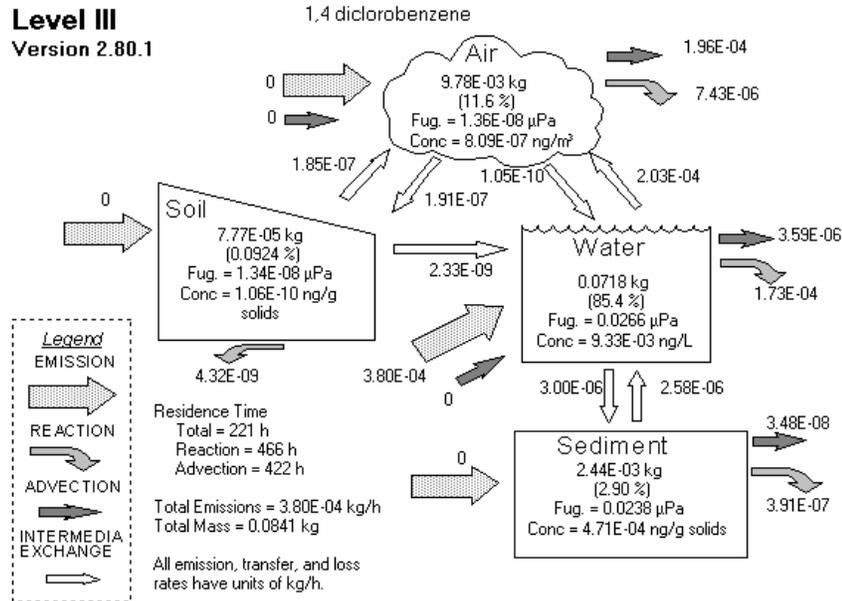


Fig. 22. Distribución de 1,4-diclorobenceno en los compartimientos ambientales. Sólo se consideró descarga al agua

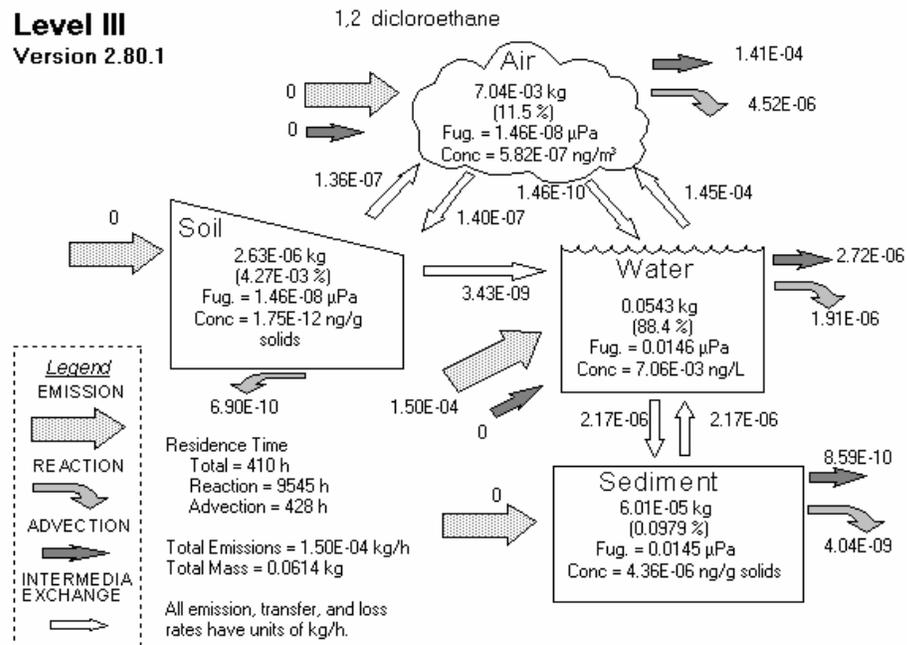


Fig. 23. Distribución de 1,2-dicloroetano en los compartimientos ambientales. Sólo se consideró descarga al agua

En la Tabla 25 se presentan las vidas medias de degradación en aire y agua, de algunos compuestos detectados en el agua del río y descargas de aguas residuales industriales y municipales.

Estos valores son cercanos a las vidas medias de reacción, estimadas en los sitios de muestreo mediante el modelo nivel III utilizado para evaluar el comportamiento ambiental de los compuestos orgánicos volátiles (Anexo I).

Tabla 25. Vida media de degradación y persistencia total, para algunos de los compuestos orgánicos

ANALITO	VIDA MEDIA DE DEGRADACIÓN (HORAS)		
	Aire	Agua	Persistencia total
Benceno	142	267.6	142
1,2-diclorobenceno	840	2,500	890
1,4-diclorobenceno	924	2,800	973
1,2-dicloroetano	1,080	19,600	1,120
Diclorometano	8,090	420	7,290
Tricloroetileno	83	2,920	83.6
Tolueno	57	312	57.5
Xilenos	23.3	420	23.6

Fuente: MacLeod and McKlone, 2004

Actualmente, la Agencia de Protección Ambiental de los Estados Unidos, utiliza el Programa de Estimación de Interfase Suite (EPI Suite™, por sus siglas en inglés), el cual es un sistema de modelado primario, que permiten obtener estimaciones de las características físico-químicas más comunes y necesarias para predecir las transformaciones y destino de un compuesto químico, estas características incluyen coeficientes de partición octanol/agua, solubilidad en agua, constantes de velocidad de hidrólisis y constantes de la ley de Henry (<http://www.epa.gov/oppt/exposure/pubs/episuite.htm>). También proporciona información sobre transformación, transporte, bioconcentración en organismos acuáticos y tiempos de vida media en aguas superficiales (ríos y lagos).

La calculadora de EPI Suite™ se basa principalmente en un enfoque constante de partición que se ha validado con un conjunto independiente de compuestos químicos (incluye fármacos y productos para el cuidado personal). En general, predice las propiedades físico-químicas dentro de un orden de magnitud, que normalmente es suficiente para objetivos regulatorios y de evaluación. Las limitaciones de esta herramienta, implican el uso de otros programas computacionales, ya que no calcula constantes de ionización (pK_s) y constantes de transformación más allá de la hidrólisis.

El EPI Suite™, usa una única entrada para correr los programas de estimación: KOWWIN™, AOPWIN™, HENRYWIN™, MPBPWIN™, BIOWIN™, BioHCwin, KOCWIN™, WSKOWWIN™,

WATERNT™, BCFBAF™, HYDROWIN™, KOAWIN y AEROWIN™, y los modelos de destino WVOLWIN™, STPWIN™ y LEV3EPI™ y ECOSAR™. La información que proporcionan los modelos es la siguiente (<http://www.epa.gov/oppt/exposure/pubs/episuite.htm>):

- KOWWIN™: Estima el log del coeficiente de partición octanol-agua, log K_{OW} , usando un método de contribución átomo/fragmento
- AOPWIN™: Estima la velocidad de reacción en fase gaseosa, para la reacción entre los radicales oxidrilo e hidroxilo atmosféricos de mayor prevalencia y el químico. También estima la velocidad de reacción del radical ozono gaseoso para oleafinas y acetileno. Asimismo, informa al usuario si la reacción del radical nitrato será importante. Calcula automáticamente la vida media atmosférica del químico, asumiendo concentraciones promedio de los radicales hidroxilo y ozono
- HENRYWIN™: Calcula la constante de la Ley de Henry (coeficiente de partición aire/agua)
- MPBPWIN™: Estima los puntos de fusión y ebullición y presión de vapor para compuestos químicos orgánicos
- BLOWIN™: Estima la biodegradabilidad aeróbica y anaeróbica de los compuestos orgánicos con siete diferentes modelos
- BioHCwin: Estima vida media de biodegradación para compuestos que contienen únicamente carbono e hidrógeno
- KOCWIN™: Formalmente llamado PCKOCWIN™, estima el coeficiente de sorción para suelo y sedimento, p. ej., K_{OC} , usando dos modelos, el Sabljic que es un método de conectividad molecular y el tradicional basado en el K_{OW}
- WSKOWWIN™: Estima un coeficiente de partición octanol agua mediante el programa KOWWIN™, entonces estima una solubilidad del compuesto químico en agua de este valor
- WATERNT™: Estima directamente la solubilidad en agua, mediante el método de fracciones para ser usados en KOWWIN™
- BCFBAF™: Formalmente llamado BCFWIN™, estima el factor de bioconcentración en peces y su algoritmo usa dos métodos: a) el método tradicional de regresión basado en el log K_{ow} más el factor de corrección necesario y, b) método Argot-Gobas, que utiliza principios mecanicistas para el cálculo. También incluye la predicción de la vida media biológica y estima factores de bioconcentración y bioacumulación para tres niveles tróficos
- HYDROWIN™: Estima constantes de velocidad de hidrólisis en agua y vida-media para: ésteres, carbamatos, epóxidos, halometanos, haluros de alquilo seleccionados y fosfoésteres. Estima constantes de velocidad de hidrólisis ácida o básica, pero con

excepción de los fosfoésteres, no calcula hidrólisis neutra. Además, identifica una variedad de estructura químicas para las cuales la hidrólisis puede ser significativa y proporciona datos experimentales relevantes

- **KOAWIN**: Estima el coeficiente de partición octanol-aire K_{OA} , usando el cociente del coeficiente de partición octanol-agua de **KOWWIN™** y la constante de la Ley de Henry de **HENRYWIN™**
- **AEROWIN™**: Estima la fracción transportada por aire sorbida a partículas, p. ej., el parámetro ϕ (Φ), usando tres diferentes métodos. Los resultados también se despliegan en la salida de **AOPWIN™** como un soporte para la interpretación
- **WVOLWIN™**: Estima la velocidad de volatilización de un químico presente en ríos o lagos, y calcula la vida media y velocidades para estos dos procesos. El modelo tiene algunos supuestos fijos con respecto a la profundidad del cuerpo de agua, velocidad del viento, entre otros
- **STPWIN™**: Usa algunas salidas de **EPI Suite™**, predice la remoción de un químico en una planta de lodos activados para tratamiento de aguas residuales. Los valores son dados para la remoción total y tres procesos que contribuyen a ésta (biodegradación, sorción al lodo y aireación). El programa asume un diseño estándar y un conjunto de operaciones fijadas
- **LEV3EPI™**: Contiene un modelo de fugacidad nivel III y predice partición de los químicos entre los diferentes compartimentos ambientales (aire, suelo, sedimento, agua) bajo condiciones constantes para un modelo ambiental fijo (solamente algunos valores pueden ser cambiados por el usuario)
- **ECOSAR™** Versión 1.00: El programa Ecological Structure Activity Relationships (**ECOSAR**) estima la toxicidad crónica y aguda de químicos industriales para organismos acuáticos y tiene limitaciones estructura-actividad para especies marinas y terrestres.

Es importante enfatizar que **EPI Suite™** es una herramienta a nivel de tamisaje y no es conveniente utilizarlos si los valores están disponibles:

En el Anexo II se presentan ejemplos de las salidas que proporciona la base de datos al integrar varios modelos. De acuerdo con los cálculos del modelo de fugacidad que estima **EPI Suite**, asumiendo que se liberan 1,000 kg del fármaco o compuesto industrial al suelo, 1000 kg a la atmósfera y 1000 kg al agua, la mayor concentración de los compuestos se encontraría en el suelo, y sólo una pequeña parte se encontraría en el aire.

4. PRUEBAS DE TRATABILIDAD

4.1. MARCO TEÓRICO

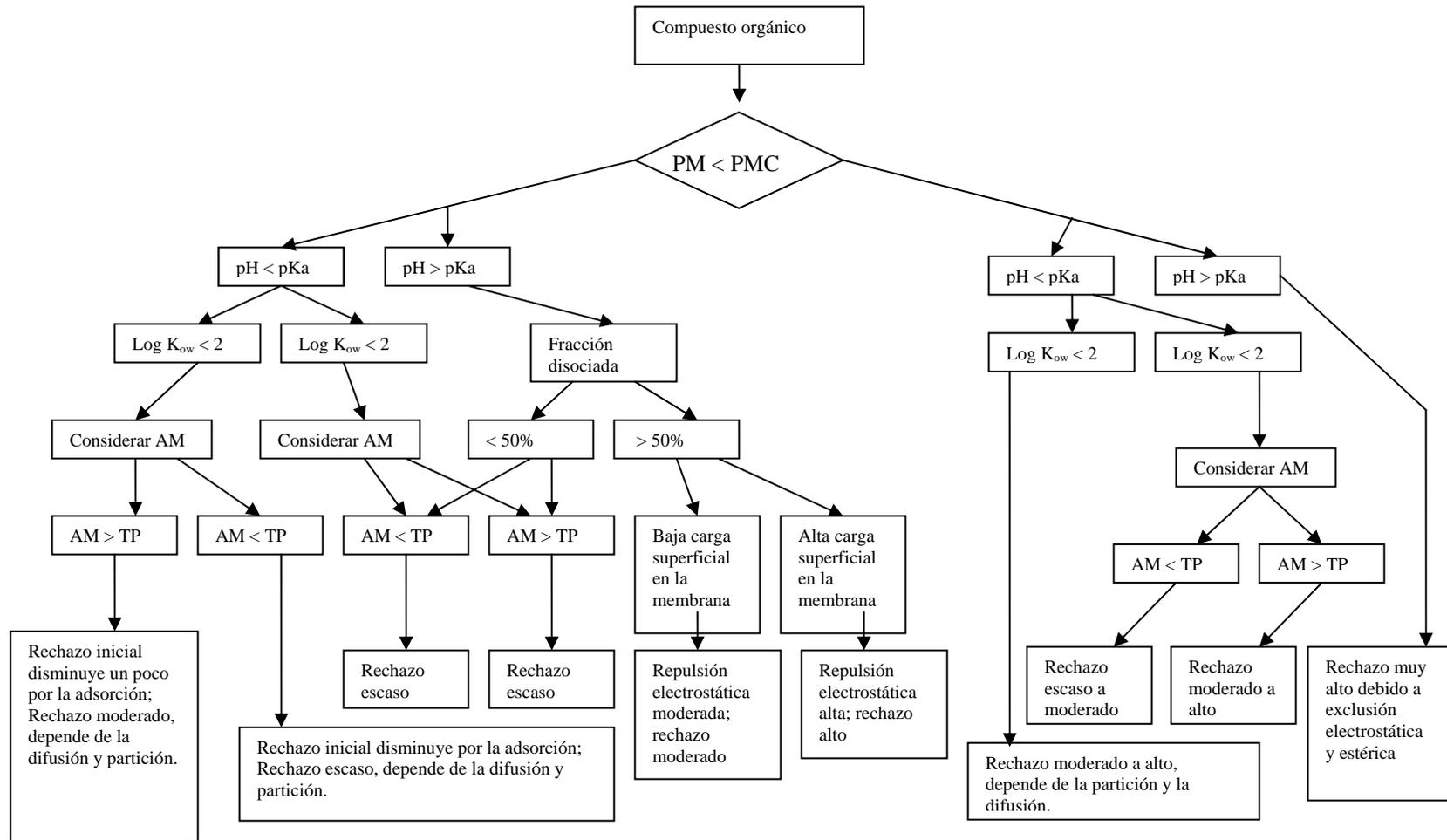
En la primer etapa de este proyecto se señaló que los sistemas convencionales de potabilización no son suficientes para la remoción de contaminantes orgánicos, especialmente algunos no regulados, pero que se sospecha tengan un potencial nocivo importante.

También se señaló que los procesos de membrana, especialmente nanofiltración y ósmosis inversa, tienen mayor capacidad que los sistemas convencionales para el control de tales sustancias, pero aún así hay algunos compuestos cuya remoción es baja o muy baja. Principalmente aquellos compuesto de carga neutra, sean hidrófobos o hidrófilos, y cuyo peso molecular es menor que el peso molecular de corte de la membrana. Sin que se tenga un límite preciso al respecto. Por ejemplo, cafeína que es un compuesto neutro (sin carga eléctrica) y con un peso molecular de 194 g/mol, es rechazada en mayor proporción por membranas de NF y OI que el bisfenol A, cuyo peso molecular es mayor: 228 g/mol.

Bellona y colaboradores [2004] hicieron una revisión extensiva de trabajos publicados por varios investigadores en los que intentaron explicar los mecanismos mediante los cuales las membranas de NF y OI pueden rechazar a los compuestos orgánicos.

Los principales mecanismos son:

- la exclusión por tamaño o por estericidad;
- la exclusión por repulsión de cargas o iónica; y
- la interacción fisicoquímica entre el solvente, el soluto y la membrana. Si bien concluyen que todavía no se ha podido establecer un modelo matemático que pueda explicar y sobre todo predecir con precisión como será rechazado un compuesto orgánico (principalmente aquellos que tienen un peso molecular menor que 200 Da y son no polares), como resultado de su investigación propusieron un modelo empírico que ayuda a estimar cualitativamente, como será removido un compuesto orgánico del agua cuando es tratada mediante membranas de NF u OI. El modelo se muestra en la figura 24.



PM Peso molecular; PMC Peso molecular de corte; AM Ancho molecular; TP Tamaño de poro

Fig. 24. Algoritmo para predecir el rechazo de un compuesto orgánico en una membrana (Bellona, *et al.* 2004)

Cabe señalar que el peso molecular de corte de una membrana es relativo a un cierto tipo de molécula, así que otras moléculas con peso molecular semejante, pero con diferentes propiedades fisicoquímicas (ancho molecular, polaridad, hidrofiliicidad/hidrofobicidad, etcétera) no sean rechazadas en la misma proporción. Quizá esta sea la mayor limitante del algoritmo. Por ejemplo, el Gemfibrozil que tiene un PM de 250 g/mol, pKa 4.43 y log Kow 4.77, en principio debería tener un rechazo muy alto si el agua a tratar (que contiene la sustancia) está en pH neutro o alcalino. En un estudio realizado por Radjenovic y su equipo (2008) reportaron que de 12 sustancias encontradas en el permeado de una planta de NF y OI en España, el Gemfibrozil y el ácido mefanámico (PM241.28, pKa 4.2 y log Kow 5.12) fueron las sustancias que menor rechazo tuvieron ($\leq 50\%$ en promedio)

4.1.1. Posibles beneficios económicos de la NF vs OI

Una de las mayores objeciones que se esgrimen para el uso de membranas, especialmente de ósmosis inversa, es el alto costo asociado con el proceso. De acuerdo con datos publicados por la asociación internacional de desalinización (IDA por sus siglas en inglés), los costos de inversión para procesos de ósmosis inversa y nanofiltración han disminuido de manera notable en los últimos 10 años.

Adicionalmente, investigadores como Drewes et al. (2005), Xu et al. (2005), Bellona et al. (2007 y 2008) han llevado a cabo trabajos comparativos entre membranas de nanofiltración y de ósmosis inversa de ultrabaja presión con membranas convencionales de ósmosis inversa, bajo la premisa que al demandar menores presiones de operación, el costo por tratar el agua debe ser menor, lo que vuelve o puede volver más rentable el proceso. En los resultados que han obtenido, la calidad del agua producto es semejante, en cuanto al contenido de compuestos orgánicos se refiere, a la de las plantas de ósmosis inversa convencional y el costo de operación puede ser hasta USD \$0.08/m³ (\approx pesos 0.96/m³, Bellona *et al.* 2007) más económico.

Los trabajos citados en el párrafo anterior, han sido aplicaciones a efluentes secundarios o terciarios, que se someten al tratamiento por membranas para recarga de acuíferos y de esta forma aumentar la disponibilidad en las fuentes de suministro. Por el uso específico del agua y por marco legal de la región en que se llevan a cabo esos trabajos, el agua está lista para su aplicación y no requiere un postratamiento.

En caso de que el proceso de membranas se utilice para producir agua para uso y consumo humano, el agua producida tiene un contenido tan bajo de sólidos disueltos totales que el

agua es corrosiva y no apta para consumo humano, por lo que requiere ser remineralizada. Como el agua producto de la nanofiltración contendrá mayor cantidad de minerales disueltos que el permeado de la ósmosis inversa y por lo mismo el costo asociado con la remineralización del agua nanofiltrada será menor que el del agua osmosada.

4.1.2. Las membranas como fuente de contaminantes emergentes.

Otro aspecto relacionado con la capacidad de las membranas para rechazar compuestos orgánicos tiene que ver con la adsorción de tales sustancias sobre la superficie de las membranas. Varios investigadores (Nghiem et al., 2004, Zhang et al., 2006, Kim et al., 2005) han manifestado inquietud al respecto ya que una parte de la remoción está asociada con la adsorción en la superficie de la membrana y posteriormente hay o puede haber una “fuga” hacia el permeado ya sea por difusión o por convección. Esto parece ser especialmente notorio en las membranas de nanofiltración cuyo rechazo nominal de NaCl es menor o igual al 85% y en consecuencia el peso molecular de corte (PMC) es mayor a 200 Da. Aunque el fenómeno también se ha observado en membranas con PMC de 200 Da., y en membranas de ósmosis inversa cuando tratan agua que contiene compuestos sin carga eléctrica y con pesos moleculares menores o iguales de los 200 Da.

Kim et al., (2005) probaron cuatro membranas de la casa Filmtec, tres de ósmosis inversa (rechazo nominal de NaCl 98%) y una de nanofiltración (rechazo nominal de NaCl 90%) para evaluar la remoción de subproductos de desinfección (ácido tricloroacético, ácido dicloroacético, cloroformo y bromoformo) y solventes clorados (tricloroetileno, percloroetileno, tetracloruro de carbono y tetrabromuro de carbono). Las membranas probadas mostraron una capacidad importante de adsorción para los solutos con hidrofobicidad media (Cloroformo, bromoformo y tricloroetileno), así la capacidad real de remoción (una vez que la membrana se satura) de estos solutos es baja. En contrataste, se observó una buena remoción para tetracloruro de carbono, tetrabromuro de carbono y percloroetileno, al igual que para los solutos que presentan una polaridad mayor (ácidos dicloroacético y tricloroacético).

Nghiem y colaboradores (2004) efectuaron pruebas con tres membranas con rechazos nominales de 15% de NaCl, 40-60% de CaCl_2 y 85% de CaCl_2 . Para evaluar cuales son los mecanismos de rechazo de estradiol y estrona. Con la membrana de menor rechazo nominal (15%) se estableció que el principal mecanismo de remoción es la adsorción, que en una operación continua y una vez saturada la membrana se traducirá en una fuga de estas sustancias. Por su parte las membranas con mayor rechazo nominal también adsorbieron las hormonas estudiadas.

Zhang y su equipo (2006) estudiaron la remoción de bisfenol A (molécula sin carga eléctrica) con una membrana de nanofiltración con un cpm de 200 Da., encontraron que la membrana adsorbe una fracción del contaminante, y sólo cuando el sistema se ha estabilizado, se pudo determinar con confiabilidad la remoción del contaminante analizado, así la eficiencia real de remoción fue sustancialmente menor (hasta en casi el 60%) que con la membrana limpia (no expuesta al bisfenol A). Los autores establecen que para sistemas de membranas controlados por el tamaño de exclusión el parámetro molecular que debe considerarse es el radio hidrodinámico, especialmente si el tamaño molecular es muy semejante al del poro de la membrana. Las membranas al adsorber el contaminante pueden funcionar como un almacén del bisfenol y dado que los puentes entre la superficie de la membrana y el soluto no son muy fuertes estos pueden ser liberados al permeado si se presenta una mejoría en la calidad del agua de alimentación, lo que conduce a un suceso de contaminación del agua tratada por un periodo corto de tiempo.

Si bien los resultados obtenidos a nivel laboratorio referentes a la adsorción y liberación de compuestos sin carga eléctrica y de compuestos con pesos moleculares muy bajos son dignos de tomarse en cuenta y la potencial liberación de los compuestos adsorbidos en las membranas puede representar un riesgo, difícilmente se alcanzaran concentraciones que pudieran provocar una intoxicación aguda.

Cabe señalar que las pruebas realizadas por los tres equipos de los investigadores antes citados utilizaron agua deionizada como matriz y en casi todos los casos un único soluto a la vez. Koyuncu y su equipo (2007) llevaron a cabo pruebas para verificar si había influencia de la matriz utilizada y si la presencia de otros contaminantes emergentes interfería en la remoción de los estudiados. Para sus pruebas utilizaron una membrana con un corte por peso molecular de 300 Da (NF200 de Filmtec). Los fármacos analizados fueron: tetraciclinas (clorotetraciclina, tetraciclina, oxitetraciclina, doxiciclina) sulfonamidas (sulfatiazol, sulfadimetoxina, sulfametazina, sulfacloropiridazina, sulfamerazina, sulfametoxazol, sulfametizol) y hormonas (estrone, progesterona, testosterona y 17α -etinilestradiol). Las matrices fueron: agua deionizada y agua potable de la red. La eficiencia de remoción de hormonas y sulfonamidas fue más baja cuando se utilizó agua deionizada y el soluto puro. Al mezclar los solutos (p.e. hormonas con sulfonamidas o con tetraciclinas) y cuando se utilizó agua potable como matriz, las eficiencias de remoción aumentaron. En las pruebas realizadas con agua potable el rechazo de todos los medicamentos fue prácticamente del 100, con excepción de la testosterona, en que se alcanzó una remoción de 95% aproximadamente. Así la presencia de sales y otros fármacos parecen presentar un efecto sinérgico en el rechazo de hormonas, sulfonamidas y tetraciclinas.

Radjenović y colaboradores (2008) llevaron a cabo el monitoreo de una planta potabilizadora de agua en el norte de España que cuenta con tres trenes paralelos de membranas, dos de ellos de ósmosis inversa (486 m³/h cada uno) y uno de nanofiltración (360 m³/h), durante el estudio hicieron cinco campañas de medición que comprendieron 12 compuestos farmacéuticos. Los resultados que obtuvieron indican que la nanofiltración fue capaz de remover con eficiencias superiores al 90 % hidroclorotiazida, ketoprofeno, diclofenaco, sotalol, sulfametoxazol, metoprolol, propifenazona y carbamazepina. Compuestos como cargas negativas como gemfibrozil y el ácido mefenámico tuvieron remoción baja tanto en el tren de nanofiltración (50% y 30% en promedio), como en los de ósmosis inversa (50% y 70% en promedio), cabe señalar que en el caso de la nanofiltración la dispersión de los pocos datos (sólo 3) fue muy importante. Por su parte el acetaminofen, que tiene un corte de peso molecular de 151.16 da, tuvo una remoción de 44.8% mediante nanofiltración y de 73 % mediante ósmosis inversa. Los autores concluyen que las membranas de Nanofiltración y de ósmosis inversa aplicadas a escala real son muy eficientes en la remoción de casi todos los residuos farmacéuticos encontrados en el agua de esta aplicación específica.

Tomando en cuenta las ventajas y riesgos asociados con el uso de membranas de nanofiltración, se considera que es un proceso viable, robusto y confiable para remover contaminantes emergentes de importancia ambiental y sanitaria.

4.2. Pruebas con membranas.

4.2.1. Predicción del comportamiento de las membranas para el rechazo de compuestos orgánicos.

Para tener una estimación cualitativa del rechazo de compuestos orgánicos que se puede esperar con las membranas de nanofiltración se utilizó el algoritmo propuesto por Bellona et al. (2004, ver sección 4.1).

Las características fisicoquímicas de los compuestos a tratar se muestran en la tabla 26.

Tabla 26. Características fisicoquímicas de las sustancias y el rechazo cualitativo esperado

Sustancia	Peso molecular (g/mol)	pK _a	Log K _{ow}	Rechazo esperado
Atenolol	266.366	9.6	0.16	De moderado a alto
Estradiol	272.38	10.4	4.01	De moderado a alto pero depende de la partición y difusión de la sustancia en la membrana.
Nimesulida	308.31	6.5	2.60	De moderado a alto
Sildenafil	> 200	0.52	2.5	Rechazo muy alto por exclusión tanto electrostática como estérica.

En principio, el Sildenafil debe ser rechazado en muy alta proporción dado el gran tamaño molecular que presenta y al hecho de estar protonado en el intervalo de pH en que se llevarán a cabo las pruebas de tratabilidad. Las otras tres sustancias, el nivel de rechazo esperado es más incierto, ya que en los tres casos puede ser de moderado a alto, aunque para la nimesulida y el atenolol los efectos de partición y difusión no son importantes.

4.2.2. Pruebas de tratabilidad en laboratorio.

Con agua de la red del IMTA se prepararon lotes de 500 litros. Para evitar posible interferencia de materia en suspensión en el desempeño de las membranas de nanofiltración, el agua fue previamente microfiltrada ($\Phi < 0.1 \mu\text{m}$) y se verificó que no contuviera cloro libre residual. Posteriormente se agregó la sustancia activa a analizar en concentraciones tales que fueran susceptibles de cuantificarse mediante las técnicas analíticas empleadas (COT y espectroscopía UV). Las características de las membranas a probar se muestran en la tabla 27.

Tabla 27. Características de las membranas de nanofiltración utilizadas

Membrana	Rechazo	Sal de prueba	Peso Molecular de Corte (Da)
NE4040-90	90-95%	CaCl ₂	200 - 500
	97%	MgSO ₄	
NF90-4040	>97%	MgSO ₄	200 - 500
ESNA1-LF-4040	86-95 %	CaCl ₂	300 – 500

Las características del agua microfiltrada fueron: Conductividad 287 μ S/cm a 25.7 °C; pH 7.84; Turbiedad 0.29 UTN; y COT 2.19

Una vez preparado el lote de agua enriquecida con el medicamento, se montó una membrana de nanofiltración en el banco de pruebas (ver figura 25) y se circuló el agua a través de la membrana. Se ajustó el flujo de rechazo en 10 gpm (37.85 L/min) y el flujo de permeado en 1.3 gpm (4.9 L/min), se midió la presión de operación. A los 15 minutos de haberse estabilizado el flujo se tomó la primer muestra de agua que comprendía tres puntos: el tanque (lote de agua), el permeado y el rechazo. El sistema se mantuvo funcionando por 8 horas, en ese lapso se registró cada dos horas la conductividad, pH y temperatura. A las 8 horas de funcionamiento se tomó la segunda muestra (tanque, rechazo y permeado).

Al segundo día se colocó la segunda membrana de nanofiltración, siguiendo el mismo procedimiento antes descrito y al tercer día se colocó la tercer membrana de nanofiltración aplicando el mismo procedimiento.

La tabla 28 muestra las condiciones promedio en que operaron las membranas. Puede observarse que la membrana NF90-4040 requirió mayor presión para alcanzar el caudal de permeado buscado. Se descarta una condición de incrustación o de atascamiento porque la Δ P se mantuvo por debajo de 10 psig, tal como señala el fabricante.



Fig. 25. Banco de pruebas utilizado para probar a las distintas membranas.

Tabla 28. Condiciones promedio de operación de las membranas

Membrana	Presión de operación		
	P alimentación	P rechazo	ΔP
Unidades	Psig	psig	Psig
CSM	68	62	6
Filmtech	123	116	7
Hydranautics	76	68	8

Una vez finalizada la prueba con la tercera membrana, al cuarto día se concentró el agua de desecho hasta 1/10 del volumen original y se dispuso el concentrado en un bidón de 50 L.

Para limpiar el sistema y las membranas, el tanque se enjuagó con agua microfiltrada, se agregó un nuevo lote de agua microfiltrada sin medicamento, utilizando la última membrana de la serie, se obtuvo agua permeada en cantidad suficiente para enjuagar a las otras dos membranas, también por circulación en circuito cerrado.

Una vez concluida esta operación se agregó un nuevo lote de agua microfiltrada y se enriqueció con el medicamento siguiente en la lista. Se fue variando el orden de colocación de las membranas para asegurar que cada una de ellas tratará por lo menos un lote “nuevo”. En la tabla 29 se muestra la sustancia analizada y el orden en que fueron colocadas las membranas.

Tabla 29. Medicamentos y orden de colocación de las membranas.

MEDICAMENTO	FECHA MUESTREO	MEMBRANA	HORA MUESTREO
Atenolol	21-Sep-10	Hydranautics	11:20
			17:00
	22-Sep-10	Filmtec	10:00
			17:00
	23-Sep-10	CSM	10:30
			16:30
Estradiol	06-Oct-10	CSM	10:00
			17:05
	07-Oct-10	Hydranautics	10:05
			17:00
	08-Oct-10	Filmtec	10:10
			17:00
Nimesulida	13-Oct-10	Hydranautics	11:20
			17:20
	14-Oct-10	Filmtec	10:00
			17:00
	15-Oct-10	CSM	10:10
			17:00
Sildenafil	19-Oct-10	Filmtec	11:30
			17:00
	20-Oct-10	CSM	10:00
			17:00
	21-Oct-10	Hydranautics	10:10
			17:00

Los resultados obtenidos en las pruebas se muestran en las figuras 25 a 29. En tres de ellas se puede observar que hay una remoción notoria de las sustancias analizadas. En el caso de

las hormonas fue necesario diluirlas en etanol y dado que el peso molecular del etanol (46.1 g/mol) es mucho menor que el corte por peso molecular de la membrana (200 Da) y además no es un compuesto que se ionice, el rechazo de esta sustancia por las membranas es bajo.

El tanque se mantenía tapado y evitando la incidencia solar directa, para minimizar la degradación del medicamento por efectos ambientales.

De manera general se puede decir que tanto la NF90'4040 como la NE4040-90 tuvieron comportamientos muy semejantes en cuanto a la eficiencia de remoción de fármacos, mientras que el desempeño de la ESNA-LF1-4040 fue ligeramente inferior, ya que con Atenolol presentó una concentración en el permeado de casi el triple que las otras dos membranas.

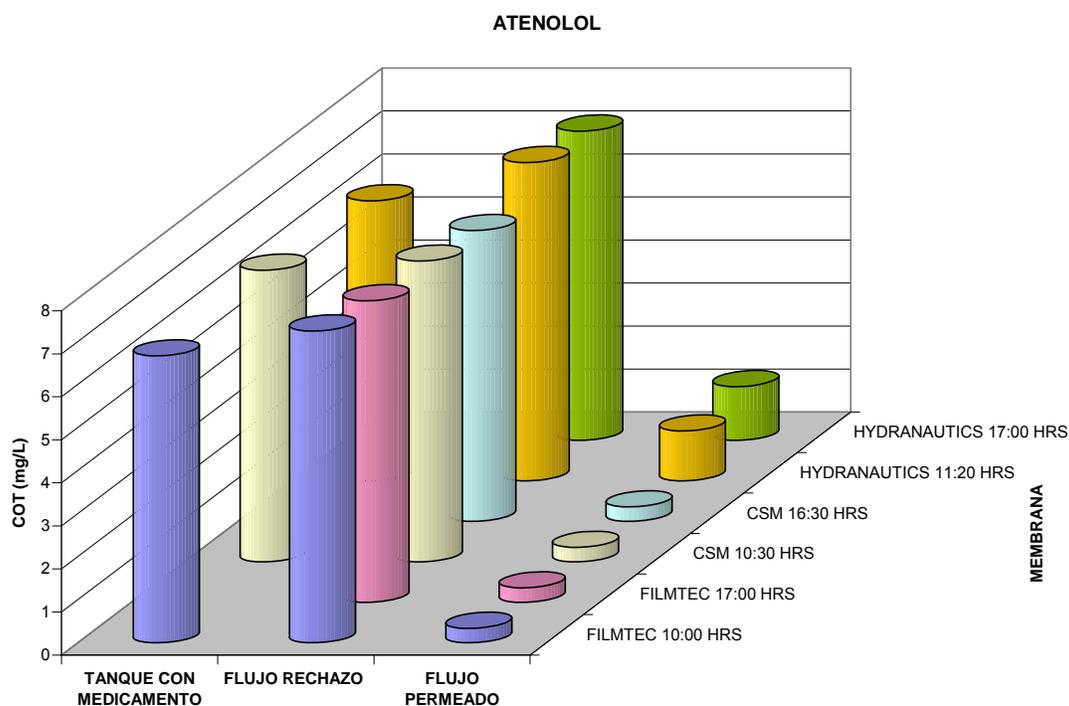


Fig. 26. Comportamiento de las membranas para remover Atenolol.

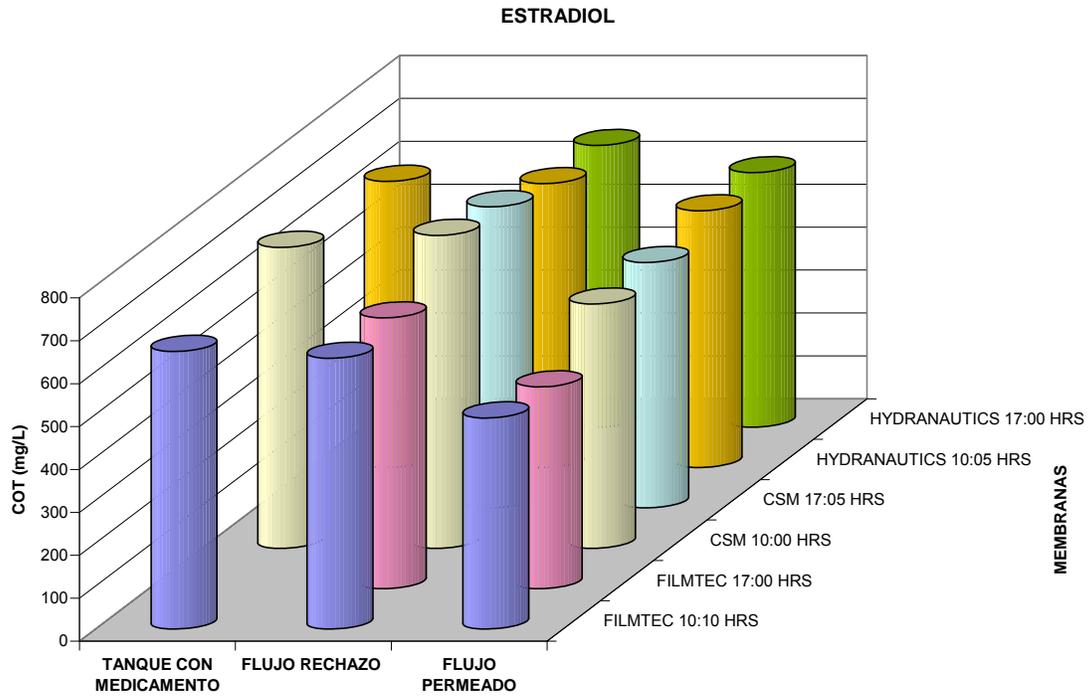


Fig. 27. Comportamiento de las membranas para remover Estradiol

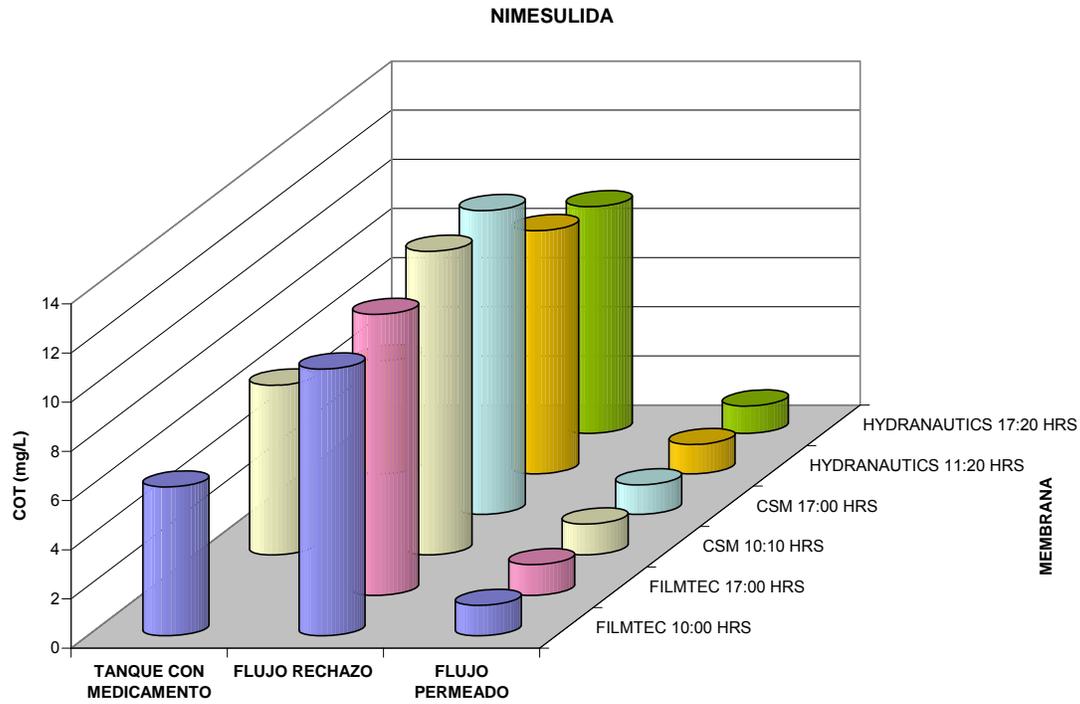


Fig. 28. Comportamiento de las membranas para remover Nimesulida.

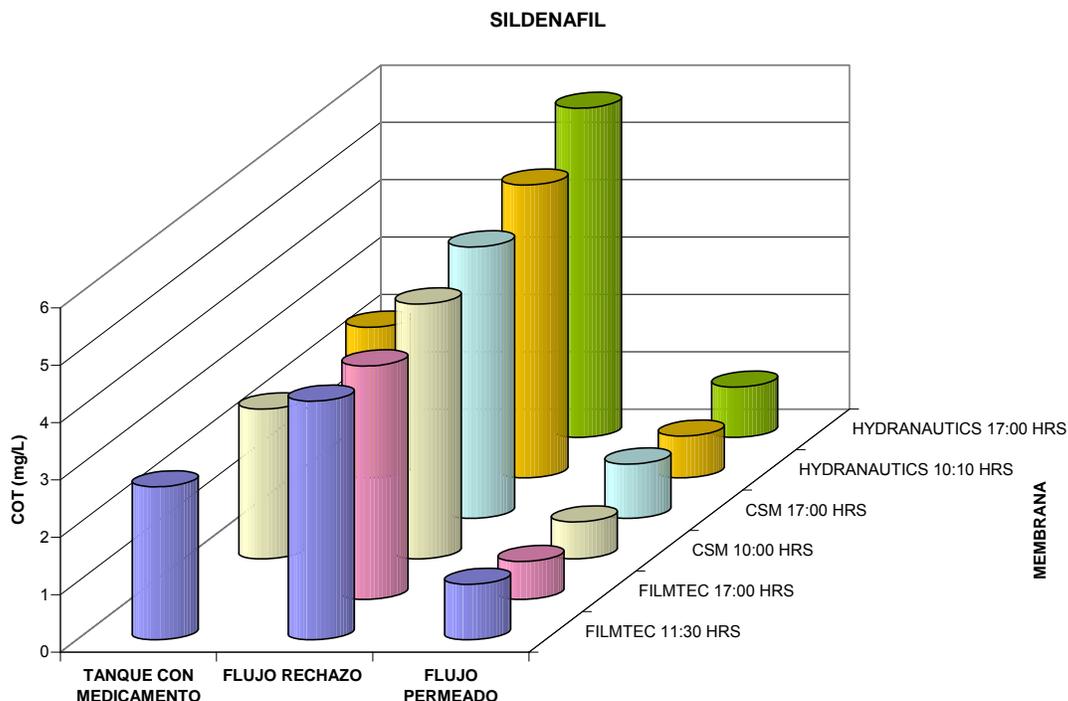


Fig. 29. Comportamiento de las membranas para remover Sildenafil.

Tanto la membrana NF90-4040 como la NE4040-90 son de un poro nominal más pequeño que la ESNA-LF1-4040, esta última tiene un rechazo nominal de 89% de NaCl mientras que para las otras dos el rechazo nominal es del 90%, así el comportamiento de las membranas es consistente con esta diferencia en el tamaño de poro.

Los resultados obtenidos son consistentes con los rechazos esperados, que se estimaron a partir del algoritmo de Bellona et al. Cabe aclarar que, en el caso del estradiol, dada su alta hidrofobicidad, fue necesario disolverlo en alcohol etílico, que es una molécula no polar y con un tamaño menor a 200 Da., y dado que la herramienta de cuantificación (Carbono orgánico total) no puede distinguir entre los distintos compuestos orgánicos presentes en el agua. Aún así se observó un rechazo moderado, pero es lógico suponer que la mayor parte del COT en el permeado está dado por el etanol.



REMOCIÓN DE CONTAMINANTES EMERGENTES DE IMPORTANCIA AMBIENTAL Y SANITARIA

SECRETARÍA DE
MEDIO AMBIENTE Y
RECURSOS NATURALES



Así pues, las membranas de nanofiltración utilizadas para remoción de atenolol, nimesulida y sildenafil resultaron ser eficaces, teniendo mejor desempeño las que tienen el rechazo nominal más alto (90%). En el caso del estradiol, el procedimiento utilizado no permitió una cuantificación adecuada.

5. BIBLIOGRAFÍA

- ATSDR. (2005). Public health assessment guidance manual. <http://www.atsdr.cdc.gov>
- Breitkopf, C., Kühne, R., and Schüürmann, G. 2000. Multimedia level-III and residence times of xenobiotics in water-rich and water-poor environments. *Environ. Toxicol. Chem.* **19** (5): 1430-1440
- Bellona, C. Drewes, J. Xu, P. Amy G. 2004. Factors affecting the rejection of organic solutes during NF/RO treatment—a literature review. *Water Research* 38(12): 2795-2809.
- Bellona, C. Drewes, J. 2007. Viability of a low – pressure nanofilter in treating recycled water for water reuse applications: A pilot – scale study. *Water Research* 41(17): 3948-3958.
- Bellona, C. Drewes, J. Oelker, G. Luna, J. Filteau, G. Amy, G. 2008. Comparing nanofiltration and reverse osmosis for drinking water augmentation. *Journal AWWA* 100(9): 102-116.
- Díaz-Barriga, F. 1999. Metodología de identificación y evaluación de riesgos para la salud en sitios contaminados. OPS/CEPIS/PUB/99.34. Lima
- Drewes, J.E. Bellona, C. Luna, J. Hoppe, C. Amy, G. Filteau, G. Oelker, G. Lee, N. Bender, J. Nagel, R. 2005. Can nanofiltration and ultra-low pressure reverse osmosis membranes replace RO for the removal of organic micropollutants, nutrients and bulk organic carbon? – A pilot-scale investigation. *WEFTEC* 2005: 7428-7440.
- Herwich, E., McKone, T., and Pease, W. 1999. Parameter uncertainty and variability in evaluative fate and exposure models. *Risk Analysis.* **19**(6): 1193-1204
- IEH. Institute for Environment and Health. 2004. A screening method for ranking chemicals by their fate and behaviour in the environment and potential toxic effects in humans following non-occupational exposure. IEH Web report. W14.
- IPCS-INCHEM. 2005. <http://www.inchem.org>
- Kim, S. D. Cho, J. Kim, I. S. Vanderford, B. J. Snyder, S. A. 2007. Occurrence and removal of pharmaceuticals and endocrine disruptors in South Korean surface, drinking and waste waters. *Water Research* 41(5): 1013-1021.
- Koyuncu, I. Arıkan, O. A. Wiesner, M. R. Rice, C. 2008. Removal of hormones and antibiotics by nanofiltration membranes. *Journal of Membrane Science* 309: 94-101.
- Kroupova, H., Machova, J., and Svobodova, Z. 2005. Nitrite influence of fish: a review. *Vet. Med. – Czech*, 50(11): 461–471
- Mackay, d., Paterson, S., and Shiu, S. 1992. Generic models for evaluating the regional fate of chemicals. *Chemosphere.* **24**: 695-717
- Mackay, D., Di Guardo, A., Paterson, s., Kicsi, G., and Cowan, C. 1996. Assessing the fate of new and existing chemicals: a five stage process. *Environ. Toxicol. Chem.* **15** (9): 1618-1626

- Mackay, D., Di Guardo, a., Paterson, S., and Cowan, C. E. 1996b. Evaluating the environmental fate of a variety of types of chemicals using the EQC model. *Environ. Toxicol. Chem.* **15** (9): 1627-1637
- Mackay, D., Sherp, S., Chahill, T., Gouin, T., Cousins, I., and Toose, L. 2001. Assessing the environmental persistence of a variety of chemical substances including metals. A report prepared for Environment Canada. CEMC Report No. 200104. Canadian Environmental Modelling Centre Trent University Peterborough, Ontario K9J 7B8 Canada
- MacLeod, M., and MacKone, D. Multimedia Persistence as an indicator of potential for population level intake of environmental contaminants. *Environ. Toxicol. Chem.* **23** (10): 2465-2472
- Nghiem, L.D. Schäfer, A.I. Elimelech, M. 2004. Removal of Natural Hormones by Nanofiltration Membranes: Measurement, Modeling, and Mechanisms. *Environmental Science Technology*, **38**(6): 1888-1896.
- PNUMA. 2003. Evaluación mundial sobre el mercurio. PNUMA-Productos Químico. Ginebra. Suiza
- Prüss A, Kay D, Fewtrell L, Bartram J 2003. Estimating the burden of disease from water, sanitation and hygiene at a global level. *Environmental Health Perspectives*. **110** (5): 537-542
- Radjenović, J. Petrović, M. Ventura, F. Barceló, D. 2008. Rejection of pharmaceuticals in nanofiltration and reverse osmosis membrane drinking water treatment. *Water Research* **42**: 3601-3610.
- Rowe, B., Lndrigan, S., Lopes, T. 1997. Summary of published aquatic toxicity information and water-quality criteria for selected volatile organic compounds. U. S. Geological Survey. U. S. Department of Interior. Open File Report 97-563
- Wania, F., and MacKay, D. 2000. A Comparison of overall persistence values and atmospheric travel distances calculated by various Multi-Media Fate Models. WECC Report 2/2000. WECC Wania Environmental Chemists Corp. Canada
- Webster, E., MacKay, D., and Wania, F. 1998. Evaluating environmental persistence. *Environ. Toxicol. Chem.* **17**: 2148-2158.
- Woolhouse, M., and S. Gowtage-Sequeria. 2005. Host range and emerging and reemerging pathogens. *Emerging Infectious Diseases*. **11**(12): 1842-1847
- Xu, P. Drewes, J. E. Bellona, C. Amy, G. Kim T.-U. Adam, M. Heberer, T. 2005. Rejection of Emerging Organic Micropollutants in Nanofiltration-Reverse Osmosis Membrane Applications. *Water Environment Research* **77**(1): 40-48.
- Zhang, Y. Causserand, C. Aimar, P. Cravedi, J.P. 2006. Removal of bisphenol A by nanofiltration membrane in view of drinking water production. *Water Research* **40**: 3793-3799.



REMOCIÓN DE CONTAMINANTES
EMERGENTES DE IMPORTANCIA
AMBIENTAL Y SANITARIA

SECRETARÍA DE
MEDIO AMBIENTE Y
RECURSOS NATURALES



ANEXO. SALIDA DE LOS MODELOS EPISUITE