



UNIVERSIDAD DE
MANIZALES

**ANÁLISIS DEL RIESGO AMBIENTAL POTENCIAL POR
COMPUESTOS ORGÁNICOS PRESENTES EN AGUAS DEL RÍO
CAUCA, A SU PASO POR LA ZONA URBANA DE LA CIUDAD DE
CALI (COLOMBIA)**

GLORÍA A. JIMÉNEZ-BOTERO

&

ALEJANDRO SOTO-DUQUE

Universidad de Manizales
Facultad de Ciencias Contables, Económicas y Administrativas
Maestría en Desarrollo Sostenible y Medio Ambiente
Manizales, Colombia

2014

**ANÁLISIS DEL RIESGO POTENCIAL POR COMPUESTOS
ORGÁNICOS PRESENTES EN AGUAS DEL RÍO CAUCA, A SU
PASO POR LA ZONA URBANA DE LA CIUDAD DE CALI
(COLOMBIA)**

GLORÍA A. JIMÉNEZ-BOTERO

Química

&

ALEJANDRO SOTO-DUQUE

Químico

Trabajo de investigación presentado como requisito parcial para optar al título de:

Magister en Desarrollo Sostenible y Medio Ambiente

Asesor

RICARDO ALVAREZ-LEÓN

Biólogo Marino, Magister en Oceanografía

Universidad de Manizales

Facultad de Ciencias Contables, Económicas y Administrativas

Maestría en Desarrollo Sostenible y Medio Ambiente

Manizales, Colombia

2014

CONTENIDO

RESUMEN	16
ABSTRACT	17
2. PLANTEAMIENTO DEL PROBLEMA	18
3. JUSTIFICACIÓN.	19
4. OBJETIVOS	20
4.1. OBJETIVO GENERAL.	20
4.2 OBJETIVOS ESPECÍFICOS:	20
5. MARCO TEÓRICO Y ESTADO DEL ARTE.	21
5.1 Antecedentes	21
5.2 Contaminación del Río Cauca desde su nacimiento hasta la zona de estudio.	25
5.3 Estudio de pesticidas en el Valle Alto del Río Cauca.	26
5.4 El coeficiente de partición octanol-agua (Kow), y su relación con el riesgo de bio-acumulación, y el factor de bio-concentración - FBC.	29
5.5 Modelos QSAR, cuantificación de la estructura química y la actividad biológica, y su relación con el LogKow.	31
5.6 Riesgo ambiental por compuestos orgánicos en ríos en el mundo.	35
5.7 Sistema Globalmente Armonizado - SGA, estándar internacional para la comunicación y clasificación de los peligros de los productos químicos.	39
6. METODOLOGÍA	44
6.1 ZONA DE ESTUDIO	44
6.2 TÉCNICAS E INSTRUMENTOS PARA LA RECOLECCIÓN DE LA INFORMACIÓN Y SU ANÁLISIS:	45
7. RESULTADOS.	48
7.1 ESTACIÓN E1, PUENTE EL HORMIGUERO.	48
7.1.2 ANÁLISIS DEL RIESGO POTENCIAL POR COMPUESTOS ORGÁNICOS HALLADOS EN LA ESTACIÓN 1 (PUENTE HORMIGUERO).	49
7.1.2.1 Bencenometanol,4-hidroxi-	49

7.1.2.2	Butilhidroxitolueno- BHT.	50
7.1.2.3	1H-inden-1-ona, 2,3-dihidro-	53
7.1.2.4.	4-Cianotiofenol	54
7.1.2.5	Vitamina A aldehído	55
7.1.2.6	Ftalato de di-n-butilo	56
7.1.2.7	(2-dodecen-1-il) anhídrido succínico.	57
7.1.2.8	Etil-iso allocholate	58
7.1.2.9	Forbol	58
7.1.2.10	Ácido 11,13-dihidroxi-tetradec-5-inoico, éster de metilo	59
7.1.2.11	2-hidroxi-4 ,4,8-trimetiltriciclo [6.3.1.0 (1,5)] dodecan-9-ona	59
7.1.2.12	2-metil-Z, Z-3 ,13-octadecadienol	60
7.1.2.13	7,7-dimetilbiciclo [2.2.1] hept-acetato de 2-il	61
7.1.2.14	1,1'-(4-Metil-1,3-fenilene)bis{3-[5-(p-tolil)-1,3,4-tiadi	61
7.1.3	EVALUACIÓN DEL RIESGO POTENCIAL DE LOS COMPUESTOS ORGÁNICOS EN EL PUENTE HORMIGUERO.	61
7.1.3.1	Evaluación del riesgo potencial de acuerdo a las fichas de seguridad – MSDS, y la información del Sistema Globalmente Armonizado de Clasificación y Etiquetado de Productos Químicos – SGA.	61
7.1.3.2	Evaluación del riesgo potencial por bio-acumulación, y el potencial de bio-concentración de acuerdo al valor del coeficiente de partición octanol-agua $Kow = XlogP3:AA$.	63
7.2.	ESTACIÓN DESEMBOCADURA CANAL INTERCEPTOR CVC – SUR, E2.	64
7.2.1	ANÁLISIS DEL RIESGO POTENCIAL DE SUSTANCIAS ORGÁNICAS HALLADAS EN LA ESTACIÓN 2 (DESEMBOCADURA CANAL INTERCEPTOR CVC – SUR).	65
7.2.1.1	Ácido ursodeoxicólico	65
7.2.1.2	1,4-dimetil-7-isopropilazuleno	66
7.2.1.3	4 - (1,1,3,3-tetrametil-butil) fenol	67
7.2.1.4	Éster etílico del ácido linoleico	69

7.2.1.5	Fenol, 2-metil-4-(1,1,3,3-tetrametil-butil)-	70
7.2.1.6	N-nonacosano	71
7.2.1.7	Androsta-5 ,14-dien-17-ona, 3-hidroxi-	73
7.2.1.8	4a-formil-7alpha-hidroxi-1-metil-8-metilideno-4aalpha, 4bbeta-gibbane-1 alfa, ácido 10beta-dicarboxílico	73
7.2.1.9	Ácido palústrico	74
7.2.1.10	Octadecano, 3-etil-5-(2-etilbutilo) -	75
7.2.1.11	Etil-iso allocholate	75
7.2.1.12	Butil Ricinoleate	75
7.2.1.13	1-Heptatriacotanol	76
7.2.1.14	Ciclohexanona, 2-ciclohexilideno-	76
7.2.1.15	4-hexil-1-(7-metoxicarbonilheptil) biciclo [4.4.0] deca-2 ,5,7-trieno-	77
7.2.1.16	Ácido Ciclopropanobutanoico, 2 - [[2 - [[2 - [(2-pentilcyclopropil) metil] ciclopropil] metil] ciclopropil] metil] -, éster metílico	78
7.2.2.	EVALUACIÓN DEL RIESGO POTENCIAL POR COMPUESTOS ORGÁNICOS EN LA (DESEMBOCADURA CANAL INTERCEPTOR CVC - SUR)	78
7.2.2.1.	Evaluación del riesgo potencial de acuerdo a las fichas de seguridad – MSDS, y la información del Sistema Globalmente Armonizado de Clasificación y Etiquetado de Productos Químicos – SGA.	78
7.2.2.2	Evaluación del riesgo potencial por bio-acumulación, y el potencial de bio-concentración de acuerdo al valor del coeficiente de partición octanol-agua Kow= XlogP3:AA.	80
7.3.	ESTACIÓN BOCATOMA DE LA PLANTA DE POTABILIZACIÓN – PUERTO MALLARINO, E3.	81
7.3.1	ANÁLISIS DEL RIESGO POTENCIAL POR COMPUESTOS ORGÁNICOS HALLADOS EN LA ESTACIÓN 3 (PLANTA DE POTABILIZACIÓN – PUERTO MALLARINO).	82
7.3.1.1	Butilhidroxitolueno- BHT.	82
7.3.1.2	Ftalato de di-n-butilo.	82
7.3.1.3	Forbol	82

7.3.1.4	1,3-benzodioxol, 5 - [1 - [2 - (2-butoxi) etoxi] butil] -.	82
7.3.1.5	Éster etílico del ácido palmítico.	83
7.3.1.6	Alcohol salicílico	84
7.3.1.7	2-[4-metil-6-(2,6,6-trimetilciclohex-1-enil) hexa-1 ,3,5-trienil] ciclohex-1-en-1-carboxaldehído	84
7.3.1.8	7,8-Epoxilano-11-ol, 3-acetoxi-	85
7.3.1.9	7-isopropil-1-metil-1, 2,3,4,4 a, 9,10,10 a-octahidrofenantreno	86
7.3.1.10	Phen-1 ,4-diol, 2,3-dimetil-5-trifluorometil-2,3-dimetil-5-(trifluorometil) benceno-1 ,4-diol	86
7.3.1.11	L-lisina, N6-[(1,1-dimetil-etoxi) carbonil]-N2-[(9H-fluoren-9-ilmetoxi) carbonil] –	87
7.3.1.12	Fenilalanina, ácido 4-amino-Nt-butiloxicarbonil-, éster t-butilo	87
7.3.2	EVALUACIÓN DEL RIESGO POTENCIAL POR COMPUESTOS ORGÁNICOS EN LA BOCATOMA DE LA PLANTA DE POTABILIZACIÓN – PUERTO MALLARINO.	88
7.3.2.1	Evaluación del riesgo potencial de acuerdo a las fichas de seguridad – MSDS, y la información del Sistema Globalmente Armonizado de Clasificación y Etiquetado de Productos Químicos – SGA.	88
7.3.2.2	Evaluación del riesgo potencial por bio-acumulación, y el potencial de bio-concentración de acuerdo al valor del coeficiente de partición octanol-agua K_{ow} = $X_{logP3:AA}$.	89
7.4.	ESTACIÓN PUENTE DE JUANCHITO, E4.	90
7.4.1	ANÁLISIS DEL RIESGO POTENCIAL POR COMPUESTOS ORGÁNICOS HALLADOS EN LA ESTACIÓN 4 (PUENTE DE JUANCHITO).	91
7.4.1.1	4H-tiopirano, 4 - (2,6-dimetil-4H-tiopiran-4-iliden) -2,6-dimetil-	91
7.4.1.2	Ftalato de di-iso-octilo	92
7.4.1.3	7,8-Epoxilano-11-ol, 3-acetoxi-	93
7.4.1.4	Ingol 12-acetato	93
7.4.1.5	Ácido dodecanoico,éster, [1aR-(1a.alpha, 2 alpha, 5.beta, 5a.beta, 8a.alpha, 9.alpha, 10a.alpha.....)]	94

7.4.1.6	1H-ciclopropa[3,4]benzo[1,2-E]azulen-9-yl acetato	94
7.4.1.7	2(3H)-benzotiazolona	95
7.4.1.8	2-[4-metil-6-(2,6,6-trimetilciclohex-1-enil) hexa-1 ,3,5-trienil] ciclohex-1-en-1-carboxaldehído	96
7.4.1.9	Ácido 6-hidroxi-2-metil-4-oxo-1H-piridina-3-carboxílico-	96
7.4.1.10	1H-2,8a-Metano ciclopentano[a]ciclopropano[e]ciclododecano-	96
7.4.1.11	Etil-iso allocholate	97
7.4.1.12	2,4,7,14-tetrametil-4-vinil-triciclo [5.4.3.0 (1,8)] tetradecan-6-ol	97
7.4.2.	EVALUACIÓN DEL RIESGO POTENCIAL DE COMPUESTOS ORGÁNICOS EN EL PUENTE DE JUANCHITO.	98
7.4.2.1	Evaluación del riesgo potencial de acuerdo a las fichas de seguridad – MSDS, y la información del Sistema Globalmente Armonizado de Clasificación y Etiquetado de Productos Químicos – SGA.	98
7.4.2.2	Evaluación del riesgo potencial por bio-acumulación, y el potencial de bio-concentración de acuerdo al valor del coeficiente de partición octanol-agua $K_{ow} = X_{logP3:AA}$.	98
7.5.	ESTACIÓN DESEMBOCADURA DEL RÍO CALI, E5.	99
7.5.1	ANÁLISIS DEL RIESGO POTENCIAL POR COMPUESTOS ORGÁNICOS HALLADOS EN LA ESTACIÓN 5 (DESEMBOCADURA RÍO CALI).	101
7.5.1.1.	Alcohol salicílico	101
7.5.1.2.	Bencenometanol, 4-hidroxi-	101
7.5.1.3	1,3-benzodioxol, 5 - [1 - [2 - (2-butoxi) etoxi] butil] -	101
7.5.1.4	2-[4-metil-6-(2,6,6-trimetilciclohex-1-enil) hexa-1 ,3,5-trienil] ciclohex-1-en-1-carboxaldehído-t	101
7.5.1.5	Ácido pimárico	101
7.5.1.6	Butanoico, éster, [1aR-(1a.alpha, 2.alpha, 5.beta, 5a.beta, 8a.alpha, 9.alpha, 10a.alpha.....)] -	102
7.5.1.7	4-hexil-1-(7-metoxicarbonilheptil) biciclo [4.4.0] deca-2 ,5,7-trieno-	103
7.5.1.8	5-(hidroximetil) -1,1,4-trimetil-un 6-metilideno-3, 4,5,7,8,8 naftalen-a-hexahidro-2H-2-ol	103

7.5.1.9	Androsta-5 ,14-dien-17-ona, 3-hidroxi-	104
7.5.1.10	Octadecano, 3-etil-5-(2-etilbutilo) -	104
7.5.1.11	1H-ciclopropa[3,4]benzo[1,2-E]azulen-9-yl acetato	104
7.5.1.12	7,8-Epoxilano-11-ol, 3-acetoxi-	104
7.5.1.13	2,4,7,14-tetrametil-4-vinil-triciclo [5.4.3.0 (1,8)] tetradecan-6-ol	104
7.5.1.14	4-(3,3-Dimetil-but-1inil)-4-hidroxi-2,6,6-trimetilcic	104
7.5.2.	EVALUACIÓN DEL RIESGO POTENCIAL DE COMPUESTOS ORGÁNICOS EN LA DESEMBOCADURA DEL RÍO CALI.	104
7.5.2.1	Evaluación del riesgo potencial de acuerdo a las fichas de seguridad – MSDS, y la información del Sistema Globalmente Armonizado de Clasificación y Etiquetado de Productos Químicos – SGA.	104
7.5.2.2	Evaluación del riesgo potencial por bio-acumulación, y el potencial de bio-concentración de acuerdo al valor del coeficiente de partición octanol-agua K_{ow} = $X_{logP3:AA}$.	105
7.6.	ANÁLISIS DEL RIESGO POTENCIAL POR COMPUESTOS ORGÁNICOS EN LA ZONA DE ESTUDIO.	107
7.6.1	Análisis del riesgo de acuerdo a las categorías de toxicidad, para los compuestos orgánicos hallados en cinco estaciones de muestreo del Río Cauca.	107
7.6.2	Análisis del riesgo potencial de acuerdo a los potenciales de bio-acumulación y bio-concentración, para los compuestos orgánicos hallados en cinco estaciones de muestreo del Río Cauca.	108
7.6.3	Análisis del riesgo potencial de acuerdo a las categorías de toxicidad, bio-cumulación, potencial de bio-concentración y variación espacial para los compuestos orgánicos hallados en cinco estaciones de muestreo del Río Cauca.	109
8.	DISCUSIÓN.	111
9.	CONCLUSIONES.	118
10.	BIBLIOGRAFÍA	120
11.	ANEXOS	140

LISTA DE TABLAS

Tabla 1. Resultados académicos del proyecto. Evaluación de la actividad mutagénica del río Cauca en el área urbana de la Ciudad de Cali- Colombia, por medio del test de Ames.	24
Tabla 2. Estudio de pesticidas en aguas del Río Cauca, y la Laguna de Sonso en el Valle Alto.	27
Tabla 3. Afinidad de las sustancias químicas con los diferentes compartimientos ambientales en función de las características fisicoquímicas de las moléculas.	30
Tabla 4. Estado de los sistemas de tratamiento aguas residuales en Colombia, 2006.	39
Tabla 5. Clasificación de peligros según el SGA.	40
Tabla 6. Toxicidad acuática aguda y crónica, y su relación con el Log Kow, y el FBC.	43
Tabla 7. Escala colorimétrica para cada categoría de toxicidad.	46
Tabla 8. Escala colorimétrica de la relación entre el log Kow, y el riesgo de bio-acumulación en organismos acuáticos.	47
Tabla 9. Escala colorimétrica del riesgo entre los valores del log Kow y el potencial de bio-concentración.	47
Tabla 10. Matriz de análisis del riesgo potencial por compuestos orgánicos encontrados en la zona de estudio.	47
Tabla 11. Caracterización del riesgo, información toxicológica, ecológica y regulatoria del Benzenemethanol, 4-Hydroxy.	149
Tabla 12. Caracterización del riesgo, información toxicológica, ecológica y regulatoria del Butilhidroxitolueno - BHT.	150
Tabla 13. Caracterización del riesgo, información toxicológica, ecológica y regulatoria del 1H-inden-1-ona, 2,3-dihidro-.	151
Tabla 14. Caracterización del riesgo, información toxicológica, ecológica y regulatoria del 4-Thiobenzonitrile.	152
Tabla 15. Caracterización del riesgo, información toxicológica, ecológica y regulatoria de Vitamina A aldehído.	153
Tabla 16. Caracterización del riesgo, información toxicológica, ecológica y regulatoria de Ftalato de di-n-butilo.	154
Tabla 17. Caracterización del riesgo, información toxicológica, ecológica y regulatoria de (2-dodecen-1-il) anhídrido succínico.	155
Tabla 18. Evaluación del riesgo potencial por categorías de toxicidad para compuestos orgánicos en la Estación 1.	62
Tabla 19. Calificación del riesgo potencial por bio-acumulación y el potencial de bio-concentración por compuestos orgánicos en la Estación 1.	63
Tabla 20. Caracterización del riesgo, información toxicológica, ecológica y regulatoria de Ácido ursodeoxicólico.	156
Tabla 21. Caracterización del riesgo, información toxicológica, ecológica y regulatoria del 1,4-dimetil-7-isopropilazuleno.	157
Tabla 22. Caracterización del riesgo, información toxicológica, ecológica y regulatoria del 4 - (1,1,3,3-tetrametil-butil) fenol.	158
Tabla 23. Caracterización del riesgo, información toxicológica, ecológica y regulatoria del Éster etílico del ácido linoleico.	159
Tabla 24. Caracterización del riesgo, información toxicológica, ecológica y regulatoria del Fenol, 2-metil-4-(1,1,3,3-tetrametil-butil)-.	160
Tabla 25. Caracterización del riesgo, información toxicológica, ecológica y regulatoria del N-nonacosano.	161
Tabla 26. Caracterización del riesgo, información toxicológica, ecológica y regulatoria	162

del Ácido palústrico.	
Tabla 27. Caracterización del riesgo, información toxicológica, ecológica y regulatoria del Butil Ricinoleate.	163
Tabla 28. Evaluación del riesgo potencial por categoría de toxicidad por compuestos orgánicos en la Estación 2.	79
Tabla 29. Evaluación del riesgo potencial por bio- acumulación y el potencial de bio- concentración por compuestos orgánicos en la Estación 2.	80
Tabla 30. Caracterización del riesgo, información toxicológica, ecológica y regulatoria del Palmitic acid ethyl ester.	164
Tabla 31. Caracterización del riesgo, información toxicológica, ecológica y regulatoria del 2-Hydroxybenzyl alcohol.	165
Tabla 32. Caracterización del riesgo, información toxicológica, ecológica y regulatoria del L-lisina, N6-[(1,1-dimetil-etoxi) carbonil]-N2-[(9H-fluoren-9-ilmetoxi) carbonil] –	166
Tabla 33. Evaluación del riesgo potencial por categorías de toxicidad para compuestos orgánicos en la Estación 3.	89
Tabla 34. Evaluación del riesgo potencial por bio- acumulación y el potencial de bio- concentración por compuestos orgánicos en la Estación 3.	90
Tabla 35. Caracterización del riesgo, información toxicológica, ecológica y regulatoria del Ftalato de di-iso-octilo.	167
Tabla 36. Caracterización del riesgo, información toxicológica, ecológica y regulatoria del 2-Hydroxybenzothiazole.	168
Tabla 37. Evaluación del riesgo potencial por categorías de toxicidad para compuestos orgánicos en la Estación 4.	98
Tabla 38. Evaluación del riesgo por bio- acumulación y el potencial de bio- concentración por compuestos orgánicos en la Estación 4.	99
Tabla 39. Caracterización del riesgo, información toxicológica, ecológica y regulatoria del IsoÁcido pimárico.	169
Tabla 40. Evaluación del riesgo potencial por categorías de toxicidad para compuestos orgánicos en la Estación 5.	105
Tabla 41. Evaluación del riesgo por bio- acumulación y el potencial de bio- concentración por compuestos orgánicos en la Estación 5.	106
Tabla 42. Análisis del riesgo potencial de sustancias por categoría de peligro en todas las estaciones.	107
Tabla 43. Análisis del riesgo por bio-acumulación y potencial de bio-concentración en la zona de estudio.	108
Tabla 44. Análisis del riesgo por categorías de toxicidad, bio-acumulación, bio- concentración y variación espacial en la zona de estudio	109

LISTA DE FIGURAS

Figura 1. Pictogramas y clases de peligro del SGA	42
Figura 2. Mapa de la Ciudad de Cali indicando los puntos de muestreo en el Río Cauca.	44
Figura 3. Área de la estación de muestreo de El Puente Hormiguero (E1)	48
Figura 4. Imagen 2D del compuesto Bencenometanol, 4-hidroxi-	49
Figura 5. Imagen 2D de la sustancia Butilhidroxitolueno – BHT.	51
Figura 6. Mecanismo de producción de apoptosis producida por monofenoles.	53
Figura 7. Estructura molecular del 1H-inden-1-ona, 2,3-dihidro-, en 2D.	54
Figura 8. Estructura molecular del 4-Thiobenzonitrilo, en 2D.	55
Figura 9. Estructura molecular de Vitamina A aldehído, en 2D.	56
Figura 10. Estructura molecular de Ftalato de di-n-butilo, en 2D.	57
Figura 11. Estructura molecular de (2-dodecen-1-il) anhídrido succínico, en 2D.	58
Figura 12. Estructura molecular de Etil-iso allocholate en 2D.	58
Figura 13. Estructura molecular de Forbol en 2D.	59
Figura 14. Estructura molecular de Ácido 11,13-dihidroxi-tetradec-5-inoico, éster de metilo en 2D.	59
Figura 15. Estructura molecular de 2-Hydroxy-4,4,8-trimethyltricyclo[6.3.1.0(1,5)]-dodecan- en 2D.	60
Figura 16. Estructura molecular de 2-metil-Z, Z-3 ,13-octadecadienol en 2D.	60
Figura 17. Estructura molecular de 7,7-dimetilbicyclo [2.2.1] hept-acetato de 2-il en 2D.	61
Figura 18. Área de la estación de muestreo de la Desembocadura Canal Interceptor CVC – Sur.	64
Figura 19. Imagen 2D del compuesto Ácido ursodeoxicólico.	66
Figura 20. Imagen 2D del compuesto 1,4-dimetil-7-isopropilazuleno.	67
Figura 21. Imagen 2D del compuesto Phenol, 4-(1,1,3,3 tetramethylbutyl)-	68
Figura 22. Imagen 2D del compuesto Éster etílico del ácido linoleico	70
Figura 23. Imagen 2D del compuesto Fenol, 2-metil-4-(1,1,3,3-tetrametil-butyl)–	71
Figura 24. Imagen 2D del compuesto N-nonacosano	72
Figura 25. Imagen 2D del compuesto Androsta-5 ,14-dien-17-ona, 3-hidroxi-	73
Figura 26. Imagen 2D del compuesto 4a-formil-7alpha-hidroxi-1-metil-8-metilideno-4aalpha, 4bbeta-gibbane-1 alfa, ácido 10beta-dicarboxílico	74
Figura 27. Imagen 2D del compuesto Ácido palústrico	74
Figura 28. Imagen 2D del compuesto Octadecano, 3-etil-5-(2-etilbutilo) -	75
Figura 29. Estructura molecular de Butil Ricinoleate en 2D.	75
Figura 30. Estructura molecular de 1-Heptatriacotanol en 2D.	76
Figura 31. Estructura molecular de Ciclohexanona, 2-ciclohexilideno- en 2D.	77
Figura 32. Estructura molecular de 4-Hexyl-1-(7-methoxycarbonylheptyl)-bicyclo[4.4.0]deca- - en 2D.	77
Figura 33. Estructura molecular en 2D de: Cyclopropanebutanoic acid, 2-[[2-[[2-[(2-pentylcyclopropyl)methyl]cyclopropyl]methyl]cyclopropyl]methyl]-methyl ester.	78
Figura 34. Área de la estación de muestreo E3, Planta de Potabilización – Puerto Mallarino	82
Figura 35. Estructura molecular de 1,3-benzodioxol, 5 - [1 - [2 - (2-butoxi)etoxi] butil] - en 2D.	83
Figura 36. Estructura molecular de Éster etílico del ácido palmítico en 2D.	83

Figura 37. Estructura molecular de Alcohol salicílico en 2D y 3D.	84
Figura 38. Estructura molecular de 2-[4-metil-6-(2,6,6-trimetilciclohex-1-enil) hexa-1,3,5-trienil] ciclohex-1-en-1-carboxaldehído, en 2D.	85
Figura 39. Estructura molecular de 7,8-Epoxilano-11-ol, 3-acetoxi-en 2D.	85
Figura 40. Estructura molecular de 7-isopropil-1-metil-1, 2,3,4,4 a, 9,10,10 a-octahidrofenantreno en 2D.	86
Figura 41. Estructura molecular de Phen-1,4-diol, 2,3-dimetil-5-trifluorometil-2,3-dimetil-5-(trifluorometil) benceno-1,4-diol en 2D.	86
Figura 42. Estructura molecular de L-lisina, N6-[(1,1-dimetil-etoxi) carbonil]-N2-[(9H-fluoren-9-ilmetoxi) carbonil] – en 2D Y 3 D.	87
Figura 43. Estructura molecular de Fenilalanina, ácido 4-amino-Nt-butiloxicarbonil-, éster t-butilo en 2D.	88
Figura 44. Área de la estación de muestreo de Puente de Juanchito (E4).	91
Figura 45. Imágenes 2D de la sustancia 4H-tiopirano, 4 - (2,6-dimetil-4H-tiopiran-4-iliden) -2,6-dimetil-.	92
Figura 46. Imagen 2D de la sustancia: 1,2-Benzenedicarboxilic acid, iisooctylester.	92
Figura 47. Imagen 2D de la sustancia: Ingol 12-acetato.	94
Figura 48. Imagen 2D de la sustancia: Ácido dodecanoico,éster, [1aR-(1a.alpha, 2 alpha, 5.beta, 5a.beta, 8a.alpha, 9.alpha, 10a.alpha.....)] .	94
Figura 49. Imagen 2D de la sustancia: 1H-ciclopropa[3,4]benzo[1,2-E]azulen-9-yl acetato.	95
Figura 50. Estructura molecular de 2(3H)-benzotiazolona en 2D.	95
Figura 51. Estructura molecular de Ácido 6-hidroxi-2-metil-4-oxo-1H-piridina-3-carboxílico- en 2D.	96
Figura 52. Estructura molecular de: 1H-2,8a-Metano ciclopentano[a]ciclopropano[e]ciclodecano- en 2D.	97
Figura 53. Estructura molecular de 2,4,7,14-tetrametil-4-vinil-triciclo [5.4.3.0 (1,8)] tetradecan-6-ol en 2D	97
Figura 54. Área de la estación de muestreo de la Desembocadura del Río Cali (E5).	100
Figura 55. Imagen 2D de la sustancia: Ácido pimárico.	102
Figura 56. Imagen 2D de la sustancia: Butanoicacid, 1a,2,5,5a,6,9,10,	102
Figura 57. Imagen 2D de la sustancia: 5-(hidroximetil) -1,1,4-trimetil-un 6-metilideno-3, 4,5,7,8,8 naftalen-a-hexahidro-2H-2-ol.	103

LISTA DE ANEXOS

ANEXO 1. Espectros de masa de algunos de los compuestos orgánicos hallados en los sitios de muestreo utilizando los cromatogramas tomados en el modo scan.	140
ANEXO 2. Caracterización del riesgo, información toxicológica, ecológica y regulatoria de compuestos orgánicos de la estación Puente Hormiguero - E1.	149
ANEXO 3. Caracterización del riesgo, información toxicológica, ecológica y regulatoria de compuestos orgánicos de la estación, Desembocadura Canal Interceptor CVC – Sur - E2.	156
ANEXO 4. Caracterización del riesgo, información toxicológica, ecológica y regulatoria de compuestos orgánicos de la estación, Bocatoma de la Planta de Potabilización – Puerto Mallarino – E3.	164
ANEXO 5. Caracterización del riesgo, información toxicológica, ecológica y regulatoria de compuestos orgánicos de la estación Puente Juanchito – E4.	167
ANEXO 6. Caracterización del riesgo, información toxicológica, ecológica y regulatoria de compuestos orgánicos de la estación Desembocadura río Cali – E5.	169
ANEXO 7. Ponencia presentada en el XLVIII, Congreso Nacional de Ciencias Biológicas, Bogotá, Octubre 2013.	170

DEDICATORIA

Dedicamos este logro a nuestros padres: Flor, Mireya, Aldemar y Heriberto, quienes con su tesón y fortaleza nos enseñaron a no desfallecer ante los tropiezos que pudiéramos tener, mostrándonos siempre el camino a seguir, nos inculcaron principios y valores, educándonos de la mejor manera posible, siempre nos apoyaron y alentaron en todas nuestras decisiones para que lográramos nuestros sueños, para ellos con mucho cariño va este logro que hemos alcanzado en este momento de nuestras vidas, sin su apoyo no hubiera sido posible.

A nuestros hermanos, sobrinos y cuñadas, quienes han sido un soporte importante para nosotros.

AGRADECIMIENTO

A nuestras familias, por apoyarnos y hacer posible este trabajo.

A nuestro asesor Ricardo Álvarez-León, por su sapiencia y tesón, por su impulso cuando nos veía desfallecer, gracias.

En especial a nuestros dos grandes amigos Eliza y Álvaro, quienes nos mostraron el camino por el cual transitamos hoy, sin su visión no lo habiéramos logrado.

A la Universidad Autónoma de Occidente, por su apoyo para que pudiéramos realizar nuestros estudios.

RESUMEN

Esta propuesta de investigación parte de algunos resultados encontrados en el proyecto: “**Evaluación de la actividad mutagénica del Río Cauca en el área urbana de la Ciudad de Cali - Colombia, por medio del test de Ames**”, el cual fue apoyado por COLCIENCIAS, y realizado por las Universidades: Autónoma de Occidente y del Valle (Larmat *et al.*, 2009). En esta investigación se determinó la mutagéncidad de las aguas del Río Cauca en el tramo del puente El Hormiguero (límite político-administrativo entre los departamentos del Cauca y del Valle del Cauca), hasta la desembocadura con el Río Cali, utilizando el test de Ames. Igualmente, con el propósito de identificar algunas de las sustancias orgánicas e inorgánicas responsables de la respuesta mutagénica, se realizaron análisis químicos a las muestras para determinar la presencia de los metales pesados: mercurio, plomo, cromo y cadmio. Así como también la determinación de los pesticidas: diazinón, lindano, clordano, clorpirifos, etil-paratión, malation, heptaclor, aldrin, α -endosulfan, y de compuestos orgánicos.

A partir de los resultados obtenidos en la investigación, se planteó realizar el presente proyecto: **Análisis del riesgo potencial por compuestos orgánicos presentes en aguas del Río Cauca, a su paso por la zona urbana de la ciudad de Cali, Colombia**. Para el análisis del riesgo de los compuestos identificados en cada una de las estaciones de muestreo, se realizó búsqueda en bases de datos: NCBI Pubmed, NCBI Pubchemcompound, MSDS, HSDB TOXNET, NCBI Pubchembioassay, SIGMA ALDRICH, Cepis, bvsde.paho.org, y oms.ops.org.

Algunos de los compuestos orgánicos encontrados, se registran en las bases de datos, como sustancias que ocasionan disrupción endocrina. Igualmente de la base de datos NCBI Pubchemcompound, se obtuvo el valor del Coeficiente de partición octanol-agua: XlogP3-AA, el cual indica el riesgo de bio-acumulación, y el potencial de bioconcentración. Encontrándose en la estación E2, Canal sur-oriental, las sustancias con el mayor valor de bio-acumulación, y potencial de bioconcentración. Igualmente la búsqueda en la base de datos MSDS, encontró para la misma estación, el 33,3% de sustancias con toxicidad categoría 1, frente a un 16.6% de las otras estaciones. Lo anterior, indica que los efluentes de esta estación, generan el mayor riesgo para el Río Cauca, a su fauna y flora acuática, así como para la salud pública. Este trabajo permitió por primera vez, analizar el riesgo potencial que pueden tener las aguas del Río Cauca, por la presencia de compuestos orgánicos, en la zona urbana de la ciudad de Cali (Colombia).

Palabras clave: Río Cauca, compuestos orgánicos, Coeficiente de partición octanol-agua Kow: XlogP3-AA, QSAR, MSDS, Sistema Globalmente Armonizado – SGA.

ABSTRACT

This research proposal of some results in the project: "Evaluation of the mutagenic activity of the Cauca River in the urban area of the City of Cali (Colombia), through the Ames test," which was supported by COLCIENCIAS and conducted by the Universities: Autonomous and West Valley (Larmat *et al.*, 2009). In this research the mutagenicity of the waters of the Cauca River was determined in the span of the bridge El Hormiguero (political-administrative boundary between the departments of Cauca and Valle del Cauca), to the mouth of the Rio Cali, using the Ames test. Similarly, in order to identify some of the organic and inorganic mutagenic response responsible for substances, chemical analyzes were performed on samples to determine the presence of heavy metals: mercury, lead, chromium and cadmium. As well as the determination of pesticides diazinon, lindane, chlordane, chlorpyrifos, ethyl-parathion, malathion, heptachlor, aldrin, α -endosulfan, and organic compounds.

From the results obtained in previous research, it was proposed to make this project: Environmental Risk Analysis of organic compounds in waters of the Cauca River, passing through the urban area of the city of Cali, Colombia. For risk analysis of the compounds identified in each of the sampling stations searched in databases: NCBI Pubmed, NCBI Pubchemcompound, MSDS, HSDB TOXNET, NCBI Pubchembioassay, SIGMA ALDRICH, Cepis, bvsde.paho.org and oms.ops.org.

Some of the organic compounds found are recorded in databases, as substances that cause endocrine disruption. XlogP3 -AA, which indicates a potential for bioaccumulation and bioconcentration potential: Also of Pubchemcompound NCBI database, the value of coefficient octanol-water partition was obtained. Meeting in the station E2, Canal south-east, the substances with the highest value of bioaccumulation and bioconcentration potential. Also search based on MSDS data found for the same station, 33.3 % of Category 1 substances with toxicity, compared to 16.6 % of the other stations. This indicates that the effluents from the station generate the greatest risk to the Cauca River, aquatic flora and fauna, as well as public health. This work allowed for the first time, to analyze the environmental risk that can have the waters of the Cauca River, by the presence of organic compounds in the urban area of the city of Cali (Colombia).

Keywords: Cauca River, organic compounds, Octanol-water partition, Know coefficient XlogP3 -AA, QSAR, MSDS, Globally Harmonized System - SGA.

2. PLANTEAMIENTO DEL PROBLEMA

La ciudad de Cali, es considerada la tercera ciudad en orden de importancia de Colombia, alberga en la actualidad una población cercana a los 2.5 millones de habitantes, está ubicada al sur occidente del país. De acuerdo a, Cali datos y cifras (1998), se tiene la siguiente información geográfica de la ciudad: 03°27'26"N, 76°31'42"W, y 1.079,52 msnm, temperatura promedio 25°C, precipitación anual promedio 1.459 mm, superficie total del municipio 56.400 ha, correspondiendo a la zona urbana 11.938,6 ha y 44.461,4 ha a la zona rural. Cali se abastece de agua para consumo humano en un 80% del Río Cauca.

La calidad del agua del Río Cauca se comienza a afectar desde las zonas de Paletará, Coconuco y Puracé. Dado que, se le adicionan diariamente miles de toneladas de residuos provenientes en su mayoría del cultivo de la papa, de la ganadería, de la minería del azufre y gran cantidad de basuras, actualmente el Río al hacer su entrada a Popayán llega casi muerto. Después atraviesa grandes extensiones de territorio, donde se le vierten aguas residuales domésticas y agrícolas, sin ningún tratamiento. A su llegada a la ciudad de Cali, en la zona de estudio entre el puente del hormiguero y el Río Cali, recibe los vertimientos del Canal Sur (antiguo Canal CVC), Estación de Bombeo Puerto Mallarino, Canal Oriental, Estación de Bombeo Floralia, y el Río Cali.

Dentro del contexto general del problema de investigación surgen entonces las siguientes preguntas:

¿Cuál o cuáles de los compuestos orgánicos identificados serán los que presenten un mayor riesgo potencial sobre la calidad del agua del Río Cauca?

¿Cuál de los puntos de muestreo ofrece el mayor riesgo potencial al Río Cauca, por la presencia de compuestos orgánicos?

3. JUSTIFICACIÓN.

La problemática asociada al recurso hídrico, se viene presentado en todos los países del mundo. Dado el aumento de la presión por los recursos naturales, para integrarlos a las diferentes cadenas productivas, como resultado de lo anterior se generan grandes volúmenes de aguas residuales: domésticas, industriales, y de la agricultura. En este sentido, un alto porcentaje de estas aguas residuales se liberan a las aguas superficiales y subterráneas sin tratamientos previos, estos contaminantes están causando un grave impacto ambiental, al agua, a su biodiversidad acuática y la salud de la población, este impacto se extiende desde las principales cuencas del mundo hasta su desembocadura al mar.

Con el presente estudio se podrá identificar el riesgo potencial por compuestos orgánicos en aguas del Río Cauca, a su paso por la ciudad de Cali. Lo anterior, será de utilidad para que los entes de control de la región: Corporaciones Autónomas Regionales - CARS, Autoridades locales y nacionales, y las Empresas Municipales de Cali – EMCALI, puedan tomar las medidas necesarias para la gestión adecuada del río, con el fin de mejorar la calidad de este recurso. Lo que contribuiría en la disminución del riesgo por contaminación de compuestos orgánicos, en el río, el cual se usa como fuente para el abastecimiento de agua potable para el 80% de la población de la ciudad de Cali, además de suministrar agua potable a poblaciones vecinas como Yumbo, el sector rural de Candelaria y un sector del Municipio de Palmira que incluye los corregimientos de La Dolores, La Nubia y Caucaseco.

Lo anterior permitirá por primera vez en el tramo de Río Cauca estudiado, analizar el riesgo potencial por la presencia de compuestos orgánicos en sus aguas.

4. OBJETIVOS

4.1. OBJETIVO GENERAL.

Estudiar el riesgo ambiental potencial debido a la presencia de compuestos orgánicos presentes en las aguas del Río Cauca en la Zona urbana de la ciudad de Cali.

4.2 OBJETIVOS ESPECÍFICOS:

4.2.1 Identificar y caracterizar los compuestos orgánicos presentes en las aguas del Río Cauca a su paso por la ciudad de Cali.

4.2.2 Identificar y analizar el riesgo ambiental potencial de los compuestos orgánicos encontrados en el Río Cauca a su paso por la ciudad de Cali.

5. MARCO TEÓRICO Y ESTADO DEL ARTE.

5.1 Antecedentes.

El presente trabajo tiene como antecedente, la propuesta de investigación “Evaluación de la actividad mutagénica del río Cauca en el área urbana de la Ciudad de Cali- Colombia, por medio del test de Ames”, aprobada por Colciencias a finales de año 2006, perteneciente al **PROGRAMA NACIONAL DE CIENCIAS DEL MEDIO AMBIENTE Y DEL HABITAT**, Código, 1106-335-18553. En ella participaron las Universidades, Autónoma de Occidente y del Valle, con los grupos de investigación GEADES, Electroquímica y, Microbiología y Biotecnología Ambiental. Este trabajo se constituye en el primero en investigar la mutagenicidad en el río Cauca, proveniente por compuestos orgánicos e inorgánicos, y es el primero en Colombia, en investigar la respuesta del test de Ames, originada por metales pesados en ecosistemas acuáticos. Los resultados de este trabajo fueron presentados en congresos nacionales e internacionales, y publicado en la revista de la Facultad de Ciencias Naturales y Exactas de la Universidad del Valle. (Tabla 1).

De acuerdo a Larmat *et al.* (2009) “En esta investigación se determinó la mutagenicidad de las aguas del Río Cauca en el tramo del puente El Hormiguero (límite político-administrativo entre los departamentos del Cauca y del Valle del Cauca) hasta la desembocadura con el Río Cali, utilizando el test de Ames. Igualmente se realizó el análisis químico a las muestras para determinar la contaminación debida a la presencia de los metales pesados mercurio, plomo, cromo y cadmio, así como también la determinación de los pesticidas diazinón, lindano, clordano, clorpirifos, etil-paratión, malatión, heptaclor, aldrin, y α -endosulfan.

Las muestras para los análisis fueron colectadas durante las temporadas de baja y alta pluviosidad en cinco estaciones: 1) Puente El Hormiguero, 2) desembocadura del Canal CVC sur, 3) bocatoma de la planta de tratamiento de Puerto Mallarino (PTAP), 4) Puente de Juanchito y 5) desembocadura del Río Cali.

Para los análisis de mutagenicidad se utilizaron las cepas de *Salmonella typhimurium* TA98 y TA100 para determinar la presencia de agentes mutágenos directos y también se utilizó el activador enzimático S9 para determinar la posible mutagenicidad indirecta en mamíferos.

Los análisis de metales pesados se realizaron con las técnicas de absorción atómica y voltametría de redisolución anódica. Los pesticidas se analizaron con la técnica de cromatografía de gases acoplada a espectrometría de masas.

Se determinó que existe un gradiente ascendente de mutagenicidad en las muestras de los puntos evaluados conforme el Río Cauca sigue su curso en la zona urbana de la ciudad tanto en temporada seca como invernal. En el puente de El Hormiguero no se encontró actividad mutagénica pero después de la desembocadura del Canal CVC-Sur se obtuvo respuesta positiva con ambas cepas y el índice mutagénico se incrementó con el activador enzimático S9 en el caso de la cepa TA98, indicando la presencia de compuestos químicos con actividad mutagénica directa e indirecta. En este sitio se detectó el índice de mutagenicidad (IM) más alto del estudio en temporada de lluvias (IM=7.1), (el test se considera positivo para $IM > 2.0$).

En el punto de entrada a la bocatoma de la planta de tratamiento de agua potable PTAP se obtuvo actividad mutagénica moderada en la temporada seca con la cepa TA98 (IM=1.1 a 4.0), pero no se observó esta misma actividad en la temporada lluviosa con ninguna de las dos cepas utilizadas. A la altura del Puente de Juanchito existen compuestos capaces de generar mutaciones tipo corrimiento del marco de lectura “*frameshifts*” en el ADN, que son responsables de la alta mutagenicidad hallada con índices de mutagenicidad (IM) de 8.2 en temporada seca y 3.5 en temporada invernal con la cepa TA98 mas el activador enzimático S9. Finalmente, a la altura de la desembocadura del Río Cali, se encontró actividad mutagénica con la cepa TA98 más S9 en la temporada invernal (IM=2.6).

El análisis químico de las muestras indica una contaminación de baja a moderada en los metales pesados, Pb, Cd, Cr y Hg. Los niveles encontrados están en el orden de partes por billón (los valores máximos permitidos son de 100 ppb). Se encontró que en el caso del mercurio, en las muestras recolectadas en enero de 2008, el punto más contaminado estuvo a la altura del puente de Juanchito (23.07 ppb), mientras que los puntos de puente Hormiguero y la bocatoma de la planta de puerto Mallarino fueron los más contaminados en abril de 2008 (29.62 y 25.28 ppb respectivamente). En el muestreo de junio de 2009 se encontraron concentraciones entre 16.80 ppb en la desembocadura del Río Cali y 21.30 ppb en la desembocadura del Canal CVC-Sur. Es probable que la temporada de lluvias sea la responsable de la variabilidad en las concentraciones encontradas en cada punto de muestreo. En general, se encontró que las concentraciones de mercurio fluctúan entre 3.57 ppb y 29.62 ppb como valores extremos en los tres muestreos adelantados.

Los metales Pb, Cd y Cr detectados en cada punto también estuvieron entre el rango de las de partes por billón. El punto a la altura del puente de Juanchito mostró concentraciones de Cr mayores que los demás, dejándolo como el punto más contaminado con concentraciones totales hasta de 36.58 ppb en el muestreo de abril de 2008, esto se atribuye en cierta forma a las actividades agropecuarias y de curtiembres en la zona, en donde se usan compuestos químicos con cromo que por vía rudimentaria llegan a canales que finalmente desembocan al cauce del Río Cauca.

Los comportamientos del plomo y del cadmio fueron regulares durante el análisis y no mostraron gran variabilidad entre punto y punto, excepto para el muestreo de abril de

2008, cuando se obtuvieron concentraciones de Pb de 37.67 y 47.68 ppb a la altura del canal CVC-sur y la bocatoma de la PTAP respectivamente. En el caso del Cd, la concentración total de cadmio osciló entre 0.02 y 0.45 ppb, indicando una leve contaminación con este metal.

Se encontró que la técnica de redisolución anódica es adecuada para la determinación de los metales pesados plomo, cadmio y mercurio en solución acuosa, además la cuantificación de los metales se puede realizar tanto por voltametría de pulso diferencial como por voltametría de onda cuadrada. Los resultados obtenidos son confiables una vez que se corroboraron con una técnica ampliamente aceptada como la espectrofotometría de absorción atómica.

El análisis de los pesticidas indica una contaminación leve con este tipo de compuestos en todos los puntos de muestreo. Se encontraron cantidades detectables del orden de décimas de ppb en los pesticidas diazinón, lindano, clorpirifos, clordano, malatión y α -endosulfan. De los pesticidas analizados no se detectaron etil-paratión, heptaclor ni aldrin. Las mayores concentraciones encontradas fueron para diazinón y α -endosulfan: 0.141 y 0.175 ppb respectivamente en el puente El Hormiguero y 0.111 y 0.094 ppb a la altura de la bocatoma de la PTAP.

El pesticida organofosforado clorpirifos se detectó en todos los puntos de muestreo, con concentraciones en el rango de 0.056 ppb en el puente de Juanchito y 0.021 ppb en la desembocadura del Canal CVC-Sur. Los pesticidas lindano y malatión también se detectaron en todos los puntos de muestreo con concentraciones en el rango de 0.080 a 0.0163 ppb y 0.032 a 0.007 ppb respectivamente. Es importante mencionar que los pesticidas clordano y clorpirifos han sido reportados en la literatura como agentes mutagénicos y genotóxicos. La presencia de clordano es la primera vez que se reporta para el Río Cauca en la zona estudiada.

Es necesario aclarar que los resultados positivos para mutagenicidad encontrados por medio del test de Ames no se pueden adjudicar exclusivamente a la presencia de los pesticidas y los metales pesados encontrados, ya que sus concentraciones son relativamente bajas, sino a la presencia de un gran número de contaminantes orgánicos entre los que se encuentran compuestos fenólicos, hidrocarburos policíclicos aromáticos, ftalatos, poliheterocíclicos, etc. que se evidencian en los cromatogramas obtenidos para las estaciones de muestreo después de la desembocadura del Canal CVC-Sur y que requieren un estudio más detallado para lograr su identificación y cuantificación”.

El trabajo actual complementó el estudio anterior, al analizar el riesgo potencial ambiental, debido a la presencia de 68 compuestos orgánicos encontrados en aguas del río Cauca, en cinco estaciones de muestreo, en la zona urbana de la ciudad de Cali, identificados por cromatografía de gases, acoplada a

espectrometría de masas en modo SCAN. En el Laboratorio de Medicina Legal y Ciencias Forenses de Cali.

Tabla 1. Resultados académicos del proyecto. Evaluación de la actividad mutagénica del río Cauca en el área urbana de la Ciudad de Cali- Colombia, por medio del test de Ames.

Título del trabajo	Evento/Lugar/Fecha	Autores
Detección de agentes mutagénicos mediante el test de Ames en aguas del Río Cauca en el Municipio de Cali.	Memorias del VII Congreso Latinoamericano de Mutagénesis, Carcinógenesis y Teratogénesis Ambiental. Cartagena de Indias (Bol.) Colombia de 2007.	Hidrobo-Libreros et al. (2007a)
Detección de agentes mutagénicos mediante el test <i>Salmonella</i> / Microsomas en aguas del Río Cauca en el municipio de Cali.	IV Seminario de Tópicos actuales de Investigación en Genética & I Seminario de Microbiología y Biotecnología de Microorganismos. Cali (Valle) Colombia, Septiembre.	Hidrobo-Libreros et al. (2007b)
Evaluación de mutagénesis usando el test de microsomas y <i>Samonella</i> en extractos de muestras del Río Cauca.	Memorias del XLII Congreso Nacional de Ciencias Biológicas. Barranquilla (Atl.), Octubre de 2007	Hidrobo-Libreros et al. (2007c)
Cuantificación de mercurio por espectrometría de absorción atómica en aguas del Río Cauca en la zona urbana de Cali.	XV Congreso de Química, Bogotá D.C. Colombia, Octubre de 2008.	Correa et al. (2008a)
Detección de pesticidas clordano y clorpirifos en aguas del río Cauca, en la zona urbana de la ciudad de Cali, Colombia	XV Congreso de Química, Bogotá D.C., Octubre.	Soto-Duque et al. (2008),
Determinación de mercurio, plomo y cadmio en solución acuosa por voltamperometría de redisolución anódica usando electrodos de platino y carbón vitrificado	XV Congreso de Química, Bogotá D.C., Colombia. Octubre. 2008.	Arizabaleta et al. (2008a)
Evaluación de los niveles de cromo, plomo y cadmio en aguas del río Cauca en la zona urbana de Cali por espectrometría de absorción atómica	XV Congreso de Química, Bogotá D.C., Colombia. Octubre. 2008.	Correa et al. (2008b)
El problema de la contaminación con sustancias mutagénicas en aguas superficiales: el caso de la detección de agentes mutagénicos mediante el test de Ames en el Río Cauca.	Memorias del XLIII Congreso Nacional de Ciencias Biológicas. Armenia (Quindío) Colombia. 2008.	Hidrobo-Libreros et al. (2008)
Determinación de metales pesados en aguas del Río cauca en la zona urbana de la ciudad de Cali por voltamperometría de redisolución anódica.	VIII Seminario Colombiano de Limnología y I Reunión Internacional de Cuencas Bajas y Zonas Estuarinas. Cali (Valle) Colombia, Noviembre, 2008.	Arizabaleta et al. (2008b)
Monitoring of heavy metal levels in water from the Cauca River in the urban zone of the city of Cali, Colombia	Pittsburgh Conference, New Orleans (USA), 2008.	Sánchez et al. (2008)
Detection of mutagenic agents by means of the Ames test in waters of the Cauca River in the city of Cali, Colombia.	Pittsburgh Conference, New Orleans (USA), 2008.	Hidrobo-Libreros et al. (2008b)
Contamination for organochloride pesticides in water of the Cauca River in the city of Cali, Colombia	Pittsburgh Conference, New Orleans (USA), 2008.	Osmiro-Coneo et al. (2008)
Determinación de la actividad mutagénica de las aguas del Río Cauca en el tramo puente el Hormiguero y la desembocadura del Río Cali, por	Memorias del XLIV Congreso Nacional de Ciencias Biológicas. Popayán	Sierra et al. (2009)

medio del test de Ames.	(Cauca) Colombia.	
Mutagenicity evaluation of water from the Cauca River in the city of Cali-Colombia using the Ames test.	Pittsburgh Conference, Orlando (USA), Febrero, 2010.	Larmat et al. (2010)
Monitoring of pesticides levels in water from Cauca River in the city of Cali-Colombia	Pittsburgh Conference, Orlando (USA), Febrero, 2010.	Larmat & Soto-Duque (2010a)
Determination of the heavy metal levels (Pb, Cd, Cr and Hg) in water from Cauca River in the city of Cali-Colombia	Pittsburgh Conference, Orlando (USA), Febrero, 2010.	Larmat & Soto-Duque (2010b)
Evaluation of the mutagenic activity of waters collected from Cauca River in the city of Cali, Colombia by using the <i>Salmonella</i> / Microsome Assay.	Revista de Ciencias, Facultad de Ciencias Naturales y Exactas: 131-143.	Sierra et al. (2012)

5.2 Contaminación del Río Cauca desde su nacimiento hasta la zona de estudio.

El Río Cauca nace en el Páramo de Sotará, ubicado en el Departamento del Cauca y desemboca en el Río Magdalena frente al municipio de Pinilla en Bolívar. El Río atraviesa de sur a norte los departamentos de Cauca, Valle del Cauca, Risaralda, Caldas, Antioquia y Bolívar. La cuenca del Río Cauca es de 63.300 km² y en la actualidad es un lugar excepcional por sus condiciones geográficas, topográficas, climáticas y de infraestructura privilegiadas para la ubicación de centros industriales, agropecuarios, mineros y urbanos, la cuenca del Cauca sostiene a una población de más de diez millones de habitantes que representan el 25% de la población colombiana (Martínez *et al.*, 2007).

El paso del Río Cauca por el valle alto es de gran importancia para la economía regional porque sus aguas sirven para el riego de zonas agrícolas, generación hidroeléctrica, la recreación, abastecimiento de las industrias y consumo de las poblaciones asentadas en su cuenca. Pese a la utilidad de estas aguas para las poblaciones humanas, son depositadas al río aguas residuales domésticas, industriales y agrícolas que afecta su calidad y dañan sus condiciones ecológicas (CVC y Universidad del Valle, 2007).

Desde los años sesentas se han realizado estudios sobre la contaminación del Río Cauca y las sustancias causantes del fenómeno. El primer estudio de este tipo fue realizado por las Universidades de Tulane y del Valle, con el apoyo de la CVC y de las Empresas Municipales de Cali (EMCALI). (Vélez *et al.*, 2003).

La calidad del agua del Río Cauca se comienza a afectar desde las zonas de Paletará, Coconuco y Puracé, dado que, se le adicionan diariamente miles de toneladas de residuos provenientes en su mayoría del cultivo de la papa, de la ganadería, de la minería del azufre y gran cantidad de basuras. El Plan de Ordenamiento Territorial de la ciudad de Popayán (POT, 2002) señala que la

cabecera municipal de la ciudad, es el mayor consumidor de agua en el departamento del Cauca, la cual es utilizada para uso humano, fines industriales, ganadería y riego de cultivos. Asimismo contribuye con un aporte importante de aguas residuales que tienen como destino final los ríos y quebradas que atraviesan la ciudad, las cuales por su poco caudal tienen bajo nivel de disolución, lo que trae como consecuencia la contaminación de los Ríos Cauca, Molino, Saté y Ejido. El análisis de la información existente permite concluir que la contaminación del recurso hídrico, es un asunto urgente de atender, en la medida en que el 80% de las corrientes que atraviesan el área urbana han alcanzado puntos críticos y el deterioro físico-químico de las que hacen parte la subcuenca del Río Palacé y sus tributarios es permanente. (POT, 2002).

El Río Cauca después de su paso por la ciudad de Popayán sigue su curso a través grandes extensiones de territorio, usadas con fines agrícolas con cultivos de café, plátano, yuca, frijol y flores, entre otros. También se encuentran diversos asentamientos humanos entre los que se destacan: Piendamó, Santander de Quilichao y la localidad de Puerto Tejada ya cercana a la Ciudad de Cali. Es importante resaltar que todas las poblaciones vierten sus aguas residuales domésticas e industriales a ríos y quebradas que luego desembocan al Río Cauca sin ningún tratamiento.

El Río atraviesa la Ciudad de Cali en sentido sur-norte. Uno de los mayores problemas ambientales de Cali, ha sido la inadecuada disposición final de las toneladas de basuras en Navarro. En este sentido, el Documento CONPES (2009), propone entre otros, la declaratoria de importancia estratégica para realizar el proyecto de inversiones para el tratamiento de lixiviados y cierre adecuado del botadero de Navarro de Cali, dada la sospecha de que dichos lixiviados escurren al Río Cauca, y el riesgo ambiental que esto conlleva a la salud humana y al ecosistema acuático.

5.3 Estudio de pesticidas en el Valle Alto del Río Cauca.

En cuanto a la presencia de pesticidas en aguas del Río Cauca, y de acuerdo a Fischer (1990), dentro de las Memorias del I Simposio internacional y el II Nacional, sobre Plaguicidas, Ambiente y Salud Humana. Sostiene que el profesor Aníbal Patiño en el año 1979, en un estudio sobre la población acuática del Río Cauca, determinó que entre los agentes contaminantes responsables del mayor deterioro del Río Cauca, se encuentran los plaguicidas residuales provenientes de los campos de cultivo, además de otros agentes tales como residuos industriales y agua residuales domésticas; señala este investigador que en un lapso no mayor

de 15 a 20 años la riqueza ictiológica del Río desaparecerá y el equilibrio ecológico del Río será afectado en forma irreversible.

Tabla 2. Estudio de pesticidas en aguas del Río Cauca, y la Laguna de Sonso en el Valle Alto.
Fuente: Autores

Autor(es)/año	Entidades	Estaciones de muestreo	Pesticidas organoclorados	Pesticidas organofosforados	Otras familias de pesticidas
Barba-Ho, 1994	Universidad del Valle, y la CVC	Desde Salvajina hasta la Victoria	Heptacloro, Lindano, Aldrin, Dieldrin, y DDT y sus metabolitos,	Di-syston, Ronnel, Metilparation y Malation	
Belalcázar – Martínez <i>et al.</i> (1999).	Universidad del Valle	Hormiguero, Media Canoa, y RiofRío.		Clorpirifos	
Rios-Ardila <i>et al.</i> (1999).	Universidad del Valle	Hormiguero, Media Canoa, y RiofRío			Carbofuran
Rios-Acevedo <i>et al.</i> (2001).	Universidad del Valle	Laguna de Sonso y sus afluentes			Glifosato
Arana-Rengifo & Paez (2002)	Universidad del Valle	Laguna de Sonso y sus afluentes		Diazinon, Malation, Metilparation, y Clorpirifos	
Larmat <i>et al.</i> (2009)	Universidades del Valle y UAO.	Hormiguero hasta desembocadura del Río Cali	lindano, clordano, heptacloro, aldrin, y α -endosulfan	Diazinon, Malation, clorpirifos, etilparación,	

En este sentido, en la Tabla 2, se recopilaron una serie de trabajos sobre pesticidas realizados en aguas del Río Cauca, en el valle alto, incluyendo trabajos realizados en la laguna de Sonso.

En el trabajo realizado por Barba-Ho (1994), se registra que la concentración de los organoclorados estudiados, sobrepasan los límites permisibles establecidos en las normas. Por ejemplo, el aporte acumulado de estos plaguicidas osciló entre 0.028 y 2.337 $\mu\text{g/L}$ en 1983; entre 0.367 y 0.551 $\mu\text{g/L}$ en 1984; entre 0.0002 y 0.099 $\mu\text{g/L}$ en 1985; y entre 0.006 y 0.453 $\mu\text{g/L}$ en 1986. Sobresalieron el Aldrín y el Dieldrin con valores máximos entre 0.3 y 0.5 $\mu\text{g/L}$, y el DDT (y sus metabolitos) 0.89 y 1.250 $\mu\text{g/L}$. Los metabolitos pp´DDT y el OP´DDT son los responsables del mayor aporte.

Respecto a la concentración de organofosforados, casi no se detectan por diferentes circunstancias como: su baja solubilidad en agua, su alto poder de volatilización y, principalmente, su facilidad de degradación en el ambiente (por acción de enzimas de esterases se descomponen en metabolitos no-tóxicos). Sin embargo, sobresalió el Metil-paration presente en casi el 90% de los registros, con valores hasta de 0.598 $\mu\text{g/L}$, superior a los niveles permisibles.

La mayor incidencia de DDT y sus metabolitos se presentó en la zona norte del Departamento, que se caracteriza por su gran actividad y diversidad agrícola. También en esta zona ocurrió la mayor incidencia de los organofosforados. No significa esto que en el resto del departamento no se detectarán cifras notorias de organoclorados y organofosforados.

De otro lado, es importante destacar los trabajos realizados por el Departamento de Química de la Universidad del Valle, en el tema de análisis de pesticidas organoclorados y organofosforados, en estaciones que frecuentemente van desde la zona del Hormiguero, hasta Río Frío. Igualmente los análisis realizados en la laguna de Sonso y sus tributarios. En este sentido, (Belalcázar-Martínez *et al.*, 1999) determinaron la presencia de clorpirifos en las estaciones: el Hormiguero, Media Canoa, y Río Frío. Con registros entre 357 a 774 ppb. En las mismas estaciones de muestreo anterior (Ríos-Ardila *et al.*, 1999). Determinaron el insecticida Carbofuran, obteniéndose límites de detección del orden de 65.8 y 75.0 µg/L, para el metabolito y el carbofuran respectivamente. En la zona de estudio: estaciones Hormiguero, Canal Sur – Oriental, Planta de potabilización Puerto Mallarino, Puente Juanchito y Desembocadura con el Río Cali. Larmat *et al.*, (2009), realizaron estudio de pesticidas organoclorados y organofosforados, encontrando concentraciones de todos ellos, por debajo de la norma.

En la laguna de Sonso y sus afluentes, (Ríos-Acevedo *et al.*, 2001) realizaron la determinación de Glifosato, encontrando trazas de glifosato en la laguna, y en los zanjones Guabito, Garzoner y Canadá, del orden de 231.2 ppb, 107.6 ppb y 88.2 ppb respectivamente. Igualmente, (Arana-Rengifo & Páez, 2002), análisis de los pesticidas organofosforados: (diazinon, metilparation, malation y clorpirifos) en aguas de la laguna de sonso y sus seis tributarios: zanjón Garzoner, Mocoa, Guayabito, Guaimaral, el Vínculo y Cánada, encontrando 0.26µg/L de malation y 0.53µg/L de clorpirifos en el zanjón Garzoner. En Mocoa 0.10µg/L de malation, y en Canadá 0.35µg/L de diazinon y 0.11µg/L de malation, es importante resaltar que en la laguna de Sonso no se detectaron ninguno de los organofosforados estudiados.

De la revisión anterior, se puede concluir que de los trabajos recopilados en la Tabla 1, el realizado por Barba-Ho (1994), es el único que establecía un plan de monitoreo, los otros obedecen al interés de los estudiantes y profesores del Departamento de Química de la Universidad del Valle, en realizar trabajos de grado, en el tema de pesticidas. Es así, como es importante destacar que en la zona de estudio, no existe un trabajo anterior, que identifique otros compuestos orgánicos diferentes a los pesticidas. Tal como el que realizan los autores de este

documento, y menos aún estos compuestos ligados al riesgo potencial al ecosistema acuático.

5.4 El coeficiente de partición octanol-agua (Kow), y su relación con el riesgo de bio-acumulación, y el factor de bio-concentración - FBC.

Los coeficientes de partición son valores empíricos, que describen de qué forma se distribuye una sustancia química en dos medios con distinta polaridad. El coeficiente de partición octanol-agua es una constante adimensional definida por la fórmula: $Kow = Co/C$. Donde: Co = concentración en octanol y C = concentración en agua.

Este coeficiente sirve, por ejemplo, para conocer la cantidad de sustancia que será absorbida por los organismos acuáticos. Los valores de Kow pueden encontrarse en un intervalo de hasta diez órdenes de magnitud, abarcando desde 10^{-3} hasta 10^7 . Este coeficiente es de especial utilidad a la hora de calcular el destino y traslado de sustancias químicas, y está en relación con los coeficientes de adsorción del suelo, el factor de bioconcentración (FBC) y la solubilidad en agua. Las sustancias químicas con menor valor Kow (<10) se consideran hidrofílicas, así como por poseer una baja capacidad de adsorción en el suelo y un reducido FBC. (Bouaid, 2001).

Por convención se ha adoptado el uso del logaritmo en base 10, de P conocido como $\text{Log } P$ dado que el rango de valores que puede tomar P es muy amplio. Por lo tanto, a un mayor valor de P o $\text{Log } P$, se puede afirmar que la sustancia presenta mayor afinidad por la fase orgánica y por consiguiente su carácter lipofílico es mayor.

La clasificación de riesgo ambiental de una sustancia química está normalmente basada en los datos existentes acerca de sus propiedades ambientales, y sólo se hacen necesarios datos adicionales de ensayos cuando se requiere conseguir una mejor clasificación. A menudo un amplio rango de datos de ensayos se encuentra disponible en la literatura, y por tanto sólo resulta necesario establecer una correcta interpretación de éstos, para encuadrar a la sustancia química dentro de un contexto de clasificación del riesgo (Bartolomé, 2004).

De acuerdo a bvsde.paho.org, (2005), si una sustancia cuya solubilidad en agua es muy alta se descarga en el suelo, permanecerá ahí hasta que entre en contacto con el agua, en que se disuelve y se transfiere con cualquier movimiento de ésta. Por otro lado, si una sustancia de gran afinidad con el suelo se descarga en el agua, llegará rápidamente hasta los sedimentos y puede unirse a ellos. Muchas

sustancias volátiles pueden desplazarse con las corrientes de aire y llegar a zonas lejanas de su lugar de origen.

Muchas sustancias de gran afinidad con los organismos vivos se acumulan en la fauna y la flora, ya sea directamente o a través de las cadenas alimentarias, con lo que se da origen a la contaminación de la cadena trófica. El conocimiento de las propiedades fisicoquímicas de las sustancias permite predecir la partición ambiental. Los parámetros más útiles para esto son: solubilidad en agua, presión de vapor (vp), coeficiente de partición octanol-agua (Kow), coeficiente de partición octanol-aire (Koa), pK_a, etc. (bvsde.paho.org, 2005).

Tabla 3. Afinidad de las sustancias químicas con los diferentes compartimientos ambientales en función de las características fisicoquímicas de las moléculas. Fuente: <http://www.bvsde.paho.org/tutorial/ambientales/anexo4.html>

	Agua	Aire	Suelo	Biota animal	Biota vegetal
Afinidad	S en g/L	H en Pa m ³ /mol	log Koc	log Kow	log Koa
Alta	>1	>10	>5	>5	>8
Media alta	1-10 ⁻²	10-10 ⁻¹	5-4	5-3.5	8-7
Media	10 ⁻² -10 ⁻³	10 ⁻¹ -10 ⁻²	4-2	3.5-3	7-5
Media baja	10 ⁻³ -10 ⁻⁵	10 ⁻² -10 ⁻⁴	2-1	3-1	>4
Baja	<10 ⁻⁵	<10 ⁻⁴	<1	<1	<4

Para evaluar la distribución ambiental de las sustancias orgánicas, los parámetros importantes son: constante de Henry (H), solubilidad en agua (S), coeficiente de adsorción al suelo (Koc) y coeficiente de partición *n*-octanol-agua (Kow). El valor numérico de cada parámetro indica el grado de afinidad con los cuatro compartimientos ecológicos básicos: aire, agua, suelo y biota (Tabla 3). (bvsde.paho.org, 2005).

En general, el potencial de una sustancia orgánica para acumularse en los organismos viene determinada por su lipofilia, cuya medida ampliamente aceptada es el coeficiente de partición octanol-agua (Kow) para sustancias no iónicas y lipofílicas, mientras que para sustancias que sufren procesos metabólicos o de biotransformación, la medida hará referencia a una relación con el FBC. Es por ello por lo que la constante Kow, es utilizada a menudo para estimaciones de bioconcentración mediante relación empírica entre esta y el FBC, estando disponibles las metodologías de estimación para la mayoría de las sustancias orgánicas, proporcionando los datos obtenidos de forma experimental, las estimaciones por determinación experimental de la Kow, así como la estimación

de dicho valor por cuantificación de la relación estructura actividad (QSARs). (Bartolomé, 2004).

5.5 Modelos QSAR, cuantificación de la estructura química y la actividad biológica, y su relación con el LogKow.

Los modelos QSAR, colectivamente denominados QSAR, son modelos teóricos que pueden utilizarse para predecir de forma cuantitativa o cualitativa las propiedades fisicoquímicas y biológicas, por ejemplo, un parámetro ecotoxicológico y el destino final en el medio ambiente de los compuestos, a partir del conocimiento de su estructura química. Un QSAR es un modelo matemático que relaciona uno o varios parámetros cuantitativos, obtenidos de la estructura química, con una medición cuantitativa de una propiedad o actividad. Para predecir una propiedad de una sustancia química, hay que valorar la validez del modelo QSAR seleccionado y hay que verificar si la sustancia química corresponde al ámbito de aplicabilidad para generar una predicción fiable. (ECHA, 2012).

En los últimos años con la ayuda de las técnicas QSAR ha sido posible predecir las propiedades tanto físicas como químicas, además de caracterizar los efectos biológicos de diversos tipos de moléculas. La química ambiental ha utilizado esta metodología para investigar contaminantes que incluyen muchos congéneres con características estructurales similares. La utilización de herramientas estadísticas tales como el análisis de regresión múltiple, ha permitido relacionar simultáneamente la actividad biológica observada con muchas de las propiedades moleculares de los compuestos, pudiendo así determinar las características estructurales de relevancia potencial. (Ospino *et al.*, 2005).

Cheng *et al.*, (2007), desarrollaron un nuevo método QSAR para el cálculo computacional de logPow, XLOGP3. XLOGP3 calcula el valor de logPow de un compuesto, utilizando el valor logPow conocido de un compuesto de referencia como punto de partida. La diferencia entre el compuesto de consulta y el compuesto de referencia se calcula a continuación, por un método aditivo. Esta estrategia tiene varias ventajas evidentes sobre los métodos aditivos convencionales. En primer lugar, se basa en menor grado en la suposición de aditividad. En segundo lugar, no necesita una clasificación más extensa de fragmentos y factores de corrección con el fin de mejorar la precisión. En tercer lugar, es capaz de utilizar los datos logPow siempre con eficacia creciente. Las pruebas encontradas demuestran que XLOGP3 produce resultados más precisos que su predecesor, así como algunos otros métodos. XLOGP3 y enfoques

similares como KOWWIN - EVA y el método de Klopman representan colectivamente una dirección acertada para el cálculo logPow.

Para relacionar el FBC, el LogKow, y el QSAR, este último suministra el valor de LogKow, estimado mediante cálculos computacionales, NACIONES UNIDAS (2011), propone el siguiente esquema de decisiones, con el cual podrá decidirse si una sustancia tiene o no potencial de bio-concentración en organismos acuáticos.

- a) Valor experimental del FBC válido y de gran calidad \Rightarrow Sí:
 - i) $FBC \geq 500$: la sustancia tiene potencial de bio-concentración
 - ii) $FBC < 500$: la sustancia no tiene potencial de bio-concentración
- b) Valor experimental del FBC válido y de gran calidad \Rightarrow No:
 - i) Valor experimental de log Kow válido y de gran calidad \Rightarrow Sí:
 - ii) $\log Kow \geq 4$ la sustancia tiene potencial de bio-concentración
 - iii) $\log Kow < 4$ la sustancia no tiene potencial de bio-concentración
- c) Valor experimental del FBC válido y de gran calidad \Rightarrow No:
 - i) Valor experimental de log Kow válido y de gran calidad \Rightarrow No:
 - ii) Uso de QSAR validadas para estimar un valor de log Kow \Rightarrow No:
 - iii) $\log Kow \geq 4$ la sustancia tiene potencial de bio-concentración
 - iv) $\log Kow < 4$ la sustancia no tiene potencial de bio-concentración

De acuerdo a NACIONES UNIDAS (2011), los modelos QSAR, presentan las siguientes desventajas:

1. Elegir un modelo QSAR apropiado implica que el modelo permitirá una predicción fiable de la toxicidad o la actividad biológica de un producto químico no sometido a un ensayo. De manera general la fiabilidad disminuye con la mayor complejidad de la estructura química, a menos que se hayan obtenido las QSAR para un conjunto estrechamente definido de productos químicos de una estructura similar a la de la sustancia de que se trate. En términos globales, el objetivo es hacer estimaciones por interpolaciones más que por extrapolación.

2. Por ejemplo, si se dispone de datos de CL_{50} en 96 h de ensayo en peces (*Pimephales promelas*) para etanol, n-butanol, n-hexanol y n-nonanol, se podrán predecir con cierta confianza los efectos para el n-propanol y n-pentanol. En

cambio, sería menos fiable hacer una predicción para el metanol, que es una extrapolación a menos átomos de carbono que cualquiera de los otros productos químicos sometidos a ensayo. En realidad, el comportamiento del primer miembro de esa serie homóloga suele ser el más anormal y no debería predecirse usando datos de los demás miembros de la serie. Tal extrapolación se vuelve menos fiable en la medida que la toxicidad guarde relación con la producción de metabolitos para un efecto determinado, en oposición a las propiedades del compuesto parental. También, si la toxicidad se ejerce por intermedio de un mecanismo de enlace con un receptor específico, pueden observarse efectos muy notables con pequeños cambios en la estructura química.

3. La validez de tales predicciones dependerá en definitiva de los mecanismos moleculares comunes, de los compuestos utilizados para establecer el modelo QSAR para un efecto biológico determinado. En muchos casos, por no decir en casi todos, una QSAR no representa un modelo mecanicista, sino simplemente uno correlativo. Un modelo mecanicista realmente válido debe obtenerse con una serie de productos químicos, que actúen todos según un mecanismo molecular común, y satisfacer una ecuación con uno o varios parámetros directamente vinculados a una o varias etapas del mecanismo de que se trata. Esos parámetros o propiedades son conocidos más generalmente con el nombre de descriptores moleculares. Es muy conveniente también tener presente que muchos de estos descriptores de uso común pueden no tener una interpretación física directa. En un modelo correlativo, el ajuste estadístico de los datos es probable que sea menos bueno que en uno mecanicista, habida cuenta de esas limitaciones. Los mecanismos no tienen que comprenderse del todo, pero lo que se sabe de ellos puede ser suficiente para que la aproximación sea de confianza. En los modelos correlativos, la fiabilidad de las predicciones aumenta con la especificidad con la que cada uno se define, por ejemplo, categorías de electrófilos, tales como acrilatos, en los que el grado de reactividad puede ser similar, y la toxicidad puede estimarse para una sustancia “nueva” usando un modelo basado únicamente en el parámetro Log Kow.

4. A título de ejemplo, los alcoholes primarios y secundarios que contienen un enlace doble o triple que se conjugan con el grupo hidroxilo (alcohol alílico o propargílico) son más tóxicos que lo que predice un modelo QSAR para los compuestos saturados correspondientes. Este comportamiento se ha atribuido a un mecanismo proelectrofílico que entraña una activación metabólica de la enzima alcohol-deshidrogenasa por aldehídos y cetonas α,β -insaturados que pueden actuar como electrófilos por medio de un mecanismo aceptor del tipo de Michael. En presencia de un inhibidor de la alcohol-deshidrogenasa, estos compuestos se

comportan como otros alcoholes y no presentan toxicidad excesiva, con arreglo a la hipótesis mecanicista.

5. La situación se vuelve rápidamente más compleja en cuanto se sale de las series homologas de compuestos. Considérense, por ejemplo, los derivados bencénicos simples. Una serie de clorobenzenos puede verse como una serie homologa. Probablemente no habrá mucha diferencia en la toxicidad de los tres isómeros del diclorobenceno, de este modo, un modelo QSAR para los clorobenzenos que se encentaren en bases de datos experimentales para uno de los isómeros es probable que resulte adecuado. ¿Qué ocurre en caso de sustitución de otros grupos funcionales en el núcleo bencénico? A diferencia de un alcohol alifático, la adición de una función hidroxilo en el núcleo bencénico produce un fenol que ya no es neutro, sino un compuesto ácido ionizable, debido a la estabilización por resonancia de la carga negativa resultante. Por tal motivo, el fenol no actúa como un verdadero agente narcótico. Con la adición al fenol de sustituyentes electrófilos (por ejemplo, átomos de cloro), hay un cambio a compuestos que actúan como desacopladores de la fosforilación oxidativa (por ejemplo, el herbicida Dinoseb). La sustitución por un grupo aldehídico, conduce a una mayor toxicidad mediante un mecanismo electrófilico, ya que tales compuestos reaccionan con grupos amino, como el grupo lisina ϵ -amino para producir un aducto de tipo de base de Schiff. Del mismo modo, el cloruro de bencilo actúa como un compuesto electrófilo para formar aductos covalentes con un grupo funcional sulfhidrilo. Frente a una predicción de un compuesto no sometido a ensayo, la reactividad química de éstos y otros grupos funcionales y su interacción reciproca debería estudiarse con cuidado, documentando en lo posible la información con trabajos publicados.

6. Habida cuenta de esas limitaciones en la utilización de las QSAR para hacer predicciones, es preferible recurrir a las informaciones sobre los efectos inducidos por los grupos funcionales, como medio para establecer prioridades, más que como un sustituto de los ensayos, a menos de que se disponga de datos mecanicistas sobre el compuesto no sometido a ensayo. En realidad, la incapacidad de predecir los efectos de una exposición a residuos conocidos en el medio ambiente, puede bastar por sí misma para suscitar ensayos, o en el desarrollo de un nuevo modelo QSAR para una categoría de productos químicos que requieran esa información. Cabe obtener un modelo QSAR mediante análisis estadísticos, por ejemplo, un análisis de regresión, de ese conjunto de datos. Como primer paso, puede utilizarse log Kow, que es el descriptor molecular empleado más corrientemente.

7. Por el contrario, la obtención de un modelo QSAR mecanicista, requiere comprender o hacer hipótesis de trabajo del mecanismo molecular y de qué

parámetro o parámetros serían adecuados para hacer el modelo. Es importante tener en cuenta que este proceder difiere de una hipótesis sobre el modo de acción, que se refiere a la respuesta biológica/fisiológica pero no al mecanismo molecular.

A pesar de las desventajas reconocidas de los modelos QSAR, El Reglamento (CE) N°. 1907/2006 relativo al registro, la evaluación, la autorización y la restricción de sustancias y preparados químicos – REACH, contempla el uso de métodos sin ensayos como las relaciones cuantitativas entre estructura y actividad [(Q)SAR], la agrupación de sustancias y la extrapolación para la adaptación de los regímenes de ensayo estándar. Más concretamente, el considerando 47 de REACH determina los objetivos del Reglamento en lo que respecta a evitar ensayos innecesarios con animales vertebrados:

“es necesario sustituir, disminuir o perfeccionar los ensayos con animales vertebrados. La aplicación del presente Reglamento debe basarse, siempre que sea posible, en la utilización de métodos de ensayo alternativos, adecuados para la evaluación de los riesgos para la salud y el medio ambiente de los productos químicos. Debe evitarse el uso de animales recurriendo a métodos alternativos validados por la Comisión u organismos internacionales, o reconocidos por la Comisión o por la Agencia como adecuados para cumplir los requisitos de información con arreglo al presente Reglamento”. Antes de plantearse realizar ensayos con animales vertebrados, hay que explorar estos métodos y otras fuentes de información. Lo anterior, ofrece una visión general de aspectos importantes para predecir las propiedades de las sustancias utilizando modelos (Q)SAR tal como se establece en el Reglamento REACH. (ECHA, 2012).

Los Modelos QSAR, han sido utilizados para la gestión del riesgo de las sustancias químicas peligrosas, por las autoridades reguladoras, en la Unión Europea, sugeridos por el Reglamento REACH, (Gramatica, 2007).

En este sentido, en el trabajo del Río Cauca, los datos del logaritmo del coeficiente de partición octanol-agua (Log Kow), se obtuvieron de la base de datos NCBI Pubchemcompund, como XlogP3-AA, ajustándose al esquema de decisiones propuesto por NACIONES UNIDAS, ordinal (c), de usar un QSAR validado.

5.6 Riesgo ambiental por compuestos orgánicos en ríos en el mundo.

La problemática asociada al recurso hídrico, se viene presentado en todos los países del mundo. Dado el aumento de la presión por los recursos naturales, para integrarlos a las diferentes cadenas productivas, como resultado de lo anterior se generan grandes volúmenes de aguas residuales: domésticas, industriales, de escorrentía y de deposición húmeda de pesticidas desde su aplicación en la

agricultura. En este sentido, un alto porcentaje de estas aguas residuales se liberan en los ríos sin tratamientos previos, estos contaminantes están causando un grave impacto ambiental, al agua y a su biodiversidad acuática, este impacto se extiende desde las principales cuencas del mundo hasta su desembocadura al mar. La mayor parte de los contaminantes se quedan en la región costera que es la más rica en biodiversidad y que soporta gran parte de la población humana. (Soto-Duque, 2009).

Encontrándose como responsables, a una gran variedad de sustancias químicas de origen antrópico, entre las que se reportan: Hidrocarburos Aromáticos Policíclicos - PAHs, Bifenilos Policlorados - PCBs, Dioxinas, Furanos, pesticidas organoclorados, incluidos, Diclorodifeniltricloroetano - DDT y el Diclorodifenildicloroetano - DDD, Metales pesados, hidrocarburos aromáticos y alifáticos. El conjunto de estas sustancias están afectando la totalidad del ciclo hidrológico, perturbando gravemente la cadena trófica acuática, desde el plancton hasta los mamíferos. (Soto-Duque, 2009).

En este sentido, los investigadores Qi *et al.*, (2013), estudiaron los contaminantes orgánicos que se vierten al Río Yangtze, al cual llega el veinte por ciento de la escorrentía superficial y las aguas residuales de aproximadamente 400 millones de personas en China y de este al mar. Encontrando 117 micro-contaminantes orgánicos: 51 pesticidas, 43 compuestos farmacéuticos, 7 productos del hogar y químicos industriales, y 16 hidrocarburos aromáticos policíclicos (HAP), con una carga anual en toneladas respectivamente de: 98, 152, 273 y 369. Las anteriores, cargas contaminantes son considerables y representan un riesgo cada vez mayor para la salud del ecosistema marino costero.

En España, Valcárcel *et al.*, (2011), estudiaron la presencia y el riesgo de 33 compuestos farmacéuticamente activos, en puntos específicos de los principales Ríos de la Comunidad de Madrid, así como en muestras de agua del grifo de la zona metropolitana de Madrid. Se detectaron concentraciones altas para el anticonvulsivo carbamazepina y el estimulante cafeína. Las concentraciones de la mayoría de los compuestos analizados superan los niveles registrados previamente en la literatura. Por otra parte, se presenta la mayor concentración del citostático ifosfamida, detectado por primera vez en España en las aguas superficiales. Estos resultados determinan la necesidad de monitoreo de la calidad del agua, y la investigación en los ríos urbanos, así como la necesidad de mejorar las técnicas del tratamiento del agua, capaz de eliminar el riesgo, de este tipo de compuestos, a partir de las aguas de efluentes, así como de fuentes de agua potable.

En África central, se investigó por primera vez, el perfil de concentración de diferentes compuestos orgánicos halogenados, tales como residuos de plaguicidas organoclorados (OCPs), bifenilos policlorados (PCBs) y difenil éteres polibromados (PBDEs) en agua y sedimentos de la cuenca del Río Pangani. La cual es la cuenca más grande de Tanzania, y está expuesta a múltiples fuentes de contaminantes orgánicos. Los resultados encontrados proporcionan datos preliminares, sobre los niveles de contaminantes orgánicos en Cuenca del Río Pangani, como una nueva visión sobre la calidad ambiental de la zona y la necesidad de tener programas de monitoreo, Hellar-Kihampa *et al.*, (2013). En este caso, la concentración de dichos contaminantes en los sedimentos, no presentan riesgos al ecosistema acuático, de acuerdo a las guías de calidad de sedimentos.

Dada la gran cantidad de sustancias químicas liberadas en el medio ambiente y las limitaciones presupuestarias, existe la necesidad de dar prioridad a los productos químicos para la evaluación de riesgos y el seguimiento en el contexto de la Unión Europea, Directiva Marco del Agua. Este estudio es el primero en evaluar el riesgo de 500 sustancias orgánicas sobre la base de las observaciones en las cuatro cuencas europeas del Elba, Scheldt, Danubio y Llobregat, se realizó un árbol de decisión, en el que primero se clasifican los productos químicos en seis categorías, en función de la información disponible, lo que permite a los gestores del agua centrarse en los próximos pasos (por ejemplo, las normas de calidad ambiental, la mejora de los métodos de análisis, entre otros). La prioridad dentro de cada categoría es entonces evaluada sobre la base de dos indicadores, la Frecuencia con que se supera la concentración y la medida de Superación Prevista Sin - Efecto. Estos dos indicadores se basan en las concentraciones ambientales máximas, en lugar de los promedios basados en estadísticas de uso común. La priorización reveló que alrededor de tres cuartos de 44 sustancias eran diez pesticidas. Por otra parte, basado en los datos de seguimiento utilizados en este estudio, se encontró que no hay riesgo con respecto al agua, para ocho de las 41 sustancias prioritarias, lo que indica un primer éxito de la implementación de la Directiva Marco del Agua en las cuencas estudiadas. (Von der Ohe *et al.*, 2011)

Igualmente los investigadores, Slobodnik *et al.* (2012), siguiendo los requerimientos, de la Directiva Europea Marco del Agua, en un proceso de selección de sustancias peligrosas y el desarrollo del Programa de Reducción de la contaminación en la República Eslovaca en 2001, en tres campañas de monitoreo, identificaron 59 sustancias químicas, como sustancias peligrosas en el 2004. Este estudio describe dos métodos, de asignación de prioridades independientes, para revisar la lista de sustancias peligrosas en 2010. El primero utiliza un sistema de clasificación basado en la frecuencia de estas sustancias, en

combinación con los datos de auto-monitoreo de las industrias. Como resultado, 41 de las 59 sustancias fueron propuestas para el Programa de reducción de sustancias peligrosas. El segundo se basa en la evaluación de la frecuencia de excedencia y la medida de superaciones de los umbrales ambientales, conocido como las concentraciones previstas sin efecto (PNEC), para todos los compuestos orgánicos controlados en los sistemas fluviales de la República Eslovaca 2001-2010. La metodología incluía una red de monitoreo, para registrar nuevos contaminantes, apoyados en análisis por cromatografía de gases acoplado a masas (GC- MS).

En Estados Unidos, la Agencia de Protección Ambiental - EPA realizó en el 2001, un Inventario de Descargas de Sustancias Tóxicas, TRI (Toxic Release Inventory). El cual registra que más de 100.000 toneladas métricas de sustancias químicas, se liberan en las aguas superficiales y que aproximadamente 762.000 toneladas métricas de químicos se emiten anualmente a la atmósfera, por los procesos industriales en los Estados Unidos. Los datos registran que grandes cantidades de materiales tóxicos son rutinariamente liberados directamente o indirectamente (vía emisión al aire), en los sistemas acuáticos después del uso industrial. También muestra que más del 50% de las descargas de agua residual anual a los sistemas acuáticos viene de los procesos de las industrias químicas, fundición y refinación de petróleo. Es más, 800 toneladas métricas de químicos se liberaron en aguas superficiales y 60.000 toneladas métricas de químicos se emitieron a la atmósfera, muchos de ellos reconocidos carcinógenos clasificados por la Agencia Internacional para la Investigación del Cáncer (IARC) como 1, 2A o 2B, y la mayoría de ellos se conocen por presentar actividad mutagénica y/o clastogénica. (Soto-Duque, 2009).

Es importante resaltar que a nivel mundial solo se trata el veinte por ciento, de las aguas residuales domésticas, llegando en el mejor de los casos a un tratamiento secundario. Entonces, el riesgo de los ecosistemas acuáticos a nivel global es crítico, teniendo en cuenta además, que muchas sustancias pasan los tratamientos secundarios de aguas residuales, como los estrógenos, los cuales son reconocidos disruptores endocrinos para: peces, tortugas y reptiles, entre otros, en concentraciones de partes por trillón (ppt). El tratamiento de aguas residuales en Colombia, es deficiente, al igual que en Latinoamérica, en la zona de estudio, se tiene la PTAR, Cañaveralejo, que solo realiza un tratamiento primario avanzado, para parte de la Ciudad de Cali.

En este sentido el documento, Política Nacional para la Gestión Integral del Recurso Hídrico en Colombia (2010), afirma que la materia orgánica generada por las actividades domésticas en 1999 fue de 482.193 ton (1321 ton/día) medida

como DBO, de las cuales se trató apenas el 4%, para un vertimiento neto de 462.759 ton., es importante destacar que para el año 2010, se registra un avance importante en el tratamiento de aguas residuales domésticas en el país, de los 75,95 m³/s de aguas residuales municipales que se produjeron, se trataron 18,93 m³/s, lo que representó el 24,92%. En este contexto es conveniente indicar que si bien hay un número importante de sistemas de tratamiento de aguas residuales implementado o en proceso de ello, la operación y mantenimiento de estos sistemas se convierte en otros de los grandes retos, pues solo el 51% de ellos presenta un funcionamiento bueno o regular (Tabla 4).

Tabla 4. Estado de los sistemas de tratamiento aguas residuales en Colombia, 2006. Fuente: Política Nacional para la Gestión Integral del Recurso Hídrico. (2010). Bogotá, D.C.: Colombia, Ministerio de Ambiente, Vivienda y Desarrollo Territorial. p. 51

ESTADO	AÑO 2006	
	No.	(%)
BUENO	108	24
REGULAR	122	27
DEFICIENTE	100	22
NO SE CONOCE EL ESTADO	124	27
TOTAL PTAR CONSTRUIDAS	454	100

5.7 Sistema Globalmente Armonizado - SGA, estándar internacional para la comunicación y clasificación de los peligros de los productos químicos.

Los productos químicos, directa e indirectamente, afectan todos los aspectos de nuestras vidas y pueden ser a la vez útiles y dañinos. Para poder utilizar con seguridad los productos químicos y mitigar las consecuencias negativas de una exposición intencional, los peligros químicos deben ser comunicados eficazmente a los trabajadores y al público. Para facilitar la comunicación racional de los peligros químicos, el Sistema Globalmente Armonizado de Clasificación y Etiquetado de Productos Químicos (SGA) se adoptó en 2002, por el Consejo Económico y Social de las Naciones Unidas (ONU), como un estándar internacional para la comunicación y clasificación de los peligros de los productos químicos. En la Cumbre Mundial de Desarrollo Sostenible - CNUMAD, llevada a cabo en Johannesburgo, Sudáfrica, en 2002, los gobiernos acordaron en establecer una meta de implementación para el SGA para el año 2008. También se inició la Alianza Global de la CNUMAD para la Creación de Capacidades para la Implementación del SGA. Coordinado por UNITAR, la OIT y la OCDE. (UNITAR & ILO, 2005).

Para el SGA, la clasificación de los peligros generalmente consta de tres pasos: i) La identificación de los datos pertinentes a los peligros de una sustancia o una

mezcla de sustancias; ii) La consiguiente revisión de los datos para comprobar los peligros asociados con esa sustancia o mezcla de sustancias; y iii) La decisión sobre si la sustancia o la mezcla se clasificará como sustancia o mezcla peligrosa, y su grado de peligrosidad, cuando proceda, contrastando con los de los criterios acordados para la clasificación de peligros.

Tabla 5. Clasificación de peligros según el SGA. Fuente: (UNITAR & ILO, 2010). Desarrollo de una Estrategia Nacional para la Implementación del SGA. Documento Guía para el Apoyo a la Implementación del Sistema Globalmente Armonizado para la Clasificación y el Etiquetado de Productos Químicos (SGA). Naciones Unidas. 90 P.

Peligros físicos	Peligros para la salud
<ul style="list-style-type: none"> • Explosivos • Gases inflamables • Aerosoles inflamables • Gases comburentes • Gases a presión • Líquidos inflamables • Sólidos inflamables • Sustancias o mezclas que reaccionan espontáneamente (autorreactivas) • Líquidos pirofóricos • Sólidos pirofóricos • Sustancias o mezclas que experimentan calentamiento espontáneo • Sustancias y mezclas que, en contacto con el agua, desprenden gases inflamables • Líquidos comburentes • Sólidos comburentes • Peróxidos orgánicos • Sustancias y mezclas corrosivas para los metales 	<ul style="list-style-type: none"> • Toxicidad aguda • Corrosión/irritación cutáneas • Lesiones oculares graves/irritación ocular • Sensibilización respiratoria o cutánea • Mutagenicidad en células germinales • Carcinogenicidad • Toxicidad para la reproducción • Toxicidad sistémica específica de órganos diana - Exposición única • Toxicidad sistémica específica de órganos diana – Exposiciones repetidas • Peligro por aspiración <p>Peligros para el medio ambiente</p> <ul style="list-style-type: none"> • Peligros para el medio ambiente acuático Toxicidad acuática aguda Toxicidad acuática crónica • Peligros para la capa de ozono

De conformidad con la clasificación del SGA, hay tres clases de peligros: i) físicos, ii) a la salud y iii) al medio ambiente. Tabla 5.

Una vez que se haya clasificado una sustancia (por ejemplo, se descubre que la sustancia X es tóxica o inflamable), es preciso comunicar sus peligros a los destinatarios. Las principales herramientas para hacerlo son las etiquetas y las Fichas de Seguridad - MSDS. En ellas se dan a conocer los peligros en forma de pictogramas, palabras de señal y otros elementos de comunicación. (UNITAR & ILO, 2010). Las sustancias investigadas en el trabajo “Análisis del riesgo ambiental por compuestos orgánicos presentes en aguas del Río Cauca, a su paso por la zona urbana de la ciudad de Cali-Colombia”, correspondieron a las categorías de peligro para la salud y el medio ambiente.

De acuerdo a UNITAR & ILO (2010), algunos elementos de etiquetado del SGA han sido normalizados (idénticos sin variación) y se refieren directamente a las clases de peligro y los grados de peligrosidad. Otros elementos de etiquetado se han armonizado siguiendo definiciones y/o principios comunes. Figura 1.

Los elementos de etiquetado armonizados que figuran en el SGA son, entre otros, los siguientes: i) Pictogramas: composiciones gráficas que contienen un símbolo, así como un borde, un motivo o un color de fondo, que sirven para comunicar informaciones específicas sobre los peligros físicos, para la salud y para el medio ambiente, y que se asignan a una clase o categoría de peligro del SGA. ii) Palabras de advertencia: “Peligro” o “Atención” se utilizan para hacer énfasis en los peligros e indican el grado relativo de gravedad del peligro, y se asignan a una clase o categoría de peligro del SGA. iii) Indicaciones de peligro: frases normalizadas asignadas a una clase o categoría de peligro del SGA para describir la naturaleza del peligro.

Los pictogramas, las palabras de advertencia y las indicaciones de peligro se han normalizado y asignado a clases o categorías específicas de peligros, según corresponde. Este enfoque facilita a los países la tarea de aplicar el sistema y debería facilitar asimismo a las empresas el cumplimiento de los reglamentos basados en el SGA. Estos elementos normalizados no están sujetos a variaciones y deberían figurar en las etiquetas del SGA tal y como se indica en el SGA para cada categoría/clase de peligro en el sistema. El uso de pictogramas, palabras de advertencia o indicaciones de peligro distintos de los asignados a cada uno de los peligros en el SGA sería contrario a la armonización.

En relación a peligros al medio ambiente acuático, las sustancias se clasifican en Toxicidad acuática aguda y crónica (UNITAR & ILO, 2012):

(i) Toxicidad acuática aguda es la propiedad intrínseca de una sustancia de provocar lesiones en los organismos acuáticos tras una breve exposición a esa sustancia. Las sustancias y mezclas de esta clase de peligro se clasificarán en una de las tres categorías de toxicidad en base a los datos sobre toxicidad aguda: CL50 (peces) o CE50 (crustáceos) o CEr50 (para algas u otras plantas acuáticas). En algunos sistemas reguladores, estas categorías de toxicidad aguda pueden estar subdivididas o ampliarse para determinados sectores.

		
<ul style="list-style-type: none"> • Comburente 	<ul style="list-style-type: none"> • Inflamable • Autorreactivo • Pirofórico • Experimenta calentamiento espontáneo • Emite gases inflamables • Peróxido orgánico 	<ul style="list-style-type: none"> • Explosivo • Autorreactivo • Peróxido orgánico
		
<ul style="list-style-type: none"> • Toxicidad aguda (grave) 	<ul style="list-style-type: none"> • Corrosivo para los metales • Corrosivo cutáneo • Lesiones oculares graves 	<ul style="list-style-type: none"> • Gas a presión
		
<ul style="list-style-type: none"> • Carcinogenicidad • Sensibilización respiratoria • Toxicidad para la reproducción • Toxicidad específica de órganos diana (exposiciones repetidas) • Mutagenicidad en células germinales • Peligro por aspiración 	<ul style="list-style-type: none"> • Toxicidad acuática (aguda) • Toxicidad acuática (crónica) 	<ul style="list-style-type: none"> • Toxicidad aguda (nociva) • Irritación cutánea/ocular • Sensibilización cutánea • Toxicidad específica de órganos diana (exposición única) • Peligros para la capa de ozono

Figura 1. Pictogramas y clases de peligro del SGA. Fuente: UNITAR & ILO (2010). Desarrollo de una Estrategia Nacional para la Implementación del SGA. Documento Guía para el Apoyo a la Implementación del Sistema Globalmente Armonizado para la Clasificación y el Etiquetado de Productos Químicos (SGA). Naciones Unidas. 90 P.

(ii) Toxicidad acuática crónica es la propiedad potencial o real de una sustancia de provocar efectos nocivos en los organismos acuáticos durante exposiciones determinadas en relación con el ciclo de vida del organismo. Las sustancias y mezclas en esta clase de peligro se clasificarán en una de las cuatro categorías de toxicidad en base a los datos sobre toxicidad aguda y datos acerca del comportamiento o destino de la sustancia en el medio ambiente: CL50 (peces) o

CE50 (crustáceos) o CER50 (para algas u otras plantas acuáticas) y sobre degradación/bioacumulación. Tabla 6.

Si bien son preferibles los datos derivados de ensayos, cuando no se disponga de ellos, podrán usarse en el proceso de clasificación las relaciones cuantitativas estructura-actividad (QSAR) validadas para la toxicidad acuática y el log Kow. El log Kow es un sustituto del factor de bioconcentración (FBC), por lo que el valor cuantificado de éste prevalecerá siempre.

La categoría crónica IV se considera una clasificación de tipo “red de seguridad” para los casos en que los datos disponibles no permitan la clasificación de acuerdo a los criterios establecidos pero exista, sin embargo, algún motivo de preocupación.

Tabla 6. Toxicidad acuática aguda y crónica, y su relación con el Log Kow, y el FBC. Fuente: UNITAR & ILO (2012). Understanding the Globally Harmonized System of Classification and Labeling of Chemical (GHS). A companion guide to the GHS purple book. United Nations. 86 p

Categoría aguda 1 Toxicidad aguda ≤ 1,00 mg/l		Categoría aguda 2 Toxicidad aguda > 1,00 pero ≤ 10,0 mg/l		Categoría aguda 3 Toxicidad aguda > 10,0 pero ≤ 100 mg/l	
Categoría crónica 1 Toxicidad aguda ≤ 1,00 mg/l y ausencia de degradabilidad rápida y log Kow ≥ 4 salvo FBC < 500		Categoría crónica 2 Toxicidad aguda > 1,00 pero ≤ 10,0 mg/l y ausencia de degradabilidad rápida y log Kow ≥ 4 salvo FBC < 500 y salvo toxicidad crónica >1 mg/l		Categoría crónica 3 Toxicidad aguda > 10,0 pero ≤ 100,0 mg/l y ausencia de degradabilidad rápida y log Kow ≥ 4 salvo FBC < 500 y salvo toxicidad crónica > 1 mg/l	
				Categoría crónica 4 Toxicidad aguda > 100 mg/l y ausencia de degradabilidad rápida y log Kow ≥ 4 salvo FBC < 500 y salvo toxicidad crónica > 1 mg/l	

6. METODOLOGÍA

Tipo de investigación: Exploratoria

Unidad de Análisis: El Río Cauca a su paso por la zona urbana de la ciudad de Cali

6.1 ZONA DE ESTUDIO

El área de estudio está delimitada por el tramo del Río Cauca, localizado entre el puente de El Hormiguero y la desembocadura del Río Cali, para la cual se determinaron 5 estaciones de muestreo. El Puente El Hormiguero se denominó como Estación de muestreo uno (E1), cuyas coordenadas geográficas son $03^{\circ}18'09,2''\text{N}$, y $76^{\circ}28'50,8''\text{W}$, y altitud 978.3 ms nm; la Estación de muestreo dos (E2): Desembocadura del Canal CVC-Sur con coordenadas: $03^{\circ}22'40.2''\text{N}$, $76^{\circ}28'17.7''\text{W}$, y altitud 967.1 msnm; la Estación de muestreo tres (E3): Bocatoma de la Planta de Tratamiento de Agua Potable -PTAP de Puerto Mallarino con coordenadas: $03^{\circ}26'45.4''\text{N}$, $76^{\circ}28'30.4''\text{W}$, y altitud 966.6 msnm; la Estación de muestreo cuatro (E4): Puente de Juanchito con coordenadas: $03^{\circ}26'59''\text{N}$, $76^{\circ}28'32.1''\text{W}$, y altitud 963.6 msnm; y la Estación de muestreo cinco (E5): Desembocadura del Río Cali con coordenadas: $03^{\circ}30'20.9''\text{N}$, $76^{\circ}29'29.8''\text{W}$, y altitud 965.8 msnm, (Figura 2).

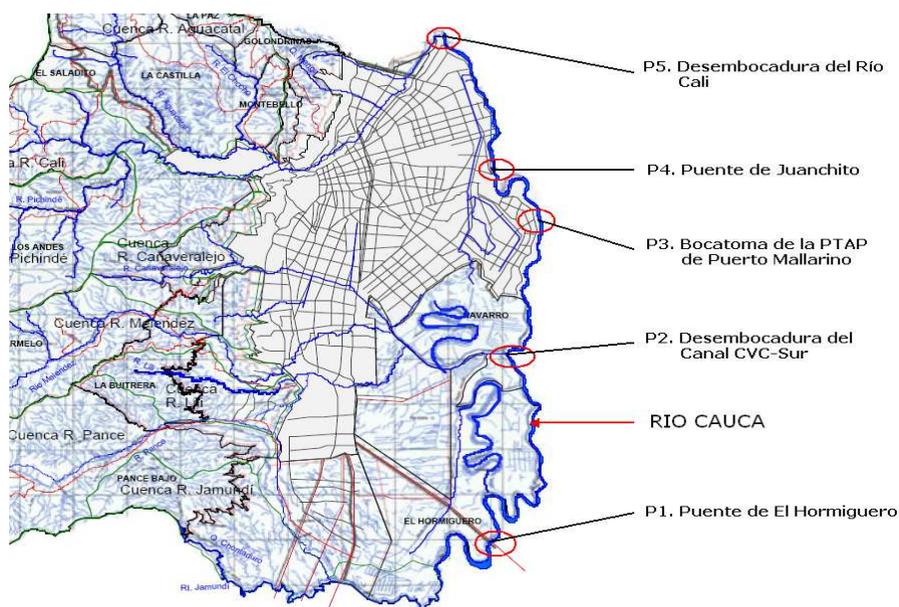


Figura 2. Mapa de la Ciudad de Cali indicando los puntos de muestreo en el Río Cauca. Fuente: (Cali en Cifras, 2011, 2012).

6.2 TÉCNICAS E INSTRUMENTOS PARA LA RECOLECCIÓN DE LA INFORMACIÓN Y SU ANÁLISIS:

Para dar cumplimiento con el objetivo: Identificar y caracterizar los compuestos orgánicos presentes en las aguas del Río Cauca a su paso por la ciudad de Cali. Se procedió de la siguiente manera:

Fase 1: La toma de muestra se realizó, en el centro del río, a 50 cm de profundidad, desde lancha de la Corporación Autónoma regional del Valle del Cauca - CVC, en envases ámbar de 4 litros, siguiendo el protocolo de APHA, AWWA, WPCF, 1992. Se realizó extracción en fase sólida, usando cartuchos Water OASIS, siguiendo el método Water OASIS, 2002. Los extractos se leyeron en un GC/MS Agilent 6890 N con MS detector Agilent 5973 N e inyección automática Agilent 7673. Columna capilar DB-5MS of 30 m de longitud, 250 μ m de diámetro y 0.30 μ m de espesor de película modelo No. J&W 122-5532. temperatura máxima de 325 °C. Flujo constante de 1 mL/min. Detector de temperatura de 250 °C. Modo Pulsed Splitless, temperatura Quadropole de 150 °C. Fuente de ionización de 230 °C. Temperatura inicial del horno de 50 °C/min, a una rata de 25 °C/min hasta 100 °C, luego a una rata de 5 °C/min hasta 300 °C durante 5 min. La extracción y la lectura se realizaron en el Laboratorio de Medicina Legal y Ciencias Forenses de Cali.

Fase 2: Para la identificación de los compuestos orgánicos encontrados en los cromatogramas tomados en el modo SCAN en los puntos de muestreo se utilizó el software “The NIST Mass Spectral Library version 2.0f (julio 23, 2008)” distribuido por The Standard Referente Data Program of NIST. Copyright 1987-2008. Esta identificación se realizó en Laboratorio de Medicina Legal y Ciencias Forenses de Cali. Por la técnica de cromatografía de gases acoplado a masas (Anexo 1). Se presentan solo los compuestos que el software identificó como los más probables, sin embargo no se puede garantizar un 100%, ya que se necesita hacer un análisis mas completo con patrones y utilizando el modo SIM.

Fase 3: la caracterización de los compuestos se realizó mediante búsqueda en la base de datos NCBI Pubchemcompound, en la cual se obtuvieron los siguientes registros: (i) CID, código interno de clasificación de compuestos químicos de la base de datos; (ii) peso molecular; (iii) fórmula molecular; (iv) estructura molecular en 2D; v) nombre del compuesto; vi) valor QSAR del log Kow, de la base de datos NCBI Pubchemcompound; (vii) Número de registro CAS. Igualmente para todos los compuestos, se realizó búsqueda de las fichas de seguridad – MSDS, en las bases de datos (MSDS, SIGMA ALDRICH), caracterizando cada uno como: (i) posee ficha de seguridad, y (ii) no posee ficha de seguridad.

Para el segundo objetivo específico: Identificar y analizar el riesgo ambiental de los compuestos orgánicos encontrados en el Río Cauca a su paso por la ciudad de Cali. Se procedió de la siguiente forma:

Fase 1: la identificación del riesgo potencial de cada uno de los compuestos se logró, mediante el uso de la base de datos NCBI Pubchemcompound: i) se revisó la bioactividad (toxicidad, genotoxicidad, mutagenicidad, entre otras) direccionados al link NCBI Pubchembioassay; ii) efectos médicos y toxicidad, este enlace envió a la base de datos HSDB TOXNET; iii) seguridad y manejo, envió a múltiples bases de datos; iv) literatura, a la base de datos NCBI Pubmed; v) monitoreo y métodos de análisis, direccionó a la base de datos HSDB TOXNET.

Fase 2: para el análisis del riesgo potencial, de cada una de las sustancias en cada estación y de manera global en la zona de estudio, se utilizó la información (identificada, caracterizada, investigada, seleccionada, clasificada, y analizada) de las bases de datos: NCBI Pubmed, NCBI Pubchemcompound, HSDB TOXNET, NCBI Pubchembioassay, bvsde.paho.org, y las hojas de seguridad -MSDS, en las bases de datos SIGMA ALDRICH, MSDS.

Fase 2.1: para realizar la evaluación del riesgo potencial, se clasificó el peligro por categorías de toxicidad usando la información de las fichas de seguridad – MSDS, de bases de datos MSDS, SIGMA ALDRICH, y la información del Sistema Globalmente Armonizado de Clasificación y Etiquetado de Productos Químicos – SGA, (UNITAR & ILO, 2010), (UNITAR & ILO, 2012). Se propuso una escala colorimétrica para representar cada categoría de toxicidad. Tabla 7.

Tabla 7. Escala colorimétrica para cada categoría de toxicidad. Fuente: Autores.

Toxicidad categoría 1	Toxicidad categoría 2	Toxicidad categoría 3	Toxicidad categoría 4	Toxicidad categoría 5	No peligroso	Sin información

Fase 2.2: se realizó evaluación del riesgo potencial, utilizando categorías del logaritmo del coeficiente de partición Kow, las cuales corresponden al valor QSAR, XlogP3:AA, suministrado por la base de datos validada, NCBI Pubchemcompound, y la escala de categorías de riesgo de bio-acumulación para organismos acuáticos: alta, media alta, media, media baja, y baja, de acuerdo a la base de datos bvsde.paho.org; esta información tiene relación directa con el factor de bio-concentración – FBC, de acuerdo al Sistema Globalmente Armonizado de Clasificación y Etiquetado de Productos Químicos – SGA (NACIONES UNIDAS, 2011). Con relación a lo anterior, se propuso una escala colorimétrica para

representar el riesgo de bio-acumulación de los compuestos estudiados, en organismos acuáticos. Tabla 8.

Tabla 8. Escala colorimétrica de la relación entre el log Kow, y el riesgo potencial de bio-acumulación en organismos acuáticos. Fuente: Autores

log Kow > 5	log Kow: 5-3.5	log Kow: 3.5-3	log Kow: 3-1	log Kow < 1	Sin información
Riesgo alto de bioacumulación	Riesgo medio-alto de bio-acumulación	Riesgo medio de bioacumulación	Riesgo medio-bajo de bio-acumulación	Riesgo bajo de bioacumulación	

En el mismo sentido, el Sistema Globalmente Armonizado de Clasificación y Etiquetado de Productos Químicos – SGA, (NACIONES UNIDAS, 2011). Relaciona el FBC y el QSAR, mediante la siguiente condición: si el FBC y el log Kow, no se pueden obtener experimentalmente y él QSAR es reportado por una fuente validada, entonces se usará él QSAR: XlogP3:AA., de la base de datos NCBI Pubchemcompound, en los siguientes rangos: i) sustancias con potencial de bio-concentración sí, $\log Kow \geq 4$; y ii) sustancias sin potencial de bio-concentración sí, $\log Kow < 4$. La Tabla 9. Propone una escala colorimétrica para esta condición.

Tabla 9. Escala colorimétrica del riesgo potencial entre los valores del log Kow y el potencial de bio-concentración. Fuente: Autores.

sustancias con potencial de bio-concentración sí, $\log Kow \geq 4$	sustancias sin potencial de bio-concentración sí, $\log Kow < 4$

Fase 2.3: el análisis del riesgo potencial ambiental por compuestos orgánicos, en la zona de estudio, se realizó mediante una matriz de análisis. Tabla 10, en la cual se recopiló toda la información investigada de cada sustancia: i) identificación, ii) caracterización; iii) evaluación del peligro por categorías de toxicidad; iv) evaluación del riesgo mediante la escala (alta, media alta, media, media baja y baja) del log kow, el cual relaciona el riesgo de bio-acumulación, y v) se utilizó la condición del potencial de bio-concentración, cuando el $\log Kow \geq 4$, y para valores menores de 4, la sustancia no tiene potencial de bio-concentración.

Tabla 10. Matriz de análisis del riesgo potencial ambiental por compuestos orgánicos encontrados en la zona de estudio. Fuente: Autores.

Nombre del compuesto	Coefficiente de partición octanol-agua: XLogP3-AA	Riesgo de bioacumulación	Escala Colorimétrica	Potencial de Bio-concentración	Escala Colorimétrica	Categoría de toxicidad	Escala Colorimétrica	Estación de muestreo

7. RESULTADOS.

Para dar cumplimiento con los objetivos propuestos, y de acuerdo con la metodología empleada, se procedió de la siguiente manera, para la obtención de los resultados de esta investigación, primera de este tipo en la zona de estudio.

En cada una de las estaciones, se identificaron y caracterizaron los compuestos orgánicos (Anexo 1). Las cuales fueron registradas en el documento de informe final a COLCIENCIAS (Larmat *et al.*, 2009). De esa investigación se obtuvieron 20 productos académicos: 7 internacionales, 3 nacionales de convocatoria internacional y 10 nacionales (Tabla 1).

7.1 ESTACIÓN E1, PUENTE EL HORMIGUERO.

Esta estación está influenciada por los aportes de aguas residuales agrícolas, e industriales, de la industria de la caña de azúcar, cultivos de arroz, piña, flores, entre otros, y del parque industrial y comercial del Cauca, así como por aguas residuales vertidas sin tratamiento de la población del norte del Cauca, y sur del Valle. En esta estación, se identificaron por cromatografía de gases acoplado a masas del Laboratorio de Medicina Legal y Ciencias Forenses de Cali, las siguientes sustancias: (Figura 3).

Bencenometanol, 4-hidroxi-; Butilhidroxitolueno; 1H-inden-1-ona, 2,3-dihidro- ; 4-Cianotiofenol; Vitamina A aldehído; Ftalato de di-n-butilo; (2-dodecen-1-il) anhídrido succínico; Etil-iso allocholate ; Forbol; Ácido 11,13-dihidroxi-tetradec-5-inoico, éster de metilo; 2-hidroxi-4 ,4,8-trimetiltriciclo [6.3.1.0 (1,5)] dodecan-9-ona; 2-metil-Z, Z-3 ,13-octadecadienol; 7,7-dimetilbiciclo [2.2.1] hept-acetato de 2-il; y 1,1'-(4-Metil-1,3-fenilene)bis{3-[5-(p-tolil)-1,3,4-tiadi.

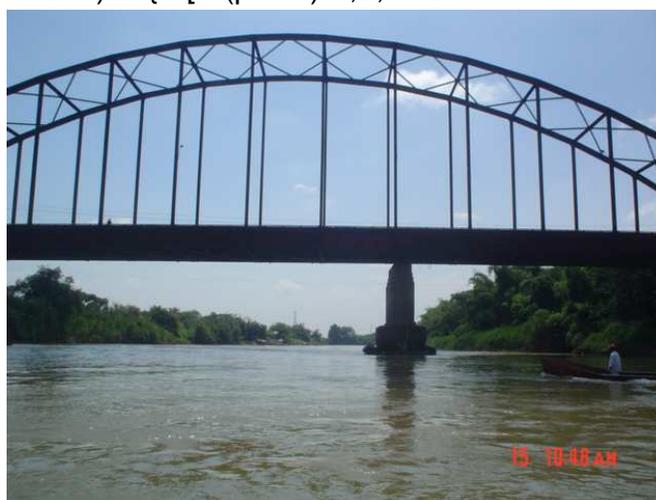


Figura 3. Área de la estación de muestreo de El Puente Hormiguero (E1)

7.1.2 ANÁLISIS DEL RIESGO POR COMPUESTOS ORGÁNICOS HALLADOS EN LA ESTACIÓN 1 (PUENTE HORMIGUERO).

7.1.2.1 Bencenometanol, 4-hidroxi-

Este compuesto es también conocido por el nombre IUPAC: 4 - (hidroximetil) fenol. CAS 623-05-2. Fórmula Molecular: $C_7H_8O_2$; Peso Molecular: 124.14 g/mol; Código de información del compuesto (CID125). Coeficiente de partición octanol-agua: XlogP3-AA: 0.20, (NCBI PubChemcompound, 2005). Figura 4. Es un sólido de color beige, rango de punto de fusión 118-126 °C. (SIGMA-ALDRICH, 2012).

Ball *et al.* (1984), registraron una respuesta negativa con el test de Ames, usando la cepa TA100, sin activador enzimático, con una dosis entre 50-2000µg por placa. De otra parte, la base de datos NCBI PubChem BioAssay, registra 13 bioensayos en los que interviene el Benzenemethanol, 4-hydroxy, o dicha molécula hace parte de una molécula más compleja, de mayor tamaño, o mayor peso molecular en el bioensayo, de los cuales uno es activo, y fue investigado por Yu *et al.* (2011), en el cual aislaron de los tallos de la planta *Arcangelisia gusanlung*. Cuatro nuevos glicósidos Megastigmane. Los compuestos exhiben fuertes efectos inhibitorios no sólo en la actividad de tirosinasa de champiñón *in vitro*, sino también sobre la melanogénesis en células.

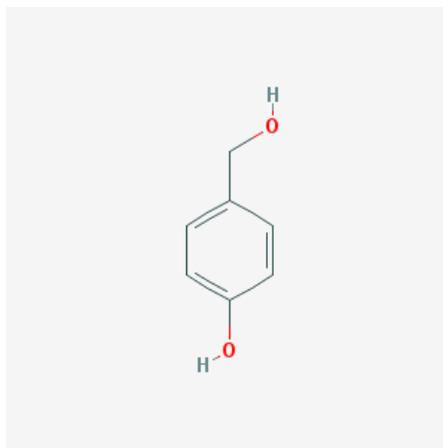


Figura 4. Imagen 2D del compuesto Bencenometanol, 4-hidroxi-.
Fuente:<http://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/summary/summary.cgi?cid=125#itabs-2d>

De la base de datos MSDS, se obtuvo la ficha de seguridad del producto Benzenemethanol, 4-hydroxy (Tabla 11). En la cual se caracterizó: el riesgo, información toxicológica, ecológica y regulatoria. Anexo 2.

7.1.2.2 Butilhidroxitolueno- BHT.

Este compuesto es también conocido por el nombre IUPAC: 2,6-di-ter-butil-4-metilfenol. CAS 128-37-0. Fórmula Molecular: $C_{15}H_{24}O$; Peso Molecular: 220.35046 g/mol. Código de información del compuesto (CID31404). Coeficiente de partición octanol-agua: XlogP3-AA: 5.3, (NCBI PubChem compound, 2005). Figura 5.

El Butilhidroxitolueno (BHT) es un sólido blanco, cristalino, sin olor. La presentación para uso como grado alimenticio no debe contener menos de 99% de BHT. Es insoluble en agua pero soluble en grasas. También es soluble en etanol. Se utiliza como un antioxidante para grasas y aceites o en material de envasado para alimentos que contienen grasa. Su función es evitar que las sustancias grasas se acidifiquen, se rancien, y finalmente entren en proceso de pudrición.

De acuerdo a la bases de datos TOXNET (NLMUS, 1993). En estudios en animales: Se ha encontrado que el BHT se absorbe fácilmente. Hay algo de deposición en el tejido adiposo después de altas dosis administradas a ratas. A los conejos se les administró dosis únicas o repetidas de BHT; los metabolitos excretados incluyen éster y éter glucurónido. Para ratas alimentadas con una dieta de BHT durante 35 días, el tejido del hígado y la grasa corporal mostró concentraciones elevadas y esto varió entre ratas hembras y machos. BHT se administró a ratones gestantes durante 18 días junto con otro grupo alimentado con BHT por 50 a 64 días, incluyendo 18 días de la preñez. No se observaron anomalías fetales. En un estudio con 144 ratones, no se observó ceguera en ninguno de las 7.765 crías nacidas durante toda la vida reproductiva de las madres. Ratas alimentadas con grandes dosis de BHT, mostraron un aumento en el colesterol sérico en ambos sexos. Grupos de ratas recién destetadas, y alimentados con BHT en conjunto con suplementos de manteca de cerdo, causó una reducción en la tasa de crecimiento, especialmente en los machos. También el aumento del peso absoluto del hígado y la relación de peso del hígado con el peso corporal en ambos sexos. Igualmente se observó aumento en la proporción entre el peso de la suprarrenal izquierda con el peso corporal en las ratas macho, pero no tuvo ningún efecto consistente en ratas hembras. BHT administrado a ratas durante 68 a 82 días causó una reducción en la tasa de aumento de peso y la infiltración grasa del hígado.

En el mismo sentido, la base de datos TOXNET, reporta una tabla de toxicidad del BHT, en la literatura Biomédica, Toxicology Literature Online –TOXLINE, presenta siete referencias de las cuales tres están en la línea de este trabajo:

i) En el ambiente, el BHT se descompone rápidamente formando varios metabolitos. El BHT no es fácilmente biodegradable, se asume de moderado a alto potencial de bio-acumulación. La toxicidad a largo plazo para dáfnidos fue de 0,07 mg/l. Por lo tanto, se recomienda la realización de una evaluación del riesgo ambiental. Sobre todo en las cuestiones relativas a la exposición, la bioacumulación y la toxicidad de los metabolitos. (Anónimo, 2005)

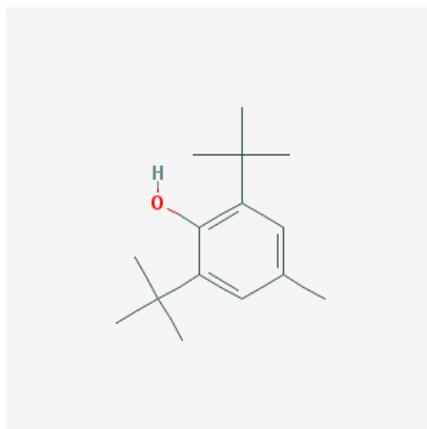


Figura 5. Imagen 2D de la sustancia Butilhidroxitolueno – BHT. Fuente: http://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/summary/summary.cgi?cid=31404&loc=ec_rcs#x27

ii) los autores Ferreira, *et al*, 1988, estudiaron los aditivos antioxidantes alimenticios: 2(3)-terc-butil-4-hidroxianisol (BHA), 2,6-di(terc-butil)-p-cresol (BHT) y los ésteres metílicos y propilo de ácido gálico, los que inhiben el crecimiento y el consumo de oxígeno al cultivo de *Trypanosoma cruzi*. Los valores IC₅₀ para el crecimiento y la absorción de oxígeno con BHA eran 0,284, 0,400, 0,083, para el BHT 0.235 mM, respectivamente. Además, el BHA inhibe la respiración de varias células tumorales, así como de las formas tripomastigotes procíclico y la circulación sanguínea de *T. brucei brucei*, con IC₅₀ en el rango 0.29-0.52 mM. La inhibición de la absorción de oxígeno de los parásitos por BHA no presenta el mecanismo de Michaelis-Menten, pero puede ser de una forma mixta. Se postula que estos compuestos son inhibidores porque se asemejan a la ubiquinona.

iii) Roebuck *et al.* (1984). Estudiaron los efectos de la dieta fenólica de antioxidantes [(BHA) CAS: 25013-16-5; (1,1-dimetiletil)-4-metoxifenol] y Butilhidroxitolueno [(BHT) CAS: 128-37-0; 2,6 -di-terc-butil-p-cresol] en la tumorigénesis pancreática. En ratas macho LEW puras, las que recibieron inyecciones de 30 mg de azaserina [CAS: 115-02-6; diazoacetato (éster) serina] por kg de peso una vez por semana durante 3 semanas y se mantuvieron en una dieta de control o 0,45% BHA, o 0,45 % de BHT dieta suplementada con el control a lo largo de la iniciación y fases de iniciación posterior a la del experimento.

En la iniciación posterior, 4 meses, las secciones de tejido pancreático se examinaron cuantitativamente por el número y tamaño de los focos pre-neoplásicas. Los tratamientos con BHT y BHA redujeron el número de focos por acidofila en el páncreas del 32 y 48%, respectivamente, pero no tenían ningún efecto sobre el tamaño focal. Por el contrario, los focos basófilos no estaban sujetos a la modulación de estos antioxidantes. Una zona de actividad de las enzimas involucradas en la inactivación del agente cancerígeno y se sabe que puede ser perturbado por el tratamiento con antioxidantes fue examinado en el hígado y el páncreas. Las actividades hepáticas de glucosa-6-fosfato, glutatión reductasa y glutatión-S transferasa fueron marcadamente elevadas, mientras que las actividades de catalasa y super óxido dismutasa se mantuvieron sin cambios. La actividad de la glutatión peroxidasa disminuyó. En el páncreas, sólo la actividad de peroxidasa glutatión se vio afectada, y se redujo para los grupos de tratamiento tanto en el BHA y BHT.

De otra parte Kouki-Inai *et al.*, 1988, administraron oralmente BHT, en concentraciones de 1% y 2% de la dieta a ratones B6C3F1 durante 104 semanas consecutivas. Los animales tratados, se sometieron a un período de recuperación de 16 semanas antes del examen patológico. Los ratones machos a los que se les administró BHT, presentaron adenoma hepatocelular o foco de alteración celular en el hígado, lo cual se incrementó en una clara relación dosis-respuesta. Los resultados de este estudio indican que el BHT, es un compuesto que produce tumores en el hígado del ratón macho B6CC3F₁.

Los estudios anteriores muestran que el BHT está relacionado con la aparición de tumores en ratas, los cuales están relacionados con el tiempo y porcentaje de administración de este compuesto en la dieta.

De otra parte, la base de datos NCI PubChemBioAssay (2009), registra 987 bioensayos en los que interviene el BHT, o dicha molécula hace parte de una molécula más compleja, de mayor tamaño, o mayor peso molecular en el bioensayo, de los cuales 40 son activos, de estos en la línea de este trabajo se destacan dos:

i) Selassie *et al.* (2005), estudiaron el efecto de la concentración mínima para inducir la actividad de la caspasa en un 50% (I50) de 51 fenoles sustituidos en una línea celular de leucemia murina (L1210), los datos se aplicaron para elaborar el modelo (QSAR). Patrones similares de citotoxicidad se observan en otras líneas celulares de mamíferos tales como HL-60, MCF-7, CCRF-CEM, y CEM/VLB. Las diferencias significativas entre la citotoxicidad y apoptosis QSAR, de los electrones que liberan los fenoles sugieren que la apoptosis consiste en la citotoxicidad mínima en la mayoría de estos monofenoles sustituidos. Figura 6.

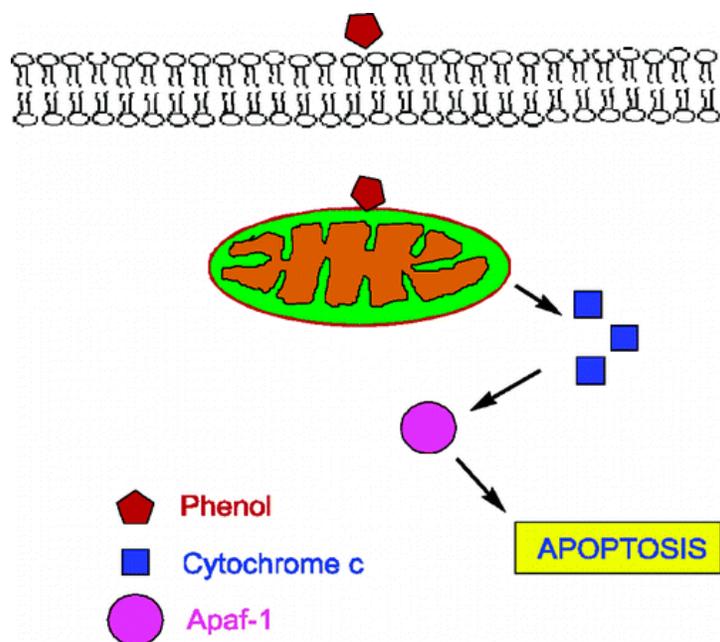


Figura 6. Mecanismo de producción de apoptosis producida por monofenoles.
Fuente: Selassie *et al.* (2005).

ii) en el mismo sentido, Chihoung *et al.* (1992), investigaron los efectos antioxidantes de los fenoles BHA, BHT y PG con relación al índice de mutagenicidad de las aminas heterocíclicas MelQ, MelQx, mediante el test de Ames. Los resultados mostraron mutagenicidad de MelQ, IQ y MelQx con las cepas TA98 y TA100, con activador enzimático S-9. Se demostró que el BHA y el PG, inhiben la mutagenicidad de MelQ, y MelQx. Por otro lado, se encontró que el BHT tenía poco efecto sobre la mutagenicidad del QI y MelQ a bajas concentraciones, pero aumentó significativamente su mutagenicidad a altas concentraciones. BHT inhibió ligeramente la mutagenicidad de MelQx en todas las concentraciones ensayadas. Lo anterior, confirma que el BHT, es un antioxidante para grasas y aceites, pero no presenta actividad antimutágena, contrariamente aumenta la respuesta del test de Ames, en presencia de activador enzimático.

De la base de datos MSDS, se obtuvo la ficha de seguridad del producto Butilhidroxitolueno – BHT (Tabla 12). En la cual se caracterizó: el riesgo, la información toxicológica, ecológica y regulatoria. Anexo 2.

7.1.2.3 1H-inden-1-ona, 2,3-dihidro-

También conocido por el nombre IUPAC: 2,3-dihidro-1H-inden-1-ona. CAS 83-33-0. Fórmula molecular: C₉H₈O, Peso molecular: 132.15922 g/mol. Código de

información del compuesto (CID6735). El coeficiente de reparto octanol – agua XLogP3-AA: 1.7, (NCBI PuChem compound, 2004). Figura 7.

El 1-Indanone es un sólido marrón oscuro, esta molécula es empleada en farmacología para la síntesis de diuréticos y como Agentes uricosúricos, supresores de gota los que actúan directamente sobre el túbulo renal para aumentar la excreción de ácido úrico, reduciendo así sus concentraciones en el plasma. Se han realizado seis bioensayos como anti-cancerígeno, todos fueron inactivos. (NCBI-PubChemBioassay, 2009).

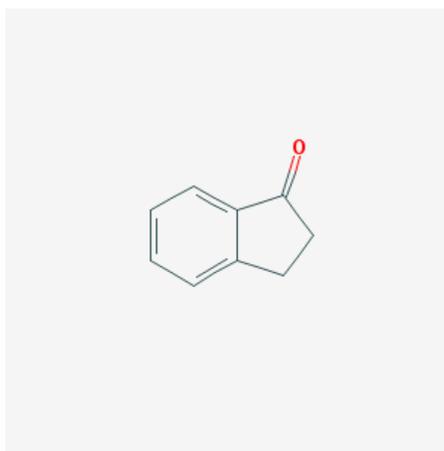


Figura 7. Estructura molecular del 1H-inden-1-ona, 2,3-dihidro-, en 2D. Fuente: <http://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/summary/summary.cgi?cid=6735#itabs-2d>

De la base de datos MSDS, se obtuvo la ficha de seguridad del producto 1-INDANONE (Tabla 13). En la cual se caracterizó: el riesgo, y la información toxicológica, ecológica y regulatoria. Anexo 2.

7.1.2.4. 4-Cianotiofenol

También conocido por el nombre IUPAC: 4-Sulfanilbenzocnitrilo, CAS 36801-01-1. Fórmula Molecular: C_7H_5NS , Peso Molecular: 135.1863 g/mol. Código de información del compuesto (CID585058). El coeficiente de reparto octanol – agua XLogP3-AA: 2.1, (NCBI PuChemcompound, 2004). Figura 8.

La base de datos PubChem Compound, no registra datos de bioensayos realizados con este compuesto (NCBI PuChem compound, 2004), la base de datos de PubMed, registra dos trabajos donde se utiliza la sustancia como parte de la reacción para el desarrollo de compuestos anti-trombóticos, probado en ratas. (NCBI-PubMed, 2001)

De la ficha de seguridad MSDS (Apollo Scientific limited, Marzo 2010), se obtuvo información del producto 4-Cianotiofenol (Tabla 14). En la cual se caracterizó: el riesgo, y la información toxicológica, ecológica y regulatoria. Anexo 2.

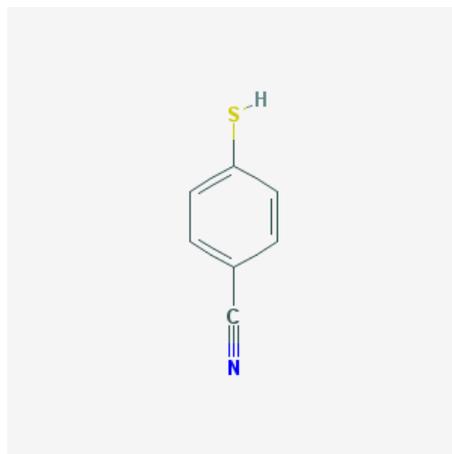


Figura 8. Estructura molecular del 4-Tiobenzonitrilo, en 2D. Fuente: <http://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/summary/summary.cgi?cid=585058>

7.1.2.5 Vitamina A aldehído

También conocido por el nombre IUPAC: ácido (2E, 4E, 6E, 8E) -3,7-dimetil-9-(2,6,6-trimetilciclohexen-1-il) nona-2,4,6,8-tetraenal. Fórmula Molecular : $C_{20}H_{28}O$, Peso Molecular: 284.43572 g/mol. Es un constituyente carotenoides de los pigmentos visuales. Es la forma oxidada de retinol que funciona como el componente activo del ciclo visual. Se une a la proteína opsina que forma el complejo de la rodopsina. Cuando son estimuladas por la luz visible, el componente de la retina del complejo rodopsina sufre isomerización en la posición 11 del doble enlace de la forma cis, lo que se invierte en las reacciones "oscuras" para volver a la configuración trans. Código de información del compuesto (CID638015). Coeficiente de reparto octanol-agua XLogP3-AA: 6.2. Se reportan 359 bioensayos de los cuales 194 son activos (NCBI PuChem compound, 2004). Figura 9.

Herrmann (1995), estudio los efectos teratogénicos del All-trans-retinal y ocho sustancias químicamente relacionados, tales como 3,4-dideshidro-retinol (vitamina A2), ácido 4-oxo-retinoico y varios isómeros cis, en el pez zebra, y encontró que estas sustancias generan malformaciones tales como edema, deformidades cerebrales (anophthalmia, microcefalia y acefalía), la duplicación de los placodesóticas y otolitos, y una cola más corta y curvada.

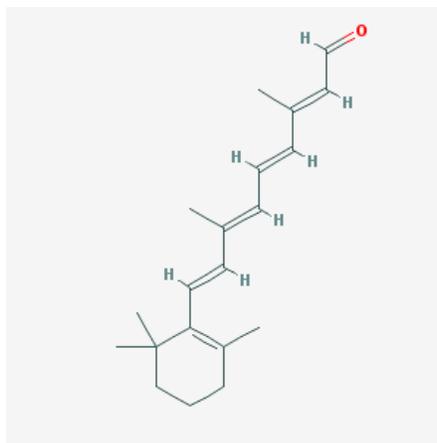


Figura 9. Estructura molecular de Vitamina A aldehído, en 2D. Fuente: <http://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/vw3d/vw3d.cgi?cmd=crtvw&reqid=4325662959961919129#>

De otra parte, Bagnasco & Vainio (1999), analizaron los mecanismos implicados en la variación de los efectos genotóxicos relacionados por carotenoides y vitamina A, a partir de una revisión crítica de una base de datos de 500 estudios. La mayor parte de los datos disponibles respaldan la opinión de que los carotenoides y vitamina A no inducen efectos genotóxicos en sí. Incluso en la ausencia de cualquier agente genotóxico, por el contrario, muestran algunos mecanismos que desempeñan un papel de protección en la promoción y progresión de tumores. De la base de datos MSDS, se obtuvo la ficha de seguridad del producto Vitamina A aldehído (Tabla 15). Anexo 2.

7.1.2.6 Ftalato de di-n-butilo

También conocido por el nombre UIPAC: Dibutilo benceno-1,2-dicarboxilato. CAS 84-74-2. Formula Molecular: $C_{16}H_{22}O_4$, Peso Molecular: 278.34348 g/mol. Código de identificación del compuesto (CID3026). Es un plastificante utilizado en la mayoría de los plásticos y se encuentra en el agua, el aire, el suelo, las plantas y los animales. Puede tener algunos efectos adversos con la exposición a largo plazo. Tiene coeficiente de partición XLogP3-AA: 4.7. Se reportan 623 bioensayos de los cuales 4 son activos (NCBI PuChemcompound, 2005). Figura 10.

Las ratas alimentadas durante 12 semanas con una dieta que contiene 1 g/kg de ftalato de dibutilo, se encontró que no acumulan, ftalato de dibutilo o ftalato monobutil en los tejidos u órganos (Williams & Blanchfield, 1975). Contrario a estos resultados, los investigadores Scott *et al.* (1987), encontraron absorción percutánea de una serie de ésteres de ftalato de dimetilo, ftalato de dietilo, ftalato de dibutilo, y ftalato di-(2-etilhexil), a través de membranas epidérmicas humanas y de rata. Los ésteres se aplicaron directamente a las membranas epidérmicas.

Después de la aplicación a las membranas, una fase de retardo seguido por una fase lineal de la absorción se detectó para cada ftalato diéster. La piel humana es menos permeable que la de rata para los cuatro diésteres.

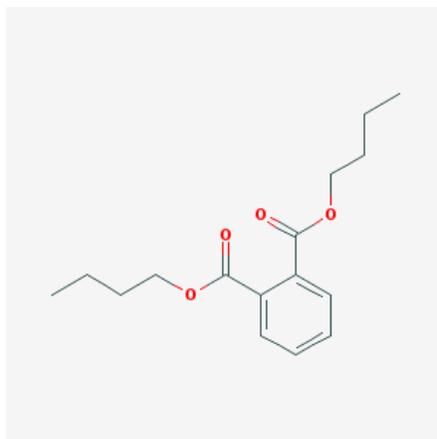


Figura 10. Estructura molecular de Ftalato de di-n-butilo, en 2D. Fuente: <http://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/summary/summary.cgi?cid=3026#itabs-2d>

Se registraron valores de Bioconcentración - BCF experimentales de ftalato de dibutilo en peces: *Pimephales promelas* de 12, 167 y 172; *Cyprinus carpio* de 3.6 y bluegill fish de 117; en ostras de 22 y 42; en camarones de 1500, 31 y 3; en otros crustáceos, insectos y algas, valores de 662, 624 y 3399 respectivamente. (TOXNET Home-HSDB, 2013). De la base de datos MSDS, se obtuvo la ficha de seguridad del producto Ftalato de di-n-butilo (Tabla 16). Anexo 2.

7.1.2.7 (2-dodecen-1-il) anhídrido succínico.

También conocido por Nombre IUPAC: 3 - [(Z)-dodec-2-enil] oxolano-2 ,5-diona. Fórmula molecular: $C_{16}H_{26}O_3$, Peso molecular: 266.37584 g/mol. Coeficiente de partición octanol - agua XLogP3-AA: 5.1. No registra bioensayos. Código de identificación (CID16212877), (NCBI PuChem compound, 2007). Figura 11.

De la base de datos MSDS, se obtuvo la ficha de seguridad del producto (2-dodecen-1-il) anhídrido succínico (Tabla 17). Anexo 2. En la cual se caracterizó: el riesgo, y la información toxicológica, ecológica y regulatoria. Este compuesto no presenta estudios de toxicidad, lo anterior, se estableció después de buscar en diferentes bases de datos, lo cual es corroborado por la compañía SIGMA-ALDRICH, cuando asegura “Según nuestras informaciones, creemos que no se han investigado adecuadamente las propiedades químicas, físicas y toxicológicas” del compuesto (2-dodecen-1-il) anhídrido succínico.

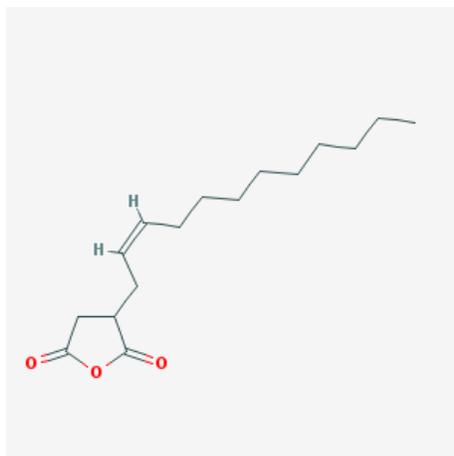


Figura 11. Estructura molecular de (2-dodecen-1-il) anhídrido succínico, en 2D. Fuente: http://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/summary/summary.cgi?cid=16212877&loc=ec_rcs

7.1.2.8 Etil-iso allocholate

Nombre IUPAC: acetato 4-(3,7,12-trihidroxi-10,13-dimetil-2,3,4,5,6,7,8,9,11,12,14,15,16,17-tetradecahidro-1H-ciclopenta[a]fenantren-17-il)pentanoate. Formula molecular: $C_{26}H_{44}O_5$ Peso molecular: 436.62456 g/mol.

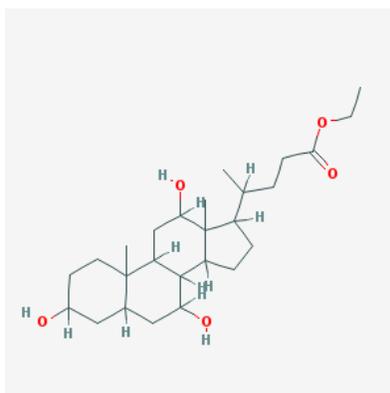


Figura 12. Estructura molecular de Etil-iso allocholate en 2D. Fuente: <http://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/summary/summary.cgi?cid=536919#itabs-2d>

Coefficiente de partición XLogP3-AA: 4.3. No registra bioensayos. Código de identificación (CID536919), (NCBI PubChemcompound, 2005). Figura 12. La base de datos MSDS, no reporta ficha de seguridad.

7.1.2.9 Forbol

No registra nombre IUPAC. Formula molecular: $C_{20}H_{28}O_6$, Peso molecular: 364.43272 g/mol. CAS 17673-25-5. Coeficiente de partición octanol - agua

XLogP3-AA: -0.8. Código de identificación (CID24832117), (NCBI-PubChem compound, 2008). De los estudios realizados se concluye que el Forbol no es una sustancia promotora de tumores, mientras que los ésteres de Forbol son potentes promotores de tumores. (TOXNET Home. HSDB, 2013). La base de datos MSDS, no registra ficha de seguridad. Figura 13.

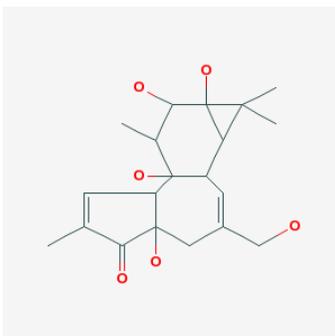


Figura 13. Estructura molecular de Forbol en 2D. Fuente: http://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/summary/summary.cgi?cid=24832117&loc=ec_rcs

7.1.2.10 **Ácido 11,13-dihidroxi-tetradec-5-inoico, éster de metilo**

También conocido por el nombre IUPAC: metilo 11,13-dihidroxitetradec-5-inoato de etilo. Formula molecular: $C_{15}H_{26}O_4$, Peso molecular: 270.36454 g/mol. Coeficiente de partición XLogP3-AA: 2.1. No registra bioensayos. Código de identificación (CID542226), (NCBI PubChemcompound, 2005). Figura 14. La base de datos MSDS, no reporta ficha de seguridad.

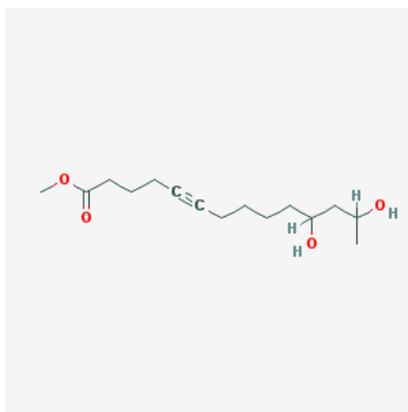


Figura 14. Estructura molecular de Ácido 11,13-dihidroxi-tetradec-5-inoico, éster de metilo en 2D.

Fuente: <http://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/summary/summary.cgi?q=all&cid=542226#itabs-3d>

7.1.2.11 **2-hidroxi-4,4,8-trimetiltriciclo [6.3.1.0 (1,5)] dodecan-9-ona**

También conocido por el nombre IUPAC: (3S,3aS,7R,9aS)-3-hidroxi-1,1,7-trimetil-2,3,4,5,8,9,9a,10-octahidroticiclo[6.3.1.0^{1,5}]dodecan-6-ona. Formula molecular:

$C_{15}H_{24}O_2$, Peso molecular: 236.34986 g/mol. Coeficiente de partición XLogP3-AA: 2.5. Código de identificación (CID10105543). No registra información de bioensayos (NCBI-PubChemcompound, 2006). Figura 15. La base de datos MSDS no reporta ficha de seguridad.

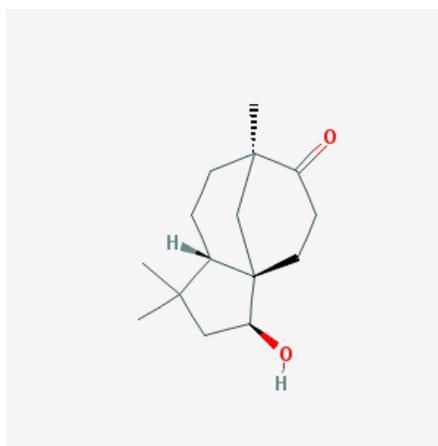


Figura 15. Estructura molecular de 2-Hidroxi-4,4,8-trimetiltriciclo[6.3.1.0(1,5)]-dodecan- en 2D.

Fuente: <http://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/summary/summary.cgi?q=all&cid=10105543#itabs-2d>

7.1.2.12 2-metil-Z, Z-3 ,13-octadecadienol

También conocido por nombre IUPAC: (3Z, 13Z)-2-metiloctadeca-3,13-dien-1-ol. Formula molecular: $C_{19}H_{36}O$, Peso molecular: 280.48854 g/mol. Coeficiente de partición XLogP3-AA: 7.1. No registra bioensayos. Código de identificación (CID5364412), (NCBI-PubChemcompound, 2005). Figura 16. La base de datos MSDS, no reporta ficha de seguridad del compuesto.

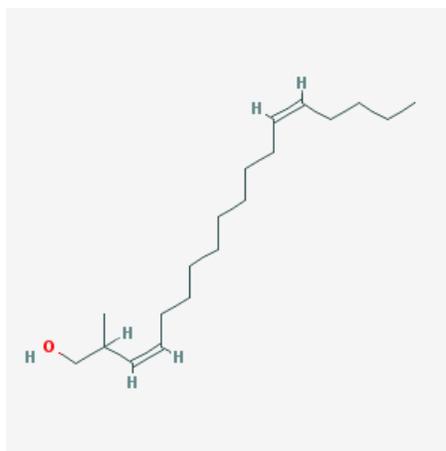


Figura 16. Estructura molecular de 2-metil-Z, Z-3 ,13-octadecadienol en 2D.

Fuente: <http://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/summary/summary.cgi?q=all&cid=5364412#itabs-2d>

7.1.2.13 7,7-dimetilbicyclo [2.2.1] hept-acetato de 2-il

También conocido por el Nombre IUPAC: (7,7-dimetil-3-biciclo [2.2.1] heptanilo) acetato. Fórmula molecular: $C_{11}H_{18}O_2$, Peso molecular: 182.25942 g/mol. Coeficiente de partición XLogP3-AA: 2.7. Código de identificación (CID539270). No registra bioensayos, (NCBI-PubChemcompound, 2005). Figura 17. La base de datos MSDS, no reporta ficha de seguridad del compuesto.

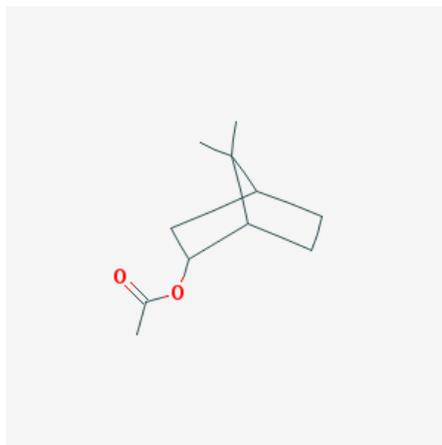


Figura 17. Estructura molecular de 7,7-dimetilbicyclo [2.2.1] hept-acetato de 2-il en 2D. Fuente: <http://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/summary/summary.cgi?cid=539270>

7.1.2.14 1,1'-(4-Metil-1,3-fenilene)bis{3-[5-(p-tolil)-1,3,4-tiadi

Este compuesto no se encontró en las bases de datos consultadas, igualmente no se halló ficha de seguridad, bioensayos, ni ensayos de toxicidad.

7.1.3 EVALUACIÓN DEL RIESGO DE LOS COMPUESTOS ORGÁNICOS EN EL PUENTE HORMIGUERO.

7.1.3.1 Evaluación del riesgo de acuerdo a las fichas de seguridad – MSDS, y la información del Sistema Globalmente Armonizado de Clasificación y Etiquetado de Productos Químicos – SGA.

La evaluación del riesgo por compuestos orgánicos en la Estación 1 (Puente el Hormiguero), se realizó de acuerdo a la información registrada en las fichas de seguridad MSDS, disponible para algunos de los compuestos. También se usó la información del Sistema Globalmente Armonizado de Clasificación y Etiquetado de Productos Químicos – SGA, y para un compuesto que no tenía información en las fichas de seguridad, ni en las bases de datos, este se clasificó en el grupo, sin información.

La evaluación de los compuestos encontrados en la E1 (Puente del Hormiguero), se realizó mediante construcción de seis grupos (Tabla 18), el primero

representado por el Ftalato de di-n-butilo, compuesto que registra toxicidad para la reproducción (categoría 1B); y toxicidad acuática aguda (Categoría 1). De acuerdo a datos de (TOXNET Home-HSDB, 2013), registra valores de Bioconcentración - FBC experimentales en peces: *Pimephales promelas* de 12, 167 y 172; *Cyprinus carpio* 3.6; bluegill fish 117; en ostras de 22 y 42; en camarones de 1500, 31 y 3; en otros crustáceos, insectos y algas, valores de 662, 624 y 3399 respectivamente.

Tabla 18. Evaluación del riesgo por categorías de toxicidad para compuestos orgánicos en la Estación 1.

Toxicidad categoría 1	Toxicidad categoría 2	Toxicidad categoría 3	Toxicidad categoría 4	No peligroso	Sin información
Ftalato de di-n-butilo	Butilhidroxitolueno-BHT;	(2-dodecen-1-il) anhídrido succínico	Vitamina A aldehído;	1H-inden-1-ona, 2,3-dihidro-	1,1'-(4-Metil-1,3-fenilene)bis{3-[5-(p-tolil)-1,3,4-tiadi
	Bencenometanol, 4-hidroxi-		4-Cianotiofenol		

El segundo, corresponde a los compuestos que registran toxicidad aguda (categoría 2): i) Butilhidroxitolueno- BHT, registra toxicidad en peces: LC-50 – *Oryzias sp.*– 5,3 mg/l - 48 h, en *Daphnia* y otros invertebrados acuáticos: EC50 – *Daphnia pulex* (Waterflea) - 1.44 mg/l - 48 h. Inai Kouki *et al.* (1988), registran el BHT, como un compuesto que produce tumores en el hígado de ratones macho, en el mismo sentido, Chihoung *et al.* (1992), confirmaron que el BHT, es un antioxidante para grasas y aceites, pero no presenta actividad antimutágena, contrariamente aumenta la respuesta del test de Ames, en presencia de activador enzimático; ii) Bencenometanol, 4-hidroxi-, presenta toxicidad aguda para la salud humana, y toxicidad en peces: LC-50 – *Jordanella floridae* – 10.5 mg/l - 2 h.

El tercero, con el compuesto: (2-dodecen-1-il) anhídrido succínico, registra toxicidad aguda para la salud humana. El cuarto con los compuestos: i) Vitamina A aldehído; presenta genotoxicidad *in vitro*: en ratón, en linfocitos por inhibición de ADN, y en rata, en la glándula mamaria por la inhibición del ADN. De acuerdo con Herrmann (1995), presenta efectos teratogénicos en el pez cebra; ii) el 4-Cianotiofenol, presenta toxicidad aguda: ingerido, inhalado, o a través de la piel, basado en datos de prueba, los cuales, no están disponibles (Apollo Scientific Limited, 2010). El quinto está representado por el 1H-inden-1-ona, 2,3-dihidro-, sustancia registrada sin peligro para la salud humana y los ecosistemas. El sexto, por 1,1'-(4-Metil-1,3-fenilene)bis{3-[5-(p-tolil)-1,3,4-tiadi, sustancia sin información.

7.1.3.2 Evaluación del riesgo por bio-acumulación, y el potencial de bio-concentración de acuerdo al valor del coeficiente de partición octanol-agua $K_{ow} = X_{logP3:AA}$.

La evaluación del riesgo por bio-acumulación se realizó de acuerdo a los criterios establecidos por la base de datos bvsde.paho.org., la cual determina cinco criterios de calificación (alta, media alta, media, media baja, y baja), y el potencial de bio-acumulación de acuerdo la información de (NACIONES UNIDAS, 2011), con relación al valor del coeficiente de partición octanol-agua K_{ow} , reportado para cada sustancia en la base de datos NCBI Pubchemcompound.

Tabla 19. Calificación del riesgo por bio-acumulación y el potencial de bio-concentración por compuestos orgánicos en la Estación 1.

Nombre del compuesto	XlogP3-AA	Riesgo por Bio-acumulación en la fauna acuática	Escala colorimétrica del riesgo	Riesgo por Potencial de bio-concentración	Escala colorimétrica del riesgo
2-metil-Z, Z-3,13-octadecadienol IUPAC: (3Z, 13Z)-2-metiloctadeca-3,13-dien-1-ol	7.1	Alta		Con Potencial de bio-concentración	
Vitamina A aldehído IUPAC: ácido (2E, 4E, 6E, 8E) -3,7-dimetil-9-(2,6,6-trimetilciclohexen-1-il)nona-2,4,6,8-tetraenal	6.2	Alta			
Butilhidroxitolueno IUPAC: 2,6-di-ter-butil-4-metilfenol	5.3	Alta			
(2-dodecen-1-il) anhídrido succínico IUPAC: 3 - [(Z)-dodec-2-enil] oxolano-2,5-diona	5.1	Alta			
Ftalato de di-n-butilo IUPAC: Dibutyl benzene-1,2-dicarboxilate	4.7	Media-alta			
Etil-iso allocholate IUPAC: acetato 4-(3,7,12-trihidroxi-10,13-dimetil-2,3,4,5,6,7,8,9,11,12,14,15,16,17-tetradecahidro-1H-ciclopenta[a]fenantren-17-il)pentanoate	4.3	Media-alta		Sin Potencial de bio-concentración	
7,7-dimetilbicyclo [2.2.1] hept-acetato de 2-il IUPAC: (7,7-dimetil-3-bicyclo [2.2.1] heptanilo)	2.7	Media-baja			
2-hidroxi-4,4,8-trimetiltricyclo [6.3.1.0 (1,5)] dodecan-9-ona IUPAC: (3S,3aS,7R,9aS)-3-hidroxi-1,1,7-trimetil-2,3,4,5,8,9,9a,10-octahidroticyclo[6.3.1.0(1,5)]dodecan-6-ona	2.5	Media-baja			
4-Cianotiofenol IUPAC: 4-Sulfanilbenzonitrile	2.1	Media-baja			
Ácido 11,13-dihidroxi-tetradec-5-inoico, éster de metilo IUPAC: metilo 11,13-dihidroxitetradec-5-inoato de etilo	2.1	Media-baja			
1H-inden-1-ona, 2,3-dihidro- ; 1-Indanone IUPAC: 2,3-dihidro-1H-inden-1-ona	1.7	Media-baja			
Benzenometano, 4-hidroxi-	0.20	Baja			
Forbol IUPAC: No registra	-0.8	Baja			
1,1'-(4-Metil-1,3-fenilene)bis(3-[5-(p-tolil)-1,3,4-tiadi	Sin información	Sin información			

La evaluación del riesgo de los compuestos encontrados en la E1 (Puente del Hormiguero), se ajustó a las categorías: i) alta, para cuatro compuestos en el rango de 5.1 a 7.1; lo anterior correspondió al 28,6%; ii) media-alta, para dos compuesto en el rango de 4.3 a 4.7; correspondiente al 14.3%; iii) media-baja, cinco compuestos en el rango 1.7 a 2.7; con una contribución de 35.7%; iv) baja, dos compuestos en el rango -0.8 a 0.20 lo que corresponde al 14.3%; v) un compuesto sin información; el potencial de bio-concentración correspondió al 42.8% de los compuestos. Tabla 19. Se encontró, también que la bioacumulación de estas sustancias es directamente proporcional al riesgo.

7.2. ESTACIÓN DESEMBOCADURA CANAL INTERCEPTOR CVC – SUR, E2.

El Canal Interceptor CVC - Sur o Canal Navarro, infraestructura que en principio tenía como finalidad controlar las inundaciones para permitir la urbanización de nuevas áreas, recibe las aguas lluvias y gran parte de las aguas residuales de la zona sur y suroccidental del municipio de Cali. Por su dirección, paralela a la vía a Navarro, recoge los cauces de los Ríos Cañaveralejo, Meléndez, y Lili. Los sólidos sedimentados en el cauce del canal contienen gran cantidad de materia orgánica proveniente de los vertimientos domésticos principalmente. (Figura 18).



Figura 18. Área de la estación de muestreo de la Desembocadura Canal Interceptor CVC – Sur.

Adicionalmente el canal pasa por el antiguo botadero de basura a cielo abierto de la ciudad (CONPES, 2009) página 19, resume así:

“El primero de noviembre de 1970 inició el funcionamiento en el denominado Cerro Antiguo, este recibió las basuras de la ciudad por más de 20 años, hasta que la Empresa de Servicio Público de Aseo de Cali, EMSIRVA E.S.P. S.A. en julio de 2003, inició su clausura y cierre.

El Navarro Antiguo, conformado por el llamado Cerro Antiguo de Residuos Sólidos y Cerro Antiguo de Residuos Hospitalarios, ocupa un área de aproximadamente 17 ha., tiene una altura aproximada de 30 m y está ubicado aguas arriba de las bocatomas de captación sobre el Río Cauca para las plantas de tratamiento de agua potable de Puerto Mallarino y Río Cauca, las cuales abastecen alrededor del 80% de la demanda del servicio de acueducto de la ciudad. Este aspecto es preocupante si se tiene en cuenta el alto nivel freático de la zona y la proximidad del vertedero al Canal interceptor CVC Sur,

tributario del Río, especialmente por los lixiviados generados en la descomposición de los desechos sólidos". (CONPES, 2009)

En el mismo sentido, el Documento CONPES, propone entre otros, la declaratoria de importancia estratégica para realizar el proyecto de inversiones para el tratamiento de lixiviados y cierre adecuado del botadero de Navarro de Cali, dada la sospecha de que dichos lixiviados escurren al Río Cauca, y el riesgo ambiental que esto conlleva a la salud humana y al ecosistema acuático.

En esta estación, se identificaron por cromatografía de gases acoplado a masas del Laboratorio de Medicina Legal y Ciencias Forenses de Cali, las siguientes sustancias:

4 - (1,1,3,3-tetrametil-butil) fenol; 1,4-dimetil-7-isopropilazuleno; Fenol, 2-metil-4-(1,1,3,3-tetrametil-butil)-; Ciclohexanona, 2-ciclohexilideno-; Ácido ursodeoxicólico; Androsta-5 ,14-dien-17-ona, 3-hidroxi-; 4-hexil-1-(7-metoxycarbonilheptil) biciclo [4.4.0] deca-2 ,5,7-trieno; Éster etílico del ácido linoleico; Ácido palústrico; Octadecano, 3-etil-5-(2-etilbutilo) -; Etil-iso allocholate ; Butil Ricinoleate; N-nonacosano; 4a-formil-7alpha-hidroxi-1-metil-8-metilideno-4aalpha, 4bbeta-gibbane-1 alfa, ácido 10beta-dicarboxílico; 1-Heptatriacotanol; Ácido Ciclopropanobutanoico, 2 - [[2 - [[2 - [(2-pentilciclopropil) metil] ciclopropil] metil] ciclopropil] metil] -, éster metílico .

Las cuales fueron registradas en el documento de informe final a COLCIENCIAS. (Larmat *et al.*, 2009).

7.2.1 ANÁLISIS DEL RIESGO DE SUSTANCIAS ORGÁNICAS HALLADAS EN LA ESTACIÓN 2 (DESEMBOCADURA CANAL INTERCEPTOR CVC – SUR).

7.2.1.1 Ácido ursodeoxicólico

También conocido por el nombre IUPAC: Ácido Pentanoico (4R)-4-[(3R,5S,7S,8R,9S,10S,13R,14S,17R)-3,7-dihidroxi-10,13-dimetil-2,3,4,5,6,7,8,-9,11,12,14,15,16,17-tetradecahidro-1H-ciclopenta[a]fenanthren-17-ilo] .Formula Molecular: C₂₄H₄₀O₄, Peso Molecular: 392.572g/mol. Código de información del compuesto (CID31401). Coeficiente de partición octanol-agua: XlogP3-AA: 4.9, (NCBI PubChem compound, 2005). Figura 19. Es un ácido biliar encontrado por primera vez en osos y es al parecer un precursor o un producto de quenodesoxicolato. Su administración cambia la composición de la bilis y puede disolver los cálculos biliares. Se utiliza como un colagogo y colerético. Los investigadores Watabe & Bernstein (1985), estudiaron la respuesta mutagénica con el test de Ames, del compuesto Ácido ursodeoxicólico, dando respuesta negativa con TA100, con y sin activador enzimático, y positiva con TA98, sin activador.

De otra parte, Earnest *et al.* (1994), compararon los efectos del ácido ursodesoxicólico dietético complementario al ácido cólico, un promotor tumoral conocido, y al piroxicam, un agente quimiopreventivo conocido, en el azoximetano (AOM) modelo de carcinogénesis cólica experimental. En estos experimentos se utilizaron 344 ratas Macho Fischer. Estos estudios demuestran por primera vez que el ácido ursodesoxicólico dietético suplementario es un agente quimiopreventivo en el modelo experimental de AOM de carcinogénesis colónica. En el mismo sentido, Trauner & Graziadei (1999), confirman que el ácido ursodeoxicólico (ursodiol) es un ácido biliar hidrofílico no tóxico utilizado para el tratamiento de trastornos del hígado predominantemente colestásica. Una mejor comprensión de los mecanismos celulares y moleculares de la acción del ácido ursodesoxicólico ha ayudado a dilucidar sus efectos como: citoprotector, anti-apoptóticos, inmunomoduladora y colerético.

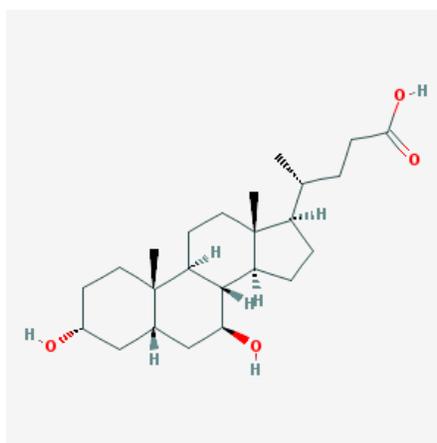


Figura 19. Imagen 2D del compuesto Ácido ursodeoxicólico.

Fuente: http://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/summary/summary.cgi?cid=31401&loc=ec_rcs#itabs-2d

Este compuesto presenta 707 bioensayos de los cuales 11 son positivos, de estos se pueden destacar dos trabajos que evalúan la citotoxicidad en células humanas, de esta sustancia y sustancias con características similares en cuanto a la protección contra el cáncer. (NCBI PubChem BioAssay, 2001). De la base de datos MSDS, se obtuvo la ficha de seguridad del producto Ácido ursodeoxicólico (Tabla 20). En la cual se caracterizó: el riesgo, información toxicológica, ecológica y regulatoria. Anexo 3.

7.2.1.2 1,4-dimetil-7-isopropilazuleno

También conocido por el Nombre IUPAC: 1,4-dimetil-7-propan-2-ilazulene. CAS 489-84-9. Formula molecular: C₁₅H₁₈, Peso Molecular: 198.30342 g/mol. Código de información del compuesto (CID3515). Coeficiente de partición octanol-agua: XlogP3-AA: 4.8, (NCBI PubChem compound, 2005). Figura 20.

EL Guaiazuleno (GA) es ampliamente utilizado como un ingrediente natural en muchos productos de cuidado de la salud y soluciones. Aunque se ha informado de que tienen efectos biológicos, dado que, GA y azuleno han demostrado ser citotóxicos frente a las células humanas normales y tumorales, por otra parte, guaiazuleno ha demostrado propiedades fotomutagénicos sobre las cepas bacterianas. Fiori *et al* (2011).

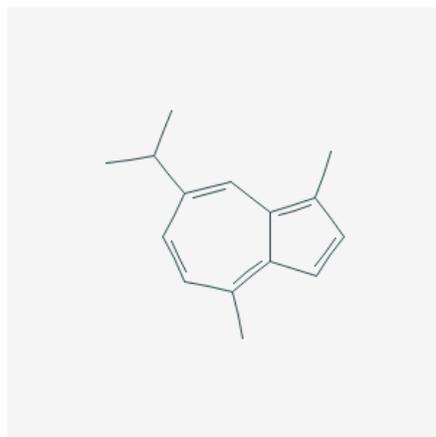


Figura 20. Imagen 2D del compuesto 1,4-dimetil-7-isopropilazuleno.

Fuente: <http://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/summary/summary.cgi?cid=3515#itabs-2d>

En cuanto a las propiedades fotomutagénicas los investigadores Wang *et al.* (2003), encontraron que el azuleno y guaiazuleno fueron positivos para el test *Salmonella typhimurium*, con las cepas: TA98, TA100 y TA102. Después de la irradiación con UVA y / o luz visible, tanto azuleno y guaiazuleno mostraron mutagenicidad 4-5-veces más alta que la mutación de fondo espontánea. Por lo tanto, mucho cuidado debe ser tomado al usar los productos cosméticos con azuleno/guaiazuleno como ingredientes ya que después de la aplicación de estos productos sobre la piel, la exposición al sol es inevitable. Este compuesto presenta 465 bioensayos de los cuales cinco son positivos, pero, no tenían información disponible. (NCBI PubChem BioAssay, 2001). De la base de datos MSDS, se obtuvo la ficha de seguridad del producto 1,4-dimetil-7-isopropilazuleno (Tabla 21). Anexo 3.

7.2.1.3 4 - (1,1,3,3-tetrametil-butil) fenol

Conocido por el nombre IUPAC: 4-(2,4,4-trimetilpentan-2-il)fenol. CAS 140-66-9. Fórmula molecular: $C_{14}H_{22}O$, Peso Molecular: 206.32 g/mol. Código de información del compuesto (CID8814). Coeficiente de partición octanol-agua: XlogP3-AA: 5.0, (NCBI PubChem compound, 2005). Figura 21.

La producción y uso de 4-(1,1,3,3-tetrametil-butil) fenol como intermediario químico puede provocar su liberación al medio ambiente a través de diversos flujos de residuos. Puede también estar formado como un producto de degradación de los tensoactivos de alquilfenol en las aguas residuales. Con un Koc estimado de 18000 sugiere que este fenol sea de poca movilidad en el suelo. En el agua, debe adsorberse a la materia particulada del sedimento. La biodegradación puede ser un proceso importante de destino final en la columna de agua. La volatilización de la superficie del agua se puede producir, la vida media estimada para un modelo de Ríos y lagos es 8 y 61 días, respectivamente. Dado que su valor del Factor de Bioconcentración - BCF estimado en 6000, se espera que este compuesto se bioacumule en los organismos acuáticos. (TOXNET Home-HSDB, November 2012).

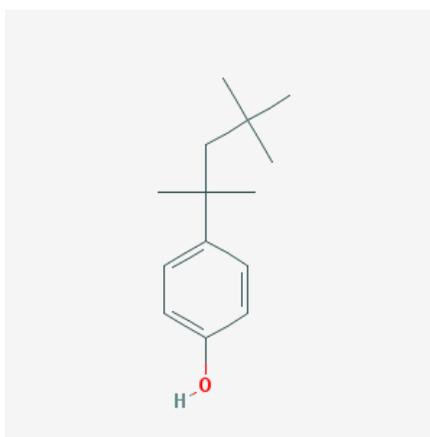


Figura 21. Imagen 2D del compuesto 4 - (1,1,3,3-tetrametil-butil) fenol

Fuente: http://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/summary/summary.cgi?cid=8814&loc=ec_rcs#itabs-2d

De otra parte, se evaluó la toxicidad subcrónica dietética del P-(1,1,3,3-tetrametil-butil) fenol, en un grupo de ratas (20/sexo/grupo) en concentraciones de 30, 300, y 3000 ppm durante 3 meses. Para todas las concentraciones, la ingesta de alimentos y las tasas de mortalidad no se vieron afectadas por el tratamiento. Pero, desde valores de 300 ppm y superiores, los signos tóxicos incluyen disminución de peso. Para 3000 ppm, las hembras redujeron los valores de hematocrito y tiroxina. (TOXNET Home-HSDB, November 2012).

Los disruptores endocrinos (EDC) se definen como compuestos ambientales que modulan las respuestas de los receptores dependientes de hormonas esteroides de manera anormal, dando lugar a problemas de salud adversos para los seres humanos, tales como el desarrollo de cáncer y la metástasis. Las catepsinas son proteasas que han sido implicados en la progresión del cáncer. Sin embargo, ha habido pocos estudios sobre la asociación entre las catepsinas y productos

químicos estrogénicos durante la progresión del cáncer. En este estudio, se examinó el efecto (s) del 4-terc-octilfenol (OP), un potente EDC, en la expresión de las catepsinas B y D en las células de cáncer de mama humano MCF-7 y un modelo de xenoinjerto de ratón. En conclusión, los resultados obtenidos en el estudio, sugieren que el OP en concentraciones de $10^{(-6)}$ M, puede acelerar la proliferación de células de cáncer de mama y la expresión de las catepsinas. Además, las células de cáncer de mama con el OP expuestas a un modelo de xenoinjerto de ratón fueron más agresivos de acuerdo con el análisis histológico y mostraron notablemente el aumento de expresión de la catepsina B. (Lee & Choi, 2013).

El número de contaminantes químicos ambientales susceptible de actuar como compuestos disruptores endocrinos mediante la interacción con receptores de estrógenos (ER) ha ido continuamente en aumentando. Para estudiar esta interacción, el uso de ensayos de genes informadores estables es relevante, pero específico de la especie, en ensayos de cribado in vitro todavía es incipiente la evaluación del peligro, de los productos químicos estrogénicos en vertebrados acuáticos. Este trabajo, describe el desarrollo de ensayos de genes informadores estables, basados en la expresión estable de los subtipos de ER en pez cebra (zfER α , zfER β 1, y zfER β 2) acoplado a los estrógenos respuesta luciferasa-elemento accionado en una línea de células de hígado de pez cebra (ZFL). La expresaron de la señal de luciferasa basal estable y significativa, fue inducida por 17 β -estradiol (E2) de una manera sensible y dosis-respuesta a CE (50)s de 0,2, 0,03, y 0,05 nM. (Cosnefroy *et al.*, 2012).

La detección y pruebas de los productos químicos que se unen a los receptores de estrógeno (RE) emergen como un problema importante en varios programas o marcos regulatorios. Existen discrepancias, sin embargo, si las exigencias ambientales de los programas de regulación deban ser incluidos los peces. En vista de las diferencias en las afinidades de unión a ERalpha y ERbeta y la contribución significativa de ERbeta a los efectos biológicos de los productos químicos, dado que, aún se desconoce si se necesitan ambos tipos de exigencias ambientales para los fines de regulación. Este estudio recoge publicaciones sobre las afinidades de unión a las exigencias ambientales, tanto de mamíferos y peces para 65 productos químicos, que abarcan una amplia gama de ligantes: fuertes, moderado, débil y no-ER. (Dang, 2010). De la base de datos MSDS, se obtuvo la ficha de seguridad del compuesto (Tabla 22). Anexo 3.

7.2.1.4 Éster etílico del ácido linoleico

También conocido por el nombre IUPAC: acetato de (9Z, 12Z)-octadeca-9,12-dienoato. CAS 544-35-4. Formula molecular: C₂₀H₃₆O₂, Peso Molecular: 308.49864 g/mol. Código de información del compuesto (CID5282184).

Coeficiente de partición octanol-agua: XlogP3-AA: 7.3, (NCBI PubChem compound, 2005). Figura 22. La base de datos MSDS, registra ficha de seguridad del compuesto (Tabla 23). Anexo 3.

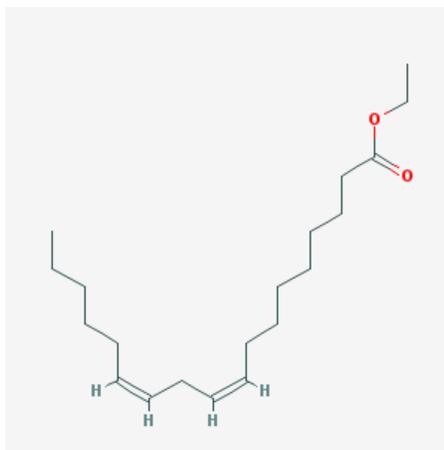


Figura 22. Imágenes 2D del compuesto Éster etílico del ácido linoleico

Fuente: <http://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/summary/summary.cgi?cid=5282184#itabs-2d>

La Luz UV induce múltiples daños, incluyendo la oxidación de proteínas en la piel, causando daño metabólico, elastosis y la formación de pigmento tal como lipofuscina. También durante el envejecimiento, la actividad de la proteasoma disminuye drásticamente junto con enzimas que protegen de la oxidación y como resultado se acumulan proteínas oxidadas. En este sentido, Schweikert *et al.* (2010), investigaron el complejo bioactivo de triacetato Pantenil y etil linoleato, como protector de la oxidación de proteínas. La utilización de este complejo evita la acumulación de la proteína oxidada como un resultado del foto-envejecimiento de la piel, la deshidratación del estrato córneo, elastosis y la formación de la pigmentación de la piel, o manchas de la edad.

Luthria & Sprecher (1994), investigaron como se metaboliza el linolato en ratas, encontrando que se acumula en: hígado 54%, riñón 37,4%, y corazón 35%. De otro lado, los investigadores Hara *et al.* (1996), demostraron que los lípidos oxidados, como el linoleato de etilo oxidado, afectan el metabolismo cecal y pueden estar asociados con el cáncer de colon.

7.2.1.5 Fenol, 2-metil-4-(1,1,3,3-tetrametil-butil)-

También conocido por el nombre IUPAC: 2-metil-4-(2,4,4-trimetilpentan-2-il) fenol. CAS 2219-84-3. Formula molecular: C₁₅H₂₄O, Peso Molecular: 220.35046 g/mol. Código de información del compuesto (CID75206). Coeficiente de partición octanol-agua: XlogP3-AA: 5.3, (NCBI PubChem compound, 2005). Figura 23.

La base de datos (NCBI PubChem compound, 2005), no registra información sobre la toxicidad de este compuesto. Pero, NCBI. PubChem Bioassay (2005), registra 18 bioensayos, de los cuales 16 son bioactivos, todos ellos corresponden a ensayos de diversos compuestos tóxicos, incluido éste, en la inhibición del crecimiento de cepas de levadura con alteraciones genéticas definidas, se ensaya la actividad potencial anti-cáncer. La concentración de inhibición del Fenol, 2-metil-4-(1,1,3,3-tetrametil-butil)- está en el orden de los micromoles - [μM]. La base de datos MSDS, registra ficha de seguridad de este compuesto (Tabla 24). Anexo 3.

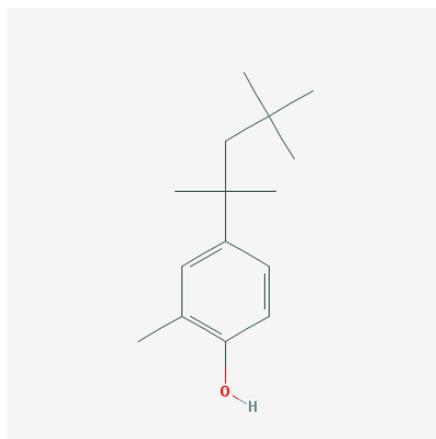


Figura 23. Imagen 2D del compuesto Fenol, 2-metil-4-(1,1,3,3-tetrametil-butil)-
Fuente: <http://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/summary/summary.cgi?cid=75206#itabs-2d>

7.2.1.6 N-nonacosano

También conocido por el nombre IUPAC: n-nonacosano. CAS 630-03-5. Formula molecular: $\text{C}_{29}\text{H}_{60}$, Peso Molecular: 408.7867 g/mol. Código de información del compuesto (CID12409). Coeficiente de partición octanol-agua: XlogP3-AA: 15.3, (NCBI.PubChem compound, 2004). Figura 24.

La base de datos TOXNET, registra información de artículos donde se evidencia la toxicidad, y bioacumulación del N-nonacosano, en sedimentos, organismos acuáticos, terrestres y el hombre. Los cuales se discuten a continuación.

Los investigadores Brack *et al.* (1999), realizaron bioensayo dirigido a la identificación de sustancias tóxicas en un extracto de acetona de un sedimento de aguas residuales de la región industrial de Bitterfeld (Alemania). Para este propósito, se aplicó, análisis químico, y una batería de ensayos biológicos incluyendo *Vibrio fischeri* (inhibición de la bioluminiscencia), *Daphnia magna* (inmovilización), y *Scenedesmus vacuolatus* (inhibición de la multiplicación celular). Las principales sustancias tóxicas identificadas y confirmadas eran potencialmente perjudiciales para los organismos acuáticos. En el mismo sentido,

Hyland *et al.* (1999), trabajaron en análisis del riesgo para las comunidades bentónicas, de 231 estaciones submareales en el sureste de los estuarios de Estados Unidos. Encontraron que 73 a 78% de las estaciones tenían ensamblajes bentónicos degradados, con una alta probabilidad de mortalidad en pruebas a corto plazo de toxicidad en laboratorio usando anfípodos.



Figura 24. Imagen 2D del compuesto N-nonacosano

Fuente: http://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/summary/summary.cgi?cid=12409&loc=ec_rcs#itabs-2d

En hígado de ganado que murió de rara enfermedad, hace 50 años. Se analizaron actualmente, extractos purificados almacenados de estos hígados por cromatografía de gases y espectrometría de masas. Encontrando cantidades aproximadamente iguales de nonacosano y hentriacontano con una pequeña mezcla de alcanos de cadena larga de carbono tritriacontano, entre otros. Sobre la base de los hallazgos histológicos, se han registrado cinco casos adicionales de "hígado parafina" en las vacas. Halse *et al.* (1993).

En humanos, Rocchiccioli *et al.* (1987), reportaron caso de enfermedad de almacenamiento de n-nonacosano, que fue diagnosticada hasta la muerte de un agricultor de 55 años de edad. Se discuten las características clínicas, histológicas y bioquímicas del almacenamiento de n-nonacosano, identificado por análisis de cromatografía de gases acoplado a masas de diferentes extractos de tejidos, la concentración de n-nonacosano de 1.2 mg g⁻¹ de tejido pulmonar y 0,32 mg g⁻¹ de tejido hepático. Se pudo descartar una intoxicación inducida por el trabajo, y el almacenamiento de n-nonacosano parecía estar representado por un permanente, consumo excesivo de manzanas sin pelar y las coles de Bruselas.

En el mismo sentido, se registra un nuevo trastorno humano, que se caracteriza por la acumulación de compuestos de cadena larga n-alcanos, en las vísceras de un paciente humano.

Análisis de lípidos de los tejidos de un varón adulto después de muerte súbita, afectado con granuloma visceral difuso que contiene material cristalizado lipófilo, mostró la presencia de compuestos anormales, identificados como de cadena larga n-alcanos con 29 (n-nonacosano), 31 (n-hentriacontane) y 33 carbonos (n-tritriacontane). Estudio de la distribución de n-alcanos en los tejidos del paciente mostró una acumulación importante en los ganglios linfáticos lumbo-aórticas, las glándulas suprarrenales, los pulmones (los niveles más altos se encontraron en los granulomas pulmonares) y en el hígado, se detectaron cantidades significativamente menores en el miocardio y el riñón, mientras que no se encontró nivel detectable en el cerebro. Salvayre *et al.* (1988). La base de datos MSDS, registra ficha de seguridad de este compuesto (Tabla 25). Anexo 3.

7.2.1.7 Androsta-5,14-dien-17-ona, 3-hidroxi-

También conocido por el nombre IUPAC: (3S,10R,13S)-3-hidroxi-10,13-dimetil-1,2,3,4,7,8,9,11,12,16-decahidrociclopenta[a]fenantreno-17-ona. CAS 34635-41-1. Formula molecular: $C_{19}H_{26}O_2$, Peso Molecular: 286.40854 g/mol. Código de información del compuesto (CID57349103). Coeficiente de partición octanol-agua: XlogP3-AA: 2.6. No registra información de bioensayos, ni toxicidad (NCBI PubChem compound, 2012). Figura 25. La base de datos MSDS, no reporta la ficha de seguridad.

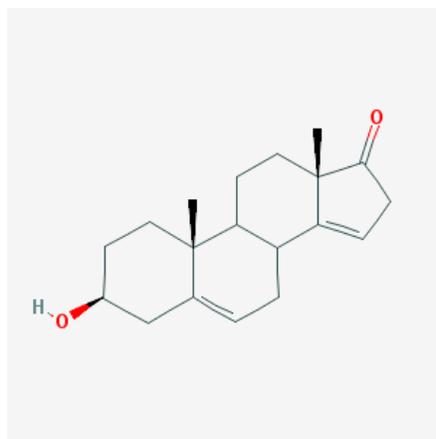


Figura 25. Imagen 2D del compuesto Androsta-5,14-dien-17-ona, 3-hidroxi-

Fuente: http://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/summary/summary.cgi?cid=57349103&loc=ec_rcs#itabs-2d

7.2.1.8 4a-formil-7alpha-hidroxi-1-metil-8-metilideno-4aalpha, 4bbeta-gibbane-1 alfa, ácido 10beta-dicarboxílico

No registra nombre IUPAC. Formula molecular: $C_{20}H_{26}O_6$, Peso Molecular: 362.41684 g/mol. Código de información del compuesto (CID5460209). Coeficiente de partición octanol-agua: XlogP3-AA: 0.7. No registra información de bioensayos, ni toxicidad (NCBI PubChem compound, 2004). Figura 26. La base de datos MSDS, no reporta hoja de seguridad del compuesto.

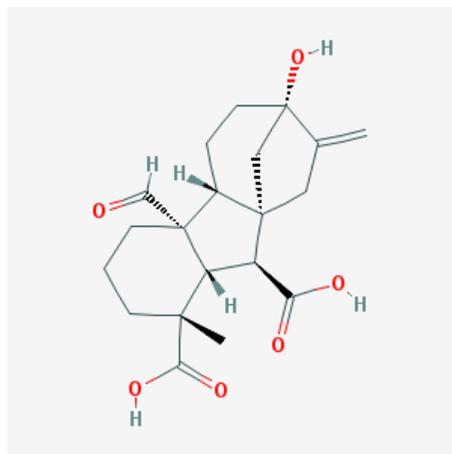


Figura 26. Imagen 2D del compuesto 4a-formil-7alpha-hidroxi-1-metil-8-metilideno-4aalfa, 4bbeta-gibbane-1 alfa, ácido 10beta-dicarboxílico

Fuente: http://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/summary/summary.cgi?cid=5460209&loc=ec_rcs#itabs-2d

7.2.1.9 Ácido palústrico

También Conocido por el nombre IUPAC: 1,4-dimetil-7-propano, 3,4,5,6,9,10,10 ácido α -octahidrofenantreno-1-carboxílico. CAS 1945-53-5. Formula molecular: $C_{20}H_{30}O_2$, Peso Molecular: 302.451 g/mol. Código de información del compuesto (CID16040). Coeficiente de partición octanol-agua: XlogP3-AA: 4.5. Registra información de dos bioensayos, ambos inactivos, no tiene información sobre toxicidad (NCBI PubChem compound, 2005). Figura 27. La base de datos MSDS, reporta ficha de seguridad de este compuesto (Tabla 26). Anexo 3.

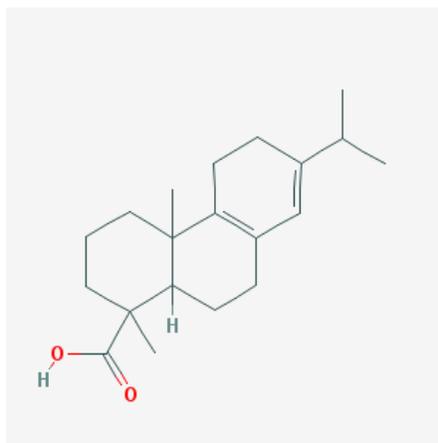


Figura 27. Imagen 2D del compuesto Ácido palústrico

Fuente: http://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/summary/summary.cgi?cid=16040&loc=ec_rcs#itabs-2d

7.2.1.10 Octadecano, 3-etil-5-(2-etilbutilo) -

También Conocido por el nombre IUPAC: 3-etil-5-(2-etilbutilo) octadecano. CAS 55282-12-7. Formula molecular: $C_{26}H_{54}$, Peso Molecular: 366.70696 g/mol. Código de información del compuesto (CID292285). Coeficiente de partición octanol-agua: XlogP3-AA: 13.4. No registra información de bioactividad, ni sobre toxicidad (NCBI. PubChem compound, 2005). Figura 28. La base de datos MSDS, no reporta la ficha de seguridad del compuesto.

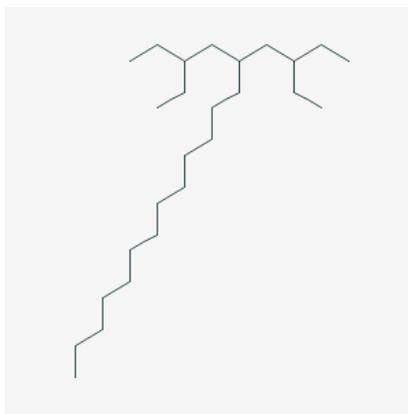


Figura 28. Imagen 2D del compuesto Octadecano, 3-etil-5-(2-etilbutilo) -

Fuente: <http://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/summary/summary.cgi?cid=292285#itabs-2d>

7.2.1.11 Etil-iso allocholate

Este compuesto se identificó también en las estaciones 1 y 4. Se registra en las páginas: 58 y 97.

7.2.1.12 Butil Ricinoleate

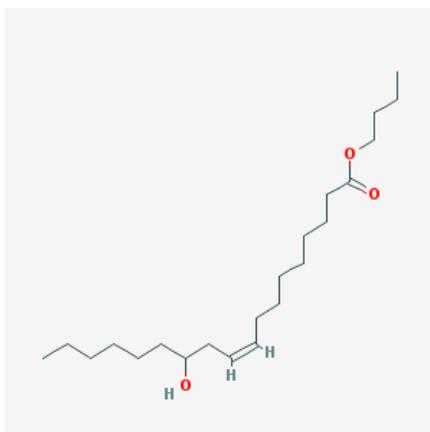


Figura 29. Estructura molecular de Butil Ricinoleate en 2D. Fuente: http://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/summary/summary.cgi?cid=5364552&loc=ec_rcs#itabs-2d

También conocido por el nombre IUPAC: butilo (Z)-12-hidroxiocetadec-9-enoato. CAS 151-13-3. Formula molecular: $C_{22}H_{42}O_3$, Peso Molecular: 354.56708 g/mol. Código de información del compuesto (CID5364552). Coeficiente de partición octanol-agua: XlogP3-AA: 7.3. No registra información de bioactividad, ni de toxicidad (NCBI. PubChem compound, 2005). Figura 29. La base de datos MSDS, reporta ficha de seguridad de este compuesto (Tabla 27). Anexo 3.

7.2.1.13 1-Heptatriacotanol

También conocido por el nombre IUPAC: heptatriacontan-1-ol. CAS 105794-58-9. Formula molecular: $C_{37}H_{76}O$, Peso Molecular: 536.99874 g/mol. Código de información del compuesto (CID537071). Coeficiente de partición octanol-agua: XlogP3-AA: 18.7. No registra información de bioactividad, ni de toxicidad (NCBI. PubChem compound, 2005). Figura 30. La base de datos MSDS no reporta hoja de seguridad del compuesto.



Figura 30. Estructura molecular de 1-Heptatriacotanol en 2D.

Fuente: <http://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/summary/summary.cgi?cid=537071>

7.2.1.14 Ciclohexanona, 2-ciclohexilideno-

También Conocido por el nombre IUPAC: 1,1'-bi (ciclohexilideno)-2-ona. CAS 1011-12-7. Formula molecular: $C_{12}H_{18}O$, Peso Molecular: 178.27072 g/mol. Código de información del compuesto (CID13892). Coeficiente de partición octanol-agua: XlogP3-AA: 2.9. No registra información de bioactividad, ni de toxicidad (NCBI. PubChem compound, 2005). Figura 31. La base de datos MSDS, no registra hoja de seguridad del compuesto.

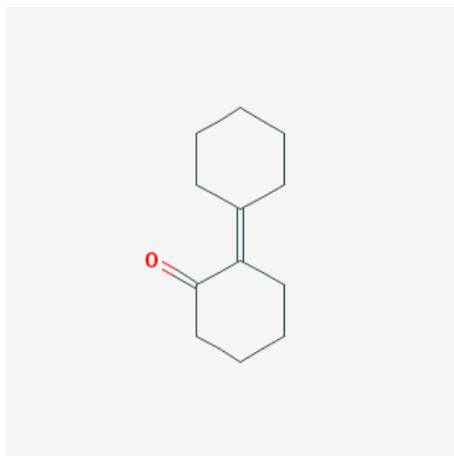


Figura 31. Estructura molecular de Ciclohexanona, 2-ciclohexilideno- en 2D. Fuente: http://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/summary/summary.cgi?cid=13892&loc=ec_rcs

7.2.1.15 4-hexil-1-(7-metoxicarbonilheptil) biciclo [4.4.0] deca-2 ,5,7-trieno-

También conocido por el nombre IUPAC: metilo 8-(2-hexil-5-naftalen ,6-dihidro-2H-4a-il) octanoato. Formula molecular: $C_{25}H_{40}O_2$, Peso Molecular: 372.5839 g/mol. Código de información del compuesto (CID562334). Coeficiente de partición octanol-agua: XlogP3-AA: 8.8. No registra información de bioactividad, ni de toxicidad, (NCBI. PubChem compound, 2005). Figura 32. La base de datos MSDS, no registra hoja de seguridad del compuesto.

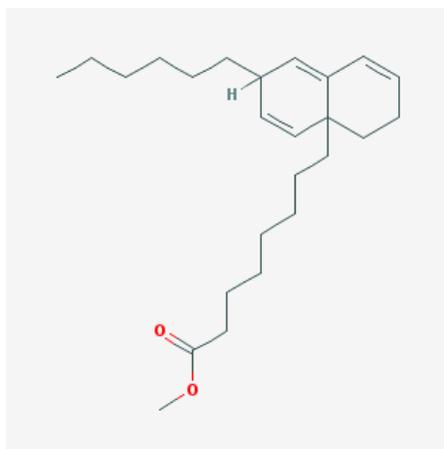


Figura 32. Estructura molecular de 4-Hexyl-1-(7-metoxicarbonilheptil)-biciclo[4.4.0]deca- - en 2D.

Fuente: <http://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/summary/summary.cgi?cid=562334>

7.2.1.16 **Ácido Ciclopropanobutanoico, 2 - [[2 - [[2 - [(2-pentilciclopropil) metil] ciclopropil] metil] ciclopropil] metil] -, éster metílico.**

También Conocido por el nombre IUPAC: metilo 4-[2-[[2-[[2-[(2-pentilciclopropil)metil]ciclopropil]metil]ciclopropil]metil]ciclopropil]butanoato.

Formula molecular: C₂₅H₄₂O₂, Peso Molecular: 374.59978 g/mol. Código de información del compuesto (CID554084). Coeficiente de partición octanol-agua: XlogP3-AA: 8.6. No registra información de bioactividad, ni sobre toxicidad (NCBI PubChem compound, 2005). Figura 33. La base de datos MSDS, no reporta hoja de seguridad.



Figura 33. Estructura molecular en 2D de: Ciclopropanobutanoico acid, 2-[[2-[[2-[(2-pentilciclopropil)metil]ciclopropil]metil]ciclopropil]metil]-metil ester.

Fuente: <http://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/summary/summary.cgi?cid=554084>

7.2.2. EVALUACIÓN DEL RIESGO POR COMPUESTOS ORGÁNICOS EN LA (DESEMBOCADURA CANAL INTERCEPTOR CVC - SUR)

7.2.2.1. Evaluación del riesgo de acuerdo a las fichas de seguridad – MSDS, y la información del Sistema Globalmente Armonizado de Clasificación y Etiquetado de Productos Químicos – SGA.

La evaluación del riesgo por compuestos orgánicos en la Estación 2 (Desembocadura Canal Interceptor CVC - Sur), se realizó de acuerdo a la información registrada en las fichas de seguridad MSDS, disponible para algunos de los compuestos. También se usó la información del Sistema Globalmente Armonizado de Clasificación y Etiquetado de Productos Químicos – SGA.

La evaluación de los compuestos encontrados en la E-2 (Desembocadura Canal Interceptor CVC - Sur), se realizó mediante construcción de cinco grupos (Tabla 28), el primero representado por los compuestos: i) 4 - (1,1,3,3-tetrametil-butil) fenol, compuesto que registra toxicidad acuática aguda y crónica (Categoría 1). Puede formarse como un producto de degradación de los tensoactivos de

alquilfenol en las aguas residuales, posee baja movilidad en el suelo, y en sedimentos, dado que su valor del Factor de Bioconcentración – BCF, es estimado en 6000, se espera que este compuesto se bioacumule en los organismos acuáticos. (TOXNET Home-HSDB, November 2012). También es reconocido disruptor endocrino, por lo anterior, puede acelerar la proliferación de células de cáncer en los organismos que entren en contacto con este compuesto. ii) Ácido palústrico, la MSDS informa sobre toxicidad para rainbow trout: 96 hr, LC 50: 0.5 - 0.6 mg/L.

Tabla 28. Evaluación del riesgo por categoría de toxicidad por compuestos orgánicos en la Estación 2.

Toxicidad categoría 1	Toxicidad categoría 3	Toxicidad categoría 4	Toxicidad categoría 5	No peligroso
4 - (1,1,3,3-tetrametil-butil) fenol	Fenol, 2-metil-4-(1,1,3,3-tetrametil-butil)-	1,4-dimetil-7-isopropilazuleno	Ácido ursodeoxicólico	Éster etílico del ácido linoleico
Ácido palústrico				N-nonacosano
				Butil Ricinoleate

El segundo, corresponde al Fenol, 2-metil-4-(1,1,3,3-tetrametil-butil)-. De acuerdo a la ficha de seguridad MSDS de SIGMA-ALDRICH, (2012), presenta toxicidad acuática crónica (Categoría 4), y exposición única (Categoría 3). La base de datos (NCBI. PubChem Bioassay 2005), no registra información toxicológica de este compuesto.

El tercero, 1,4-dimetil-7-isopropilazuleno, es registrado como compuesto que produce toxicidad aguda, Oral (Categoría 4). Es ampliamente utilizado como un ingrediente natural en muchos productos de cuidado de la salud y soluciones. Aunque se ha informado de que tienen efectos biológicos, dado que, GA y azuleno han demostrado ser citotóxicos frente a las células humanas normales y células tumorales humanas, por otra parte, guaiazuleno ha demostrado propiedades fotomutagénicos en cepas bacterianas. (Fiori *et al.*, 2011)

El cuarto, Ácido ursodeoxicólico, está registrado como compuesto que produce toxicidad aguda, Oral (Categoría 5). Los investigadores Watabe & Bernstein (1985), encontraron respuesta positiva al test de Ames con TA98, sin activador enzimático. De otro lado, Trauner & Graziadei (1999), confirman que el ácido ursodeoxicólico (ursodiol) es un ácido biliar hidrofílico no tóxico utilizado para el tratamiento de trastornos del hígado predominantemente colestásica. Una mejor comprensión de los mecanismos celulares y moleculares de la acción del ácido ursodesoxicólico ha ayudado a dilucidar sus efectos como: citoprotector, anti-apoptóticos, inmunomoduladora y colerético. En el mismo sentido, NCBI. PubChem BioAssay (2001), destaca dos trabajos que evalúan la citotoxicidad en células humanas, de esta sustancia y sustancias con características similares en cuanto a la protección contra el cáncer.

El quinto grupo, formado por tres sustancias calificadas como no peligrosas: i) Butil Ricinoleate; ii) N-nonacosano; iii) Éster etílico del ácido linoleico. Tabla 28.

7.2.2.2 Evaluación del riesgo por bio-acumulación, y el potencial de bio-concentración de acuerdo al valor del coeficiente de partición octanol-agua $Kow = XlogP3:AA$.

La evaluación del riesgo por bio-acumulación se realizó de acuerdo a los criterios establecidos por la base de datos bvsde.paho.org., la cual determina cinco criterios de calificación (alta, media alta, media, media baja, y baja), y el potencial de bio-acumulación de acuerdo la información de (NACIONES UNIDAS, 2011), con relación al valor del coeficiente de partición octanol-agua Kow, reportado para cada sustancia en la base de datos NCBI Pubchemcompound.

Tabla 29. Evaluación del riesgo por bio- acumulación y el potencial de bio-concentración por compuestos orgánicos en la Estación 2.

Nombre del compuesto	XlogP3-AA	Riesgo por Bio-acumulación en la fauna acuática	Escala colorimétrica del riesgo	Riesgo por Potencial de bio-concentración	Escala colorimétrica del riesgo
1-Heptatriacotanol IUPAC: heptatriacontan-1-ol	18.7	Alta		Con Potencial de bio-concentración	
N-nonacosano IUPAC: n-nonacosano	15.3	Alta			
Octadecano, 3-etil-5-(2-etilbutilo) - IUPAC: 3-etil-5-(2-etilbutilo) octadecano	13.4	Alta			
4-hexil-1-(7-metoxycarbonilheptil) biciclo [4.4.0] deca-2 ,5,7-trieno IUPAC: metilo 8-(2-hexil-5-naftalen ,6-dihidro-2H-4a-il) octanoato	8.8	Alta			
Ácido Ciclopropanobutanoico, 2 - [[2 - [[2 - [[(2-pentilciclopropil) metil] ciclopropil] metil] ciclopropil] metil] - , éster metílico IUPAC: metilo 4-[2-[[2-[[2-(2-pentilciclopropil)metil]ciclopropil]metil]ciclopropil]metil]ciclopropil]butanoato	8.6	Alta			
Éster etílico del ácido linoleico IUPAC: ethyl linoleate	7.3	Alta			
Butil Ricinoleate IUPAC: butilo (Z)-12-hidroxi octadec-9-enoato	7.3	Alta			
Fenol, 2-metil-4-(1,1,3,3-tetrametil-butil)- IUPAC: 2-metil-4-(2,4,4-trimetilpentan-2-il) fenol	5.3	Alta			
4 - (1,1,3,3-tetrametil-butil) fenol IUPAC: 4-(2,4,4-trimetilpentan-2-il)fenol	5.0	Media-alta			
Ácido ursodeoxicólico IUPAC: Ácido Pentanoico (4R)-4-[(3R,5S,7S,8R,9S,10S,13R,14S,17R)-3,7-dihidroxi-10,13-dimetil-2,3,4,5,6,7,8,-9,11,12,14,15,16,17-tetradecahidro-1H-ciclo-penta[a]fenanthren-17-ilo]	4.9	Media-alta			
1,4-dimetil-7-isopropilazuleno IUPAC: 1,4-dimetil-7-propan-2-ilazuleno	4.8	Media-alta			
Ácido palústrico IUPAC: 1,4-2-il-2 A-dimetil-7-propan, 3,4,5,6,9,10,10 ácido a-octahidrofenantreno-1-carboxílico	4.5	Media-alta			
Etil-iso allocholate IUPAC: acetato 4-(3,7,12-trihidroxi-10,13-dimetil-2,3,4,5,6,7,8,9,11,12,14,15,16,17-tetradecahidro-1H-ciclo-penta[a]fenantren-17-il)pentanoate	4.3	Media-alta			
Ciclohexanona, 2-ciclohexilideno- IUPAC: 1,1'-bi (ciclohexiliden)-2-ona	2.9	Media- baja		Sin Potencial de bio-concentración	
Androsta-5 ,14-dien-17-ona, 3-hidroxi- IUPAC: (3S,10R,13S)-3-hidroxi-10,13-dimetil-1,2,3,4,7,8,9,11,12,16-decahidrociclo-penta[a]fenantreno-17-ona	2.6	Media- baja			
4a-formil-7alpha-hidroxi-1-metil-8-metilideno-4aalpha, 4bbeta-gibbane-1 alfa, ácido 10beta-dicarboxílico IUPAC: No registra	0.7	Baja			

La evaluación del riesgo de los compuestos encontrados en la E2 (Desembocadura Canal Interceptor CVC - Sur), se ajustó a las categorías: (i) alta, para ocho compuestos en el rango de 5.3 a 18.7; lo anterior correspondió al 50,0%; (ii) media-alta, para cinco compuesto en el rango de 4.3 a 5.0; correspondiente al 31.25%; (iii) media-baja, dos compuestos en el rango 2.6 a 2.9; con una contribución de 12.5%; (iv) baja, un compuesto con 0.7, lo que corresponde al 6.25%; el potencial de bioconcentración correspondió al 81.25% de los compuestos. Tabla 29. La bioacumulación de estas sustancias es directamente proporcional al riesgo.

7.3. ESTACIÓN BOCATOMA DE LA PLANTA DE POTABILIZACIÓN – PUERTO MALLARINO, E3.

La planta de potabilización Puerto Mallarino cuenta con una capacidad nominal de 6,6 m³/s, se encuentra ubicada al nororiente de la ciudad de Cali, en el barrio Andrés Sanín, y es la encargada de suplir aproximadamente el 60% de la demanda de agua potable de la ciudad. Pertenece a la zona conocida como "la Red Baja" la cual tiene como fuente de abastecimiento al Río Cauca.

Esta planta fue diseñada y construida como un sistema de unidades de ciclo completo para el tratamiento del agua. El orden de los procesos y operaciones unitarias que conforman la planta son: captación, desarenación, aplicación de carbón activado, precloración, coagulación, floculación, sedimentación y filtración, además de la postcloración y de la estabilización química con cal. (EMCALI, 2013). (Figura 34).

En esta estación se identificaron por cromatografía de gases acoplado a masas del Laboratorio de Medicina Legal y Ciencias Forenses de Cali, las siguientes sustancias: Butilhidroxitolueno- BHT; Ftalato de di-n-butilo; Forbol; 1,3-benzodioxol, 5 - [1 - [2 - (2-butoxi) etoxi] butil] -; Éster etílico del ácido palmítico; Alcohol salicílico; 2-[4-metil-6-(2,6,6-trimetilciclohex-1-enil) hexa-1 ,3,5-trienil] ciclohex-1-en-1-carboxaldehído; 7,8-Epoxilano-11-ol, 3-acetoxi-; 7-isopropil-1-metil-1, 2,3,4,4 a, 9,10,10 a-octahidrofenantreno; Phen-1 ,4-diol, 2,3-dimetil-5-trifluorometil-2,3-dimetil-5-(trifluorometil) benceno-1 ,4-diol; L-lisina, N6-[(1,1-dimetil-etoxi) carbonil]-N2-[(9H-fluoren-9-ilmetoxi) carbonil] -; Fenilalanina, ácido 4-amino-Nt-butiloxicarbonil-, éster t-butilo.



Figura 34. Área de la estación de muestreo E3, Planta de Potabilización – Puerto Mallarino

7.3.1 ANÁLISIS DEL RIESGO POR COMPUESTOS ORGÁNICOS HALLADOS EN LA ESTACIÓN 3 (PLANTA DE POTABILIZACIÓN – PUERTO MALLARINO).

7.3.1.1 Butilhidroxitolueno- BHT.

Este compuesto se identificó también en la estación 1. Se registra en la página 50; y en el Anexo 2, Tabla 12.

7.3.1.2 Ftalato de di-n-butilo.

Este compuesto se identificó también en la estación 1. Se registra en la página 56; y en el Anexo 2, Tabla 16.

7.3.1.3 Forbol

Este compuesto se identificó también en la estación 1. Se registra en la página 58.

7.3.1.4 1,3-benzodioxol, 5 - [1 - [2 - (2-butoxi etoxi) etoxi] butil] -.

También conocido por el nombre UIPAC: 5 - [1 - [2 - (2-butoxi etoxi) etoxi] butil] - 1,3-benzodioxol. CAS 23473-61-2. Formula Molecular: $C_{19}H_{30}O_5$. Peso Molecular: 338.4385 g/mol. Tiene coeficiente de partición XLogP3-AA: 3.6. Código de identificación del compuesto (CID542303). No reporta bioensayos (NCBI PuChemcompound, 2005). Figura 35. La base de datos MSDS, no reporta hoja de seguridad del compuesto.

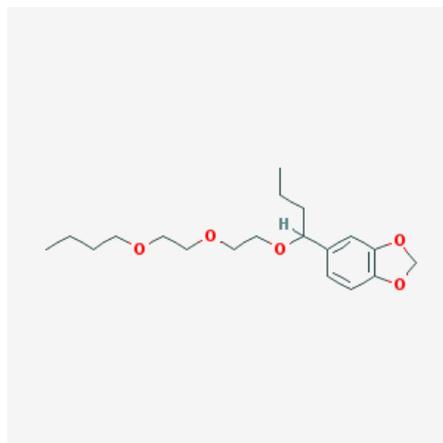


Figura 35. Estructura molecular de 1,3-benzodioxol, 5 - [1 - [2 - (2-butoxyethoxy)ethoxy]butyl] - en 2D.

Fuente: <http://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/summary/summary.cgi?cid=542303#itabs-2d>

7.3.1.5 Éster etílico del ácido palmítico.

También conocido por el nombre UIPAC: Éster etílico del ácido palmítico. CAS 628-97-7. Formula Molecular: $C_{18}H_{36}O_2$. Peso Molecular: 284.47724 g/mol. Tiene coeficiente de partición XLogP3-AA: 7.8. Código de identificación del compuesto (CID12366). Se reportan 9 bioensayos, todos activos (NCBI PuChemcompound, 2005). Figura 36.

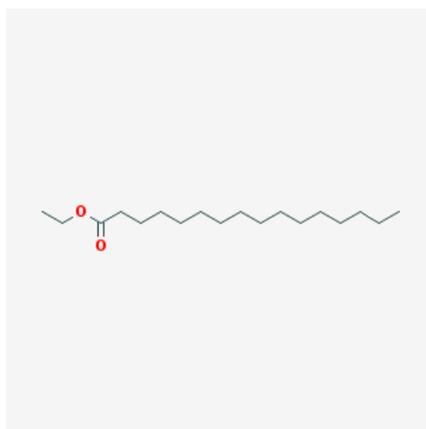


Figura 36. Estructura molecular de Éster etílico del ácido palmítico en 2D. Fuente: <http://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/summary/summary.cgi?cid=12366#itabs-2d>

El Palmitato de metilo (MP) y palmitato de etilo (EP) son ésteres de ácidos grasos de origen natural reportados como inhibidores de células inflamatorias. En este sentido, los investigadores Saeed *et al.* (2012) demostraron la eficacia de MP y EP en la lucha contra la inflamación en varios modelos experimentales. También se demostró efecto hepatoprotector (Lu *et al.*, 2012). De la base de datos MSDS, se

obtuvo la ficha de seguridad del producto Éster etílico del ácido palmítico (Tabla 30). Anexo 4.

7.3.1.6 Alcohol salicílico

También conocido por el nombre UIPAC: 2 - (hidroximetil) fenol. CAS 90-01-7. Formula Molecular: $C_7H_8O_2$. Peso Molecular: 124.13722 g/mol. Tiene coeficiente de partición XLogP3-AA: 0.7. Código de identificación del compuesto (CID5146). Se reportan 227 bioensayos, todos inactivos (NCBI PuChemcompound, 2004). Figura 37.

El Alcohol salicílico, es conocido por sus propiedades anti-inflamatorias y por su contribución a la mejoría de los trastornos neuro-siquiátricos tales como la depresión, en asocio con la administración de otras drogas (Ulrich-Merzenich *et al.*, 2012), igualmente se ha estudiado su efecto inhibitor de la polimerasa del virus de la poliomielitis (Campagnola *et al.*, 2011), es igualmente efectivo su uso asociado a otros medicamentos contra la malaria (Yuan *et al.*, 2011), es también conocido por sus efectos antioxidantes (Dhiman *et al.*, 2009). De la base de datos MSDS, se obtuvo la ficha de seguridad del producto Alcohol salicílico (Tabla 31). Anexo 4.

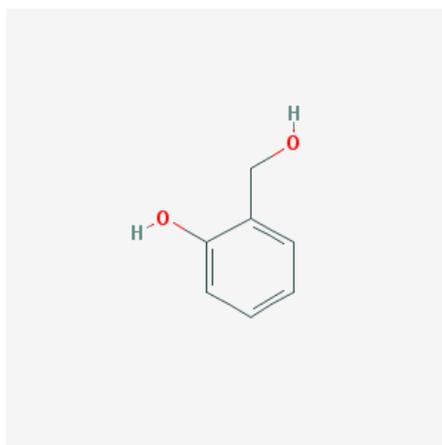


Figura 37. Estructura molecular de Alcohol salicílico en 2D. Fuente: http://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/summary/summary.cgi?cid=5146&loc=ec_rcs#itabs-3d

7.3.1.7 2-[4-metil-6-(2,6,6-trimetilciclohex-1-enil) hexa-1 ,3,5-trienil] ciclohex-1-en-1-carboxaldehído

También conocido por el nombre UIPAC: 2-[(1E,3E,5E)-4-metil-6-(2,6,6-trimetilciclohexen-1-il)hexa-1,3,5-trienil]ciclohexene-1-carbaldehído. Código de identificación (CID5363101). Formula Molecular: $C_{23}H_{32}O$. Peso Molecular: 324.49958 g/mol. Tiene coeficiente de partición XLogP3-AA: 6.3. No registra bioensayos (NCBI PuChemcompound, 2005). Figura 38. La base de datos MSDS, no reporta hoja de seguridad del compuesto.

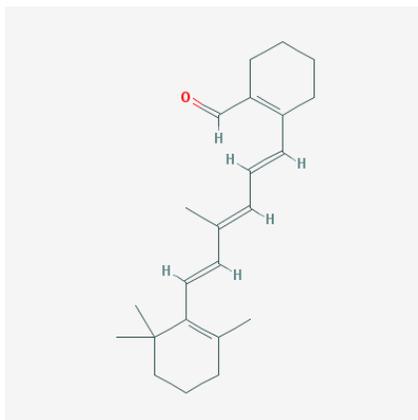


Figura 38. Estructura molecular de 2-[4-metil-6-(2,6,6-trimetilciclohex-1-enil) hexa-1,3,5-trienil]ciclohex-1-en-1-carboxaldehído-trienyl]ciclohex-1-en-1-carboxaldehyde, en 2D. Fuente:

<http://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/summary/summary.cgi?cid=5363101#itabs-2d>

7.3.1.8 7,8-Epoxilanostan-11-ol, 3-acetoxi-

No registra nombre IUPAC, Formula Molecular: $C_{32}H_{54}O_4$. Peso Molecular: 502.76876 g/mol. Tiene coeficiente de partición XLogP3-AA: 8.2. Código de información del compuesto (CID541562). No registra datos de toxicidad, ni de bioensayos (NCBI PuChemcompound, 2005). Figura 39. La base de datos MSDS, no reporta hoja de seguridad del compuesto.

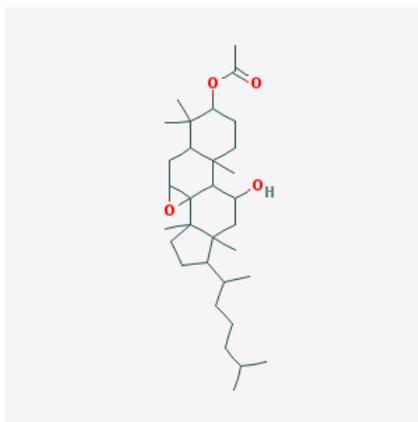


Figura 39. Estructura molecular de 7,8-Epoxilanostan-11-ol, 3-acetoxi-en 2D.

Fuente: <http://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/summary/summary.cgi?cid=541562#itabs-2d>

7.3.1.9 7-isopropil-1-metil-1, 2,3,4,4 a, 9,10,10 a-octahidrofenantreno

También conocido por el nombre UIPAC: 1-metil-7-propan-2-il-1, 2,3,4,4 a, 9,10,10 a-octahidrofenantreno. Código de identificación del compuesto (CID614842). Formula Molecular: $C_{18}H_{26}$. Peso Molecular: 242.39904 g/mol. Coeficiente de partición XLogP3-AA: 6.1. No registra datos de bioensayos, ni de toxicidad, (NCBI PuChem compound, 2005). Figura 40. La base de datos MSDS, no reporta hoja de seguridad del compuesto.

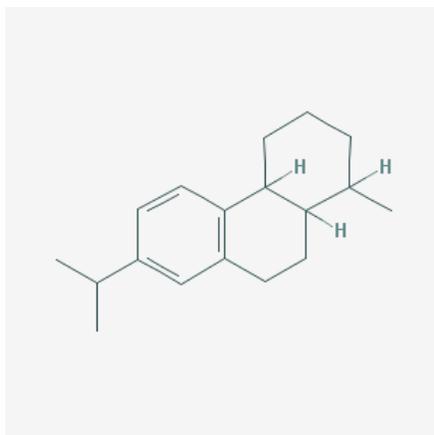


Figura 40. Estructura molecular de 7-isopropil-1-metil-1, 2,3,4,4 a, 9,10,10 a-octahidrofenantreno en 2D.
Fuente: <http://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/summary/summary.cgi?cid=614842#itabs-2d>

7.3.1.10 Phen-1 ,4-diol, 2,3-dimetil-5-trifluorometil-2,3-dimetil-5-(trifluorometil) benceno-1 ,4-diol

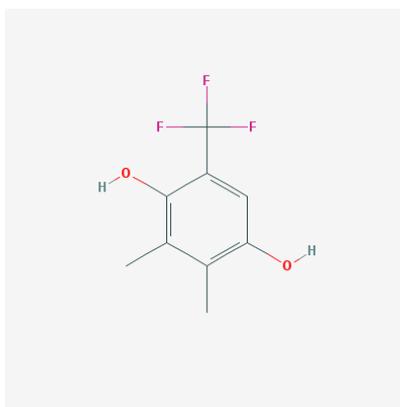


Figura 41. Estructura molecular de Phen-1 ,4-diol, 2,3-dimetil-5-trifluorometil-2,3-dimetil-5-(trifluorometil) benceno-1 ,4-diol en 2D. Fuente: <http://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/summary/summary.cgi?cid=590850#itabs-2d>

También conocido por el nombre UIPAC: 2,3-dimetil-5-(trifluorometil) benceno-1,4-diol. Código de información del compuesto (CID590850). Formula Molecular: $C_9H_9F_3O_2$. Peso Molecular: 206.16177 g/mol. Coeficiente de partición XLogP3-AA: 2.2. No reporta datos de toxicidad, ni de bioensayos (NCBI PuChem compound, 2005). Figura 41. La base de datos MSDS, no reporta hoja de seguridad del compuesto.

7.3.1.11 L-lisina, N6-[(1,1-dimetil-etoxi) carbonil]-N2-[(9H-fluoren-9-ilmetoxi) carbonil] –

También conocido por el nombre UIPAC: (2S) -2 - (9H-fluoren-9-ilmetoxicarbonilamino) -6 - hexanoico [oxicarbonilamino (2-metil-2-il)]. CAS 71989-26-9. Código de identificación del compuesto (CID2724628). Formula Molecular: $C_{26}H_{32}N_2O_6$. Peso Molecular: 468.54208 g/mol. Coeficiente de partición XLogP3-AA: 4.5. (NCBI PuChemcompound, 2005). Figura 42. Este compuesto reporta un bioensayo, el cual es positivo para inhibir la enzima proteasa del VIH en comparación con la aspartil proteasas de mamífero pepsina, renina y la catepsina. Además, estos inhibidores no mostraron ninguna citotoxicidad a una concentración por debajo de 75 microM. (Bouzide *et al.*, 2005). De la base de datos MSDS, se obtuvo la ficha de seguridad del compuesto (Tabla 32). Anexo 4.

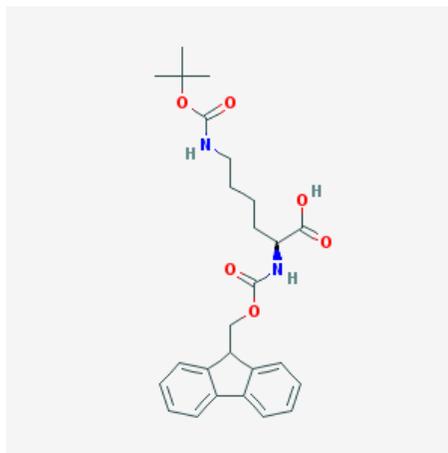


Figura 42. Estructura molecular de L-lisina, N6-[(1,1-dimetil-etoxi) carbonil]-N2-[(9H-fluoren-9-ilmetoxi) carbonil] – en 2D.

Fuente: http://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/summary/summary.cgi?cid=2724628&loc=ec_rcs#itabs-2d

7.3.1.12 Fenilalanina, ácido 4-amino-Nt-butiloxicarbonil-, éster t-butilo

También conocido por el nombre UIPAC: terc-butílico del ácido 3 - (4-aminofenil) - 2 - [(2-metil-2-il) oxicarbonilamino] propanoato. Código de identificación (CID571498). Formula Molecular: $C_{18}H_{28}N_2O_4$. Peso Molecular: 336.42592 g/mol. Coeficiente de partición XLogP3-AA: 2.4. No registra información de bioactividad,

ni toxicidad (NCBI PuChemcompound, 2005). Figura 43. La base de datos MSDS, no reporta hoja de seguridad del compuesto.

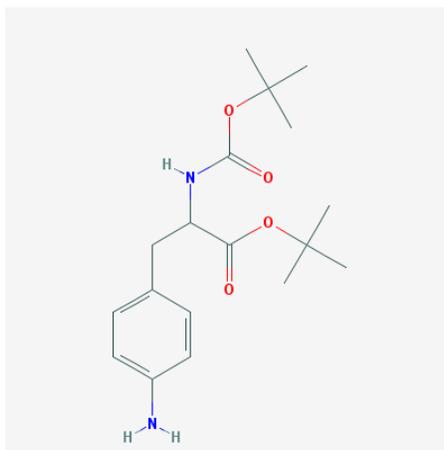


Figura 43. Estructura molecular de Fenilalanina, ácido 4-amino-Nt-butiloxicarbonil-, éster t-butilo en 2D.

Fuente: <http://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/summary/summary.cgi?cid=571498#itabs-2d>

7.3.2 EVALUACIÓN DEL RIESGO POR COMPUESTOS ORGÁNICOS EN LA BOCATOMA DE LA PLANTA DE POTABILIZACIÓN – PUERTO MALLARINO.

7.3.2.1 Evaluación del riesgo de acuerdo a las fichas de seguridad – MSDS, y la información del Sistema Globalmente Armonizado de Clasificación y Etiquetado de Productos Químicos – SGA.

La evaluación del riesgo por compuestos orgánicos en la Estación 3 (Bocatoma de la Planta de Potabilización – Puerto Mallarino), se realizó de acuerdo a la información registrada en las fichas de seguridad MSDS, disponible para algunos de los compuestos. También se usó la información del Sistema Globalmente Armonizado de Clasificación y Etiquetado de Productos Químicos – SGA.

La evaluación de los compuestos encontrados en la E3 (Bocatoma de la Planta de Potabilización – Puerto Mallarino), se realizó mediante construcción de cinco grupos (Tabla 33), el primero representado por el Ftalato de di-n-butilo, compuesto que registra toxicidad para la reproducción (categoría 1B); y toxicidad acuática aguda (Categoría 1). De acuerdo a datos de (TOXNET Home-HSDB, 2013), registra valores de Bioconcentración - BCF experimentales en peces: *Pimephales promelas* de 12, 167 y 172; *Cyprinus carpio* 3.6; bluegill fish 117; en ostras de 22 y 42; en camarones de 1500, 31 y 3; en otros crustáceos, insectos y algas, valores de 662, 624 y 3399 respectivamente.

Tabla 33. Evaluación del riesgo por categorías de toxicidad para compuestos orgánicos en la Estación 3.

Toxicidad Categoría 1	Toxicidad Categoría 2	Toxicidad Categoría 3	No peligroso
Ftalato de di-n-butilo	Butilhidroxitolueno – BHT	Alcohol salicílico	Éster etílico del ácido palmítico
			L-lisina, N6-[(1,1-dimetil-etoxi) carbonil]-N2-[(9H-fluoren-9-ilmetoxi) carbonil] –

El segundo, corresponde al compuesto que registra, toxicidad acuática aguda y crónica (Categoría 2): Butilhidroxitolueno- BHT, registra toxicidad en peces: LC-50 – *Oryzias* sp.– 5,3 mg/l - 48 h, en *Daphnia* y otros invertebrados acuáticos: EC50 – *Daphnia pulex* (Waterflea) - 1.44 mg/l - 48 h. Inai-Kouki *et al.* (1988), registran el BHT, como un compuesto que produce tumores en el hígado del ratón macho B6CC3F1, en el mismo sentido, Chihoung *et al.* (1992), confirmaron que el BHT, es un antioxidante para grasas y aceites, pero no presenta actividad antimutágena, contrariamente aumenta la respuesta del test de Ames, en presencia de activador enzimático.

El tercero, Alcohol salicílico, registra toxicidad específica en determinados órganos - exposición única (Categoría 3), el cuarto, con dos compuestos: Éster etílico del ácido palmítico, y L-lisina, N6-[(1,1-dimetil-etoxi) carbonil]-N2-[(9H-fluoren-9-ilmetoxi) carbonil] –, los cuales son registrados en la categoría sin peligro.

7.3.2.2 Evaluación del riesgo potencial por bio-acumulación, y el potencial de bio-concentración de acuerdo al valor del coeficiente de partición octanol-agua $K_{ow} = X_{logP3:AA}$.

La evaluación del riesgo por bio-acumulación se realizó de acuerdo a los criterios establecidos por la base de datos bvsde.paho.org., la cual determina cinco criterios de calificación (alta, media alta, media, media baja, y baja), y el potencial de bio-concentración de acuerdo la información de (NACIONES UNIDAS, 2011), con relación al valor del coeficiente de partición octanol-agua K_{ow} , reportado para cada sustancia en la base de datos NCBI Pubchemcompound. Tabla 34.

Para la calificación del riesgo de los compuestos encontrados en la (Bocatoma de la Planta de Potabilización – Puerto Mallarino), se ajustó a las categorías i) alta, para cinco compuestos en el rango de 5.3 a 8.2; lo anterior correspondió al 41,7%; (ii) media-alta, para tres compuestos en el rango de 3.6 a 4.7; correspondiente al 25.0%; (iii) media-baja, dos compuestos en el rango 2.2 a 2.4; con una contribución de 16.7%; (iv) baja, dos compuestos en el rango 0.7 a -0.8, lo que corresponde al 16.7%; el potencial de bio-concentración correspondió al 58.4%.

Tabla 34. Evaluación del riesgo potencial por bio- acumulación y el potencial de bio- concentración por compuestos orgánicos en la Estación 3.

Nombre del compuesto	XlogP3-AA	Riesgo por Bio-acumulación en la fauna acuática	Escala colorimétrica del riesgo	Riesgo por Potencial de bio-concentración	Escala colorimétrica del riesgo
7,8-Epoxilano-11-ol, 3-acetoxi- IUPAC: No registra	8.2	Alto		Con Potencial de bio-concentración	
Éster etílico del ácido palmítico IUPAC: Hexadecanoato etílico	7.8	Alto			
2-[4-metil-6-(2,6,6-trimetilciclohex-1-enil) hexa-1 ,3,5-trienil] ciclohex-1-en-1-carboxaldehído IUPAC: 2-[(1E,3E,5E)-4-metil-6-(2,6,6-trimetilciclohexen-1-il)hexa-1,3,5-trienil]ciclohexeno-1-carbaldehído	6.3	Alto			
7-isopropil-1-metil-1, 2,3,4,4 a, 9,10,10 a-octahidrofenantreno IUPAC: 1-metil-7-propan-2-il-1, 2,3,4,4 a, 9,10,10 a-octahidrofenantreno	6.1	Alto			
Butilhidroxitolueno- BHT IUPAC: 2,6-di-ter-butil-4-metilfenol	5.3	Alto			
Ftalato de di-n-butilo IUPAC: Dibutilo benceno-1 ,2-dicarboxilato	4.7	Media-alta			
L-lisina, N6-[(1,1-dimetil-etoxi) carbonil]-N2-[(9H-fluoren-9-ilmetoxi) carbonil] – IUPAC: (2S) -2 - (9H-fluoren-9-ilmetoxicarbonilamino) -6 - hexanoico [oxicarbonilamino (2-metil-2-il)]	4.5	Media-alta		Sin Potencial de bio-concentración	
1,3-benzodioxol, 5 - [1 - [2 - (2-butoxi) etoxi] butil] - IUPAC: 5 - [1 - [2 - (2-butoxi) etoxi] butil] -1,3-benzodioxol	3.6	Media-alta			
Fenilalanina, ácido 4-amino-Nt-butiloxicarbonil-, éster t-butilo IUPAC: Terc-butílico del ácido 3 - (4-aminofenil) -2 - [(2-metil-2-il) oxicarbonilamino] propanoato	2.4	Media-baja			
Phen-1 ,4-diol, 2,3-dimetil-5-trifluorometil-2,3-dimetil-5-(trifluorometil) benceno-1 ,4-diol IUPAC: 2,3-dimetil-5-(trifluorometil) benceno-1 ,4-diol	2.2	Media-baja			
Alcohol salicílico IUPAC: 2 - (hidroximetil) fenol	0.7	Baja			
Forbol IUPAC: No registra	-0.8	Baja			

7.4. ESTACIÓN PUENTE DE JUANCHITO, E4.

Juanchito es un corregimiento del municipio de Candelaria, departamento del Valle del Cauca, ubicado sobre la margen derecha del Río Cauca, en límites con los municipios de Cali y Palmira. Durante el auge de la navegación a vapor sobre el Río Cauca (1887-1930), Juanchito junto a Puerto Mallarino se convirtieron en el primer puerto sobre este río, siendo el sitio de llegada y partida de la mayoría de los barcos. (Malecón Juanchito, 2011).

El Puente Carlos Holguín, más conocido como Puente de Juanchito, fue construido en 1922 y reforzado en 1957, cuando se detectaron signos de desgaste en su estructura. (El Pueblo, 2012). A la fecha se tiene planeado por la Gobernación del Valle del Cauca y el Ministerio de Transporte, su reparación y la construcción de un nuevo puente en el año 2014, debido a su deterioro, y al riesgo inminente que éste representa. (Figura 44).

Las aguas residuales de la Comuna son vertidas al Río Cauca a través de los interceptores sanitarios, que en el caso de la Comuna 7, es el denominado interceptor de Cañaveralejo. El vertimiento se realiza en un sitio cercano al puente de Juanchito, en el Barrio Puerto Mallarino. (Comuna 7, 2013). Tal como se aprecia en la Figura 1, el vertimiento de agua residual doméstica sin tratamiento al Río Cauca y al fondo a escasos 50 m, se puede ver el Puente de Juanchito.



Figura 44. Área de la estación de muestreo de Puente de Juanchito (E4).

En esta estación se identificaron por cromatografía de gases acoplado a masas del Laboratorio de Medicina Legal y Ciencias Forenses de Cali, las siguientes sustancias: 4H-tiopirano, 4 - (2,6-dimetil-4H-tiopiran-4-iliden) -2,6-dimetil-; Ftalato de di-iso-octilo; 7,8-Epoxilano-11-ol, 3-acetoxi-; Ingol 12-acetato; Ácido dodecanoico,éster, [1aR-(1a.alpha, 2 alpha, 5.beta, 5a.beta, 8a.alpha, 9.alpha, 10a.alpha.....)]; 1H-ciclopropa[3,4]benzo[1,2-E]azulen-9-yl acetato; 2(3H)-benzotiazolona; 2-[4-metil-6-(2,6,6-trimetilciclohex-1-enil) hexa-1 ,3,5-trienil] ciclohex-1-en-1-carboxaldehído; Ácido 6-hidroxi-2-metil-4-oxo-1H-piridina-3-carboxílico-; Etil-iso allocholate; 2,4,7,14-tetrametil-4-vinil-triciclo [5.4.3.0 (1,8)] tetradecan-6-ol; 1H-2,8a-Metano ciclopentano[a]ciclopropano[e]ciclodecano-.

7.4.1 ANÁLISIS DEL RIESGO POR COMPUESTOS ORGÁNICOS HALLADOS EN LA ESTACIÓN 4 (PUENTE DE JUANCHITO).

7.4.1.1 4H-tiopirano, 4 - (2,6-dimetil-4H-tiopiran-4-iliden) -2,6-dimetil-

También conocido por el nombre: IUPAC: 2 - (propan-2-ilamino) naftaleno-1 ,4-diona. CAS 42506-61-6. Fórmula Molecular: $C_{14}H_{16}S_2$. Peso Molecular: 248.40684 g/mol. Código de información del compuesto (CID42612). Coeficiente de partición octanol-agua: XlogP3-AA: 4.0. No registra información de bioensayos, ni de toxicidad (NCBI PuChemcompound, 2005). Figura 45. La base de datos MSDS, no reporta hoja de seguridad de este compuesto.

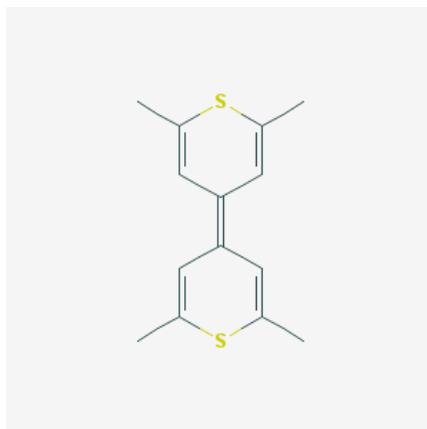


Figura 45. Imagen2D de la sustancia 4H-tiopirano, 4 - (2,6-dimetil-4H-tiopiran-4-iliden) -2,6-dimetil- Fuente:

<http://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/summary/summary.cgi?cid=142612#itabs-2d>

7.4.1.2 Ftalato de di-iso-octilo

También conocido por el nombre IUPAC: bis (6-metilheptil) benceno-1,2-dicarboxilato. CAS 27554-26-3. Formula molecular $C_{24}H_{38}O_4$. Peso Molecular: 390.55612 g/mol. Código de información del compuesto (CID33934). Coeficiente de partición octanol-agua: XlogP3-AA: 8.5. (NCBI PuChemcompound, 2005). Figura 46. La base de datos MSDS, registra la ficha de seguridad para este compuesto (Tabla 35). Anexo 5.

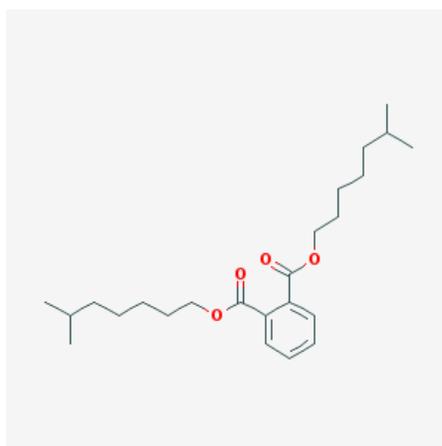


Figura 46. Imagen 2D de la sustancia: 1,2-Benzenedicarboxilic acid, iisooctylester.

Fuente: http://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/summary/summary.cgi?cid=33934&loc=ec_rcs

El Diisooctilo de ftalato desde su proceso de producción, y de su uso como plastificante se puede liberar al medio ambiente a través de diversos flujos de residuos. Si se libera en agua, el diisooctilo se espera que se adsorba a los sólidos suspendidos y sedimentos según el Koc calculado. La volatilización de este

compuesto, desde la superficie del agua es atenuada por la adsorción a sólidos suspendidos y sedimentos en la columna de agua. En un trabajo en un estanque, se estimó la vida media de la volatilización en 4,3 años, y el Factor de Bioconcentración – BCF, en peces mosquito, indica que la bioconcentración en organismos acuáticos es alta. (Toxnet Home. HSDS, 2012, November). En el mismo sentido, Mackintosh *et al.* (2004), analizaron la concentración de Diisooctilo, en organismos acuáticos en partes por trillón – ppt, en False Harbor, Vancouver, Columbia Británica, encontraron concentraciones desde 1.23 a 4.46 ppt, en plantón, organismos bentónicos y pelágicos, de la cadena trófica de dicha Bahía.

De otra parte, Colón *et al.* (2000), estudiaron en Puerto Rico, el desarrollo prematuro de mama (Telarca), que es el crecimiento del tejido mamario en las niñas menores de 8 años de edad sin otras manifestaciones de la pubertad.

Puerto Rico tiene la incidencia más alta conocida de telarca prematura jamás registrado. En las últimas dos décadas desde que esta grave anomalía de la salud pública se ha observado, se ha encontrado una explicación para este fenómeno. Algunos contaminantes orgánicos, como pesticidas y algunos plastificantes, pueden alterar el desarrollo sexual normal en la vida silvestre, y muchos de ellos han sido ampliamente utilizados en Puerto Rico. Esta investigación fue diseñada para identificar contaminantes en el suero sanguíneo de las niñas puertorriqueñas con telarca prematuro. Los ftalatos identificados han sido clasificados como disruptores endocrinos. Este estudio sugiere una posible asociación entre plastificantes con actividad estrogénica y antiandrogénica conocido y la causa del desarrollo prematuro de mama en las niñas.

7.4.1.3 7,8-Epoxilano-11-ol, 3-acetoxi-

Este compuesto se identificó también en las estaciones 3 y 5. Páginas: 85 y 104.

7.4.1.4 Ingol 12-acetato

No registra nombre IUPAC. Se reconoce por su Fórmula Molecular: $C_{22}H_{32}O_7$. Peso Molecular: 408.48528 g/mol; Código de información del compuesto (CID536571). Coeficiente de partición octanol-agua: XlogP3-AA: 0.5. No registra información de bioensayos, ni de toxicidad (NCBI PuChemcompound, 2005). Figura 47. La base de datos MSDS, no registra hoja de seguridad de este compuesto.

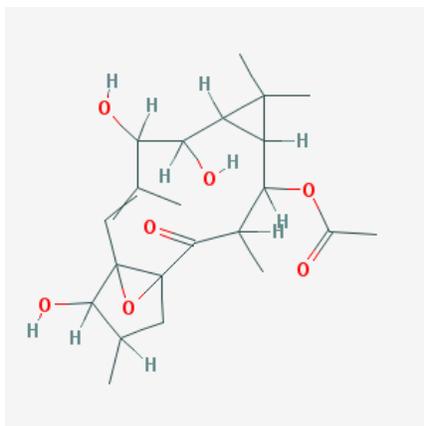


Figura 47. Imagen 2D de la sustancia: Ingol 12-acetato. Fuente: <http://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/summary/summary.cgi?cid=536571#itabs-3d>

7.4.1.5 Ácido dodecanoico,éster, [1aR-(1a.alpha, 2 alpha, 5.beta, 5a.beta, 8a.alpha, 9.alpha, 10a.alpha.....)]

No registra nombre IUPAC. Se reconoce por su Fórmula Molecular: $C_{32}H_{48}O_6$. Peso Molecular: 528.71992 g/mol. Código de información del compuesto (CID537289). Coeficiente de partición octanol-agua: XlogP3-AA: 6.2. No registra información de bioensayos, ni de toxicidad, (NCBI PuChemcompound, 2005). Figura 48. La base de datos MSDS, no reporta hoja de seguridad de este compuesto.

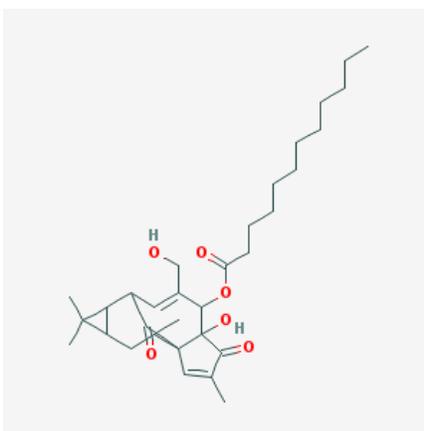


Figura 48. Imagen 2D de la sustancia: Ácido dodecanoico,éster, [1aR-(1a.alpha, 2 alpha, 5.beta, 5a.beta, 8a.alpha, 9.alpha, 10a.alpha.....)] .

Fuente: <http://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/summary/summary.cgi?cid=537289#itabs-3d>

7.4.1.6 1H-ciclopropa[3,4]benzo[1,2-E]azulen-9-yl acetato

No registra nombre IUPAC. Se reconoce por su Fórmula Molecular: $C_{28}H_{38}O_{10}$. Peso Molecular: 534.59532 g/mol. Código de información del compuesto

(CID538182). Coeficiente de partición octanol-agua: XlogP3-AA: 0.7. No registra información de bioensayos, ni de toxicidad, (NCBI PuChemcompound, 2005). Figura 49. La base de datos MSDS, no reporta hoja de seguridad de este compuesto.

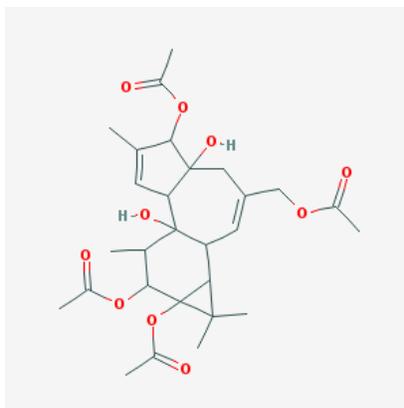


Figura 49. Imagen 2D de la sustancia: 1H-ciclopropa[3,4]benzo[1,2-E]azulen-9-yl acetato. Fuente: <http://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/summary/summary.cgi?cid=538182#x400>

7.4.1.7 2(3H)-benzotiazolona

También conocido por el nombre UIPAC: 3H-1,3-benzotiazol-2-ona. CAS 934-34-9. Formula Molecular: C_7H_5NOS . Peso Molecular: 151.1857 g/mol. Coeficiente de partición XLogP3-AA: 1.8. Código de identificación del compuesto (CID13625). Se registran 684 bioensayos de los cuales 4 son activos (NCBI PuChemcompound, 2005). Figura 50.

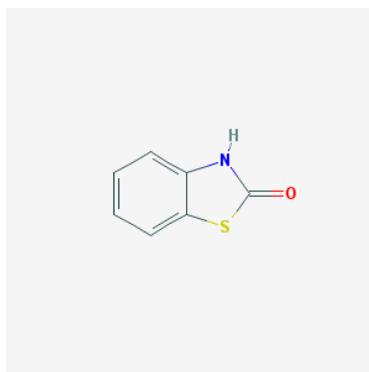


Figura 50. Estructura molecular de 2(3H)-benzotiazolona en 2D. Fuente: http://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/summary/summary.cgi?cid=13625&loc=ec_rcs#itabs-2d

Con la sustancia 2(3H)-benzotiazolona, se han realizado estudios, donde se ensaya como antiviral (Campagnola *et al.*, 2011), antibacteriano (Li *et al.*, 2010), (Ostrov *et al.*, 2007), anticonvulsivo (Ucar *et al.*, 1998), y también se ha investigado su degradación por bacterias (Besse *et al.*, 2001), igualmente su

formación como producto de degradación a partir de la molécula 2-mercaptobenzotiazol (MBT) en aguas residuales por la cepa de *Rhodococcus erythropolis* (De Wever *et al.*, 1998). De la base de datos MSDS, se obtuvo la ficha de seguridad del compuesto (Tabla 36). Anexo 5.

7.4.1.8 2-[4-metil-6-(2,6,6-trimetilciclohex-1-enil) hexa-1 ,3,5-trienil] ciclohex-1-en-1-carboxaldehído

Este compuesto se identificó también en las estaciones 3 y 5. Páginas: 84, 101.

7.4.1.9 Ácido 6-hidroxi-2-metil-4-oxo-1H-piridina-3-carboxílico-

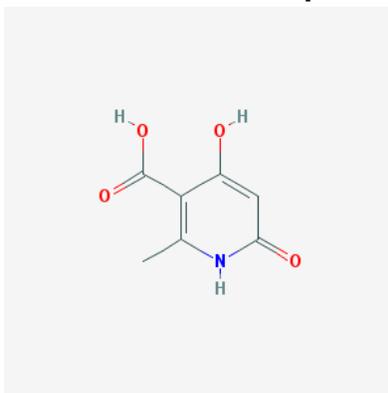


Figura 51. Estructura molecular de Ácido 6-hidroxi-2-metil-4-oxo-1H-piridina-3-carboxílico- en 2D.

Fuente: <http://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/summary/summary.cgi?cid=54708942#itabs-2d>

También conocido por el nombre UIPAC: ácido 4-hidroxi-2-metil-6-oxo-1H-piridina-3-carboxílico. Código de información (CID54708942). Formula Molecular: $C_7H_7NO_4$. Peso Molecular: 169.13478 g/mol. Coeficiente de partición XLogP3-AA: - 0.3. No registra información de bioactividad, ni de toxicidad (NCBI PuChemcompound, 2011). Figura 51. La base de datos MSDS, no reporta ficha de seguridad de este compuesto.

7.4.1.10 1H-2,8a-Metano ciclopentano[a]ciclopropano[e]ciclodecano-

No registra nombre IUPAC. Formula Molecular: $C_{20}H_{28}O_6$. Peso Molecular: 364.43272 g/mol. Coeficiente de partición XLogP3-AA: - 1.0. No registra información sobre bioactividad, ni de toxicidad (NCBI PuChem compound, 2005). Figura 52. La base de datos MSDS, no registra ficha de seguridad de este compuesto.

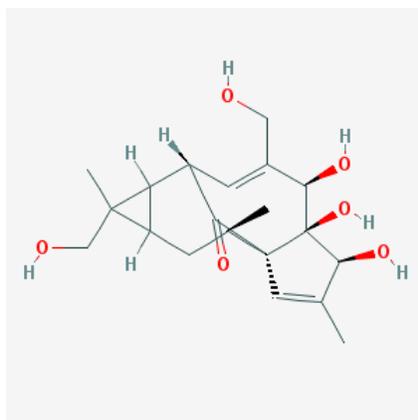


Figura 52. Estructura molecular de:
 1H-2,8a-Metano ciclopentano[a]ciclopropano[e]ciclododecano- en 2D.
 Fuente: <http://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/summary/summary.cgi?cid=3085012>

7.4.1.11 Etil-iso allocholate

Este compuesto se identificó también en las estaciones 1 y 2. Se registra en las páginas: 58 y 75.

7.4.1.12 2,4,7,14-tetrametil-4-vinil-triciclo [5.4.3.0 (1,8)] tetradecan-6-ol

No registra nombre IUPAC. Fórmula molecular: $C_{20}H_{34}O$. Peso molecular: 290.48336 g/mol. Coeficiente de partición XLogP3-AA: 6.6. Código de identificación (CID590916). No registra bioensayos, ni pruebas de toxicidad (NCBI. PubChemcompound, 2005). Figura 53. La base de datos MSDS, no registra ficha de seguridad de este compuesto.

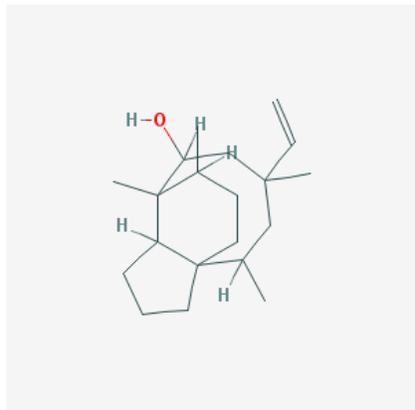


Figura 53. Estructura molecular de 2,4,7,14-tetrametil-4-vinil-triciclo [5.4.3.0 (1,8)] tetradecan-6-ol.
 Fuente: <http://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/summary/summary.cgi?cid=590916#itabs-2d>

7.4.2. EVALUACIÓN DEL RIESGO DE COMPUESTOS ORGÁNICOS EN EL PUENTE DE JUANCHITO.

7.4.2.1 Evaluación del riesgo de acuerdo a las fichas de seguridad – MSDS, y la información del Sistema Globalmente Armonizado de Clasificación y Etiquetado de Productos Químicos – SGA.

La evaluación del riesgo por compuestos orgánicos en la Estación 4, (Puente de Juanchito), se realizó de acuerdo a la información registrada en las fichas de seguridad MSDS, disponible para algunos de los compuestos. También se usó la información del Sistema Globalmente Armonizado de Clasificación y Etiquetado de Productos Químicos – SGA.

Tabla 37. Evaluación del riesgo por categorías de toxicidad para compuestos orgánicos en la Estación 4.

Toxicidad categoría 1	Toxicidad categoría 4
Ácido 1,2-bencenodicarboxílico, éster de diisooctilo	2(3H)-benzotiazolona

La evaluación de los compuestos encontrados en la E4 (Puente de Juanchito), se realizó mediante construcción de dos grupos (Tabla 37), el primero representado por el Ftalato: Ácido 1,2-bencenodicarboxílico, éster de diisooctilo, compuesto que registra toxicidad para la reproducción (categoría 1B), igualmente se reporta como Nocivo para los organismos acuáticos, con efectos nocivos duraderos. Factor de Bio-concentración – BCF, en peces mosquito, indica que la bioconcentración en organismos acuáticos es alta. Toxnet Home. HSDS (2012, November). También se reconoce por su efecto como disruptor endocrino. El segundo, por el compuesto, 2(3H)-benzotiazolona, que presenta Toxicidad categoría 4.

7.4.2.2 Evaluación del riesgo por bio-acumulación, y el potencial de bio-concentración de acuerdo al valor del coeficiente de partición octanol-agua $Kow = XlogP3:AA$.

La evaluación del riesgo por bio-acumulación se realizó de acuerdo a los criterios establecidos por la base de datos bvsde.paho.org., la cual determina cinco criterios de calificación (alta, media alta, media, media baja, y baja), y el potencial de bio-concentración de acuerdo la información de (NACIONES UNIDAS, 2011), con relación al valor del coeficiente de partición octanol-agua Kow , reportado para cada sustancia en la base de datos NCBI Pubchemcompound.

Para la calificación del riesgo de los compuestos encontrados en el Puente de Juanchito, se ajustó a las categorías: i) alta, para cinco compuestos en el rango de 6.2 a 8.5; lo anterior correspondió al 41,7%; ii) media-alta, para dos compuestos en el rango de 4.0 a 4.3; correspondiente al 16.7%; iii) media-baja, un compuesto con 1.8; para una contribución de 8.3%; iv) baja, cuatro compuestos en el rango -1.0 a 0.7, lo que corresponde al 33.3%; el potencial de bio-concentración correspondió al 58.4%. Tabla 38. La bioacumulación de estas sustancias es directamente proporcional al riesgo.

Tabla 38. Evaluación del riesgo por bio- acumulación y el potencial de bio-concentración por compuestos orgánicos en la Estación 4.

Nombre del compuesto	XlogP3-AA	Riesgo por Bio-acumulación en la fauna acuática	Escala colorimétrica del riesgo	Riesgo por Potencial de bio-concentración	Escala colorimétrica del riesgo
Ácido 1,2-benzenodicarboxílico, éster de diisooctilo IUPAC: bis (6-metilheptil) benceno-1 ,2-dicarboxilato	8.5	alta		Con Potencial de bio-concentración	
7,8-Epoxilano-11-ol, 3-acetoxi- Nombre IUPAC: No registra	8.2	Alta			
2,4,7,14-tetrametil-4-vinil-triciclo [5.4.3.0 (1,8)] tetradecan-6-ol No registra	6.6	Alta			
2-[4-metil-6-(2,6,6-trimetilciclohex-1-enil) hexa-1 ,3,5-trienil] ciclohex-1-en-1-carboxaldehído IUPAC: 2-[[1E,3E,5E)-4-metil-6-(2,6,6-trimetilciclohexen-1-il)hexa-1,3,5-trienil]ciclohexene-1-carbaldehído	6.3	Alta			
Ácido dodecanoico, éster, [1aR-(1a.alpha, 2.alpha, 5.beta, 5a.beta, 8a.alpha, 9.alpha, 10a.alpha.....)] - Nombre IUPAC: No registra	6.2	Alta			
Etil-iso allocholate IUPAC: acetato 4-(3,7,12-trihidroxi-10,13-dimetil-2,3,4,5,6,7,8,9,11,12,14,15,16,17-tetradecahidro-1H-ciclopenta[al]fenantren-17-il)pentanoate	4.3	Media-alta			
4H-tiopirano, 4 - (2,6-dimetil-4H-tiopiran-4-iliden) -2,6-dimetil- IUPAC: 2 - (propan-2-ilamino) naftaleno-1 ,4-diona	4.0	Media-alta			
2(3H)-benzotiazolona IUPAC: 3H-1 ,3-benzotiazol-2-ona	1.8	Media-baja		Sin Potencial de bio-concentración	
1H-ciclopropa[3,4]benzo[1,2-E]azulen-9-il acetato(1) Nombre IUPAC: No registra	0.7	Baja			
Ingol 12-acetato Nombre IUPAC: No registra	0.5	Baja			
Ácido 6-hidroxi-2-metil-4-oxo-1H-piridina-3-carboxílico- IUPAC: ácido 4-hidroxi-2-metil-6-oxo-1H-piridina-3-carboxílico	-0.3	Baja			
1a,2,5,5a,6,9,10,10a-Octahidro-5,5a,6-trihidroxi-1,4-bis(hidroximetil)-1,7,9-trimetil-1H-2,8a- IUPAC: : No registra	-1.0	Baja			

7.5. ESTACIÓN DESEMBOCADURA DEL RÍO CALI, E5.

“Los mayores agresores contaminantes del Río Cauca en su recorrido que hace por la ciudad de Cali son, paradójicamente, los mismos seis ríos que atraviesan el perímetro urbano (Cali, Pance, Meléndez, Aguacatal, Lili y Cañaveralejo), porque se convierten en caños cuando bajan de la ladera”, afirma Alberto Ramos, director del Dagma. Y la estocada final se la da el Río Cali, que desemboca en el barrio Floralia, donde la alta contaminación se observa claramente en unas aguas de un color negro oscuro, que emana pequeñas burbujas producto del gas metano que

se libera por la descomposición de la materia orgánica en el fondo. Así es el triste adiós del Cauca en territorio caleño, un Lázaro fluvial que si no tuviera un largo recorrido quedaría enterrado de por vida en nuestra ciudad. (El País, 2007). (Figura 54).

En esta estación se identificaron por cromatografía de gases acoplado a masas del Laboratorio de Medicina Legal y Ciencias Forenses de Cali, las siguientes sustancias:

Alcohol salicílico; Bencenometano, 4-hidroxi-; 1,3-benzodioxol, 5 - [1 - [2 - (2-butoxi) etoxi] butil] -; Ácido pimárico; 2-[4-metil-6-(2,6,6-trimetilciclohex-1-enil) hexa-1 ,3,5-trienil] ciclohex-1-en-1-carboxaldehído-t; Butanoico, éster, [1aR-(1a.alpha, 2.alpha, 5.beta, 5a.beta, 8a.alpha, 9.alpha, 10a.alpha.....)] -; 4-hexil-1-(7-metoxicarbonilheptil) biciclo [4.4.0] deca-2 ,5,7-trieno-; 5-(hidroximetil) -1,1,4-trimetil-un 6-metilideno-3, 4,5,7,8,8 naftalen-a-hexahidro-2H-2-ol; Androsta-5 ,14-dien-17-ona, 3-hidroxi-; Octadecano, 3-etil-5-(2-etilbutilo)- ;1H-ciclopropa[3,4]benzo[1,2-E]azulen-9-yl acetato; 7,8-Epoxilanostan-11-ol, 3-acetoxi; 2,4,7,14-tetrametil-4-vinil-triciclo [5.4.3.0 (1,8)] tetradecan-6-ol; 4-(3,3-Dimetil-but-1inil)-4-hidroxi-2,6,6-trimetilcic.



Figura 54. Área de la estación de muestreo de la Desembocadura del Río Cali (E5). Fuente: El País (2007).

7.5.1 ANÁLISIS DEL RIESGO POR COMPUESTOS ORGÁNICOS HALLADOS EN LA ESTACIÓN 5 (DESEMBOCADURA RÍO CALI).

7.5.1.1. Alcohol salicílico

Este compuesto se identificó también en la estación 3. Página 84; Anexo 4, Tabla 31.

7.5.1.2. Bencenometano, 4-hidroxi

Este compuesto se identificó también en la estación 1. Página 49; Anexo 2, Tabla 11.

7.5.1.3 1,3-benzodioxol, 5 - [1 - [2 - (2-butoxi) etoxi] butil] -

Este compuesto se identificó también en la estación 3. Página 82.

7.5.1.4 2-[4-metil-6-(2,6,6-trimetilciclohex-1-enil) hexa-1 ,3,5-trienil] ciclohex-1-en-1-carboxaldehído-t

Este compuesto se identificó también en las estaciones 3 y 4. Páginas: 84 y 96.

7.5.1.5 Ácido pimárico

También conocido por el nombre IUPAC: 7-etenil-1, 4a ,7-trimetil-3, 4,4 b, 5,6,9,10,10 a-octahidro-2H-fenantreno-1-carboxílico ácido. CAS 127-27-5. Fórmula Molecular: C₂₀H₃₀O₂. Peso Molecular: 302.451 g/mol; Código de información del compuesto (CID10116), coeficiente de partición octanol-agua: XlogP3-AA: 5.5. No registra información de toxicidad, ni bioensayos. (NCBI PubChem compound, 2005). Figura 55. La base de datos MSDS, registra ficha de seguridad para este compuesto (Tabla 39). Anexo 6.

La base datos Pubmed, registra la siguiente información pertinente al trabajo de investigación, donde interviene el Ácido pimárico.

En estudio con peces (*Coregonus laieticus*), expuestos a los efluentes diluidos de tres fábricas de pasta de celulosa en el sur del lago Saimaa, Finlandia. Se encontró aumento de los niveles de mRNA, lo que indica que estos efluentes tienen compuestos estrogénico. (Mellanen *et al.*, 1999). En el mismo sentido, en estudio de la concentración de Retene en la bilis del rutilo (*Rutilus rutilus*) y la perca (*Perca fluviatilis*), muestreado en sedimento en estaciones de muestreo

entre 1 a 2 km aguas abajo de las fábricas de pulpa y papel, en un lago en Finlandia, se encontró mayor concentración en Rutilo, el cual se alimenta de organismos bentónicos, que en la Perca. (Leppanen & Oikari, 1999).

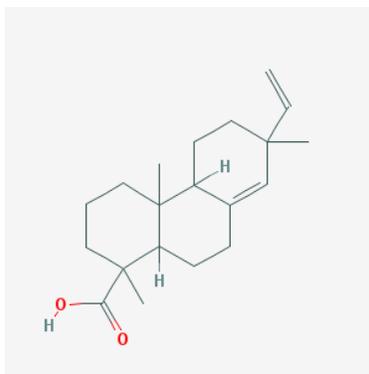


Figura 55. Imagen 2D de la sustancia: Ácido pimárico.

Fuente: http://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/summary/summary.cgi?cid=10116&loc=ec_rcs#itabs-2d

También se estudió el Factor de Bioconcentración - BCF, de la trucha arco iris (*Oncorhynchus mykiss*), de nueve ácidos resínicos: abiético, deshidroabiético, chlorodehydroabietic, dichlorodehydroabietic, neoabiético, pimárico, isopimárico, sandaracopimaric y ácido palústrico. Este factor presentó variación de <25 a 130 entre los peces que fueron expuestos a concentraciones medias transmitidas por el agua de 0,7-3,6 µg/L para un tiempo de 20 días. (Niimi & Lee, 1992). De otra parte, Kato *et al.*, (2012), encontraron que el ácido pimaradienoico, es genotóxico, dado que en ensayo en vivo, se observó un aumento significativo en la frecuencia de daño del ADN, en hepatocitos de animales tratados con la dosis más alta (80mg/kg) en comparación con el grupo de control.

7.5.1.6 Butanoico, éster, [1aR-(1a.alpha, 2.alpha, 5.beta, 5a.beta, 8a.alpha, 9.alpha, 10a.alpha.....)] -

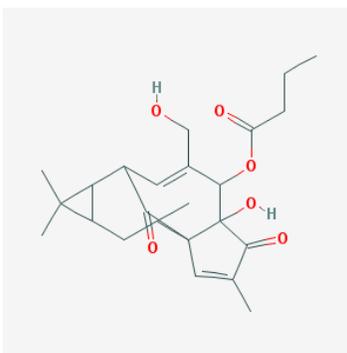


Figura 56. Imágenes 2D y 3D de la sustancia: Butanoico, éster, [1aR-(1a.alpha, 2.alpha, 5.beta, 5a.beta, 8a.alpha, 9.alpha, 10a.alpha.....)] -.

Fuente: <http://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/summary/summary.cgi?cid=537833#itabs-2d>

No registra nombre IUPAC. Se reconoce por su Fórmula Molecular: $C_{24}H_{32}O_6$. Peso Molecular: 416.50728 g/mol; Código de información del compuesto (CID537833). Coeficiente de partición octanol-agua: XlogP3-AA: 1.9. No registra información de toxicidad, ni de bioensayos (NCBI PubChemcompound, 2005). Figura 56. La base de datos MSDS, no reporta la ficha de seguridad de este compuesto.

7.5.1.7 4-hexil-1-(7-metoxicarbonilheptil) biciclo [4.4.0] deca-2 ,5,7-trieno-

Este compuesto se identificó también en la estación 2. Página 77.

7.5.1.8 5-(hidroximetil) -1,1,4-trimetil-un 6-metilideno-3, 4,5,7,8,8 naftalen-a-hexahidro-2H-2-ol

También conocido por el nombre IUPAC: 5 - (hidroximetil) -1,1,4-trimetil-un 6-metilideno-3, 4,5,7,8,8 naftalen-a-hexahidro-2H-2-ol. Fórmula Molecular: $C_{15}H_{26}O_2$. Peso Molecular: 238.36574 g/mol; Código de información del compuesto (CID584513). Coeficiente de partición octanol-agua: XlogP3-AA: 2.6. No registra información de toxicidad, ni bioensayos (NCBI PubChem compound, 2005). Figura 57. La base de datos MSDS, no registra ficha de seguridad para este compuesto.

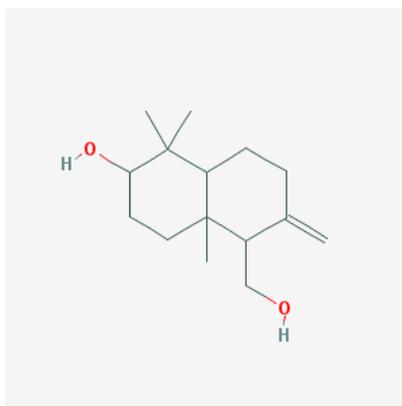


Figura 57. Imagen 2D de la sustancia: 5-(hidroximetil) -1,1,4-trimetil-un 6-metilideno-3, 4,5,7,8,8 naftalen-a-hexahidro-2H-2-ol.

Fuente: <http://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/summary/summary.cgi?cid=584513>

7.5.1.9 Androsta-5 ,14-dien-17-ona, 3-hidroxi-

Este compuesto se identificó también en la estación 2. Página 73.

7.5.1.10 Octadecano, 3-etil-5-(2-etilbutilo) -

Este compuesto se identificó también en la estación 2. Página 75.

7.5.1.11 1H-ciclopropa[3,4]benzo[1,2-E]azulen-9-yl acetato

Este compuesto se identificó también en la estación 4. Página 94.

7.5.1.12 7,8-Epoxilano-11-ol, 3-acetoxi-

Este compuesto se identificó también en las estaciones 3 y 4. Páginas: 85 y 93.

7.5.1.13 2,4,7,14-tetrametil-4-vinil-triciclo [5.4.3.0 (1,8)] tetradecan-6-ol

Este compuesto se identificó también en la estación 4. Página 97.

7.5.1.14 4-(3,3-Dimetil-but-1inil)-4-hidroxi-2,6,6-trimetilcic

De este compuesto no se encontró ninguna información, registro de bioactividad, ni de toxicidad en la base de datos Pubchem Compound, tampoco se encontró la ficha de seguridad MSDS.

7.5.2. EVALUACIÓN DEL RIESGO DE COMPUESTOS ORGÁNICOS EN LA DESEMBOCADURA DEL RÍO CALI.

7.5.2.1 Evaluación del riesgo de acuerdo a las fichas de seguridad – MSDS, y la información del Sistema Globalmente Armonizado de Clasificación y Etiquetado de Productos Químicos – SGA.

La evaluación del riesgo por compuestos orgánicos en la Estación 5 (Desembocadura del Río Cali), se realizó de acuerdo a la información registrada en las fichas de seguridad MSDS, disponible para algunos de los compuestos. También se usó la información del Sistema Globalmente Armonizado de Clasificación y Etiquetado de Productos Químicos – SGA.

La evaluación de los compuestos encontrados en la E5 (Desembocadura del Río Cali), se realizó mediante construcción de cuatro grupos (Tabla 40), el primero representado por el Ácido pimárico, compuesto que registra toxicidad acuática

aguda (Categoría 1). Toxicidad para los peces, CL50 – *Pimephales promelas* de 0,87 mg/l en 96 h. Igualmente se reporta con un potencial de bioacumulación en *Oncorhynchus mykiss* (Trucha arcoíris) - 14 d- 2,7 µg/l, y un Factor de Bioconcentración (FBC): 34 (SIGMA-ALDRICH 2012). En el mismo sentido, en estudios realizado en agua, sedimentos y peces, se ha encontrado que es un compuesto que ocasiona disrupción endocrina, se bioacumula, es genotoxico y proviene principalmente de la industria de producción de pulpa para papel. (Mellanen *et al.*, 1999; Leppanen & Oikari, 1999; Niimi & Lee,1992; (Kato *et al.*, 2012).

El segundo, por el compuesto Bencenometano, 4-hidroxi, que presenta Irritación de los ojos (Categoría 2A). Toxicidad en peces: LC-50 – *Jordanella floridae* - 10,500 mg/l - 2 h (SIGMA-ALDRICH, 2012). Otra investigación, registró respuesta negativa con el test de Ames, usando la cepa TA100, sin activador enzimático, con una dosis entre 50-2000µg por placa (Ball *et al.* 1984).

Tabla 40. Evaluación del riesgo por categorías de toxicidad para compuestos orgánicos en la Estación 5.

Toxicidad Categoría 1	Toxicidad Categoría 2.	Toxicidad categoría 3	Sin información
Acido pimárico	Bencenometano, 4-hidroxi	Alcohol salicílico	4-(3,3-Dimetil-but-1inil)-4-hidroxi-2,6,6-trimetilcic

El tercer grupo, por el compuesto, Alcohol salicílico, que presenta toxicidad específica en determinados órganos - exposición única (Categoría 3), en la que se reportan resultados positivos, para la reproducción en ratas: mortalidad post-implantación y anomalías en el sistema musculo-esquelético (SIGMA-ALDRICH 2013). De otra parte, se conocen sus efectos contra la malaria, propiedades anti-inflamatorias, inhibidor del virus de la poliomielitis y por su contribución a la mejoría de los trastornos neuro-siquiátricos tales como la depresión, en asocio con la administración de otras drogas. (Campagnola *et al.*, 2011; Yuan *et al.*, 2011; Ulrich-Merzenich *et al.*, 2012).

El cuarto grupo, representado por el compuesto, 4-(3,3-Dimetil-but-1inil)-4-hidroxi-2,6,6-trimetilcic, el cual, no registra información en la fichas de seguridad MSDS, ni en la base de datos Pubmed compound, lo que representa un riesgo importante, al desconocer la información de dicha molécula.

7.5.2.2 Evaluación del riesgo por bio-acumulación, y el potencial de bio-concentración de acuerdo al valor del coeficiente de partición octanol-agua Kow= XlogP3:AA.

La evaluación del riesgo por bio-acumulación se realizó de acuerdo a los criterios establecidos por la base de datos bvsde.paho.org., la cual determina cinco

criterios de calificación (alta, media alta, media, media baja, y baja), y el potencial de bio-concentración de acuerdo la información de (NACIONES UNIDAS, 2011), con relación al valor del coeficiente de partición octanol-agua Kow, reportado para cada sustancia en la base de datos NCBI Pubchem compound.

Tabla 41. Evaluación del riesgo por bio- acumulación y el potencial de bio-concentración por compuestos orgánicos en la Estación 5.

Nombre del compuesto	XlogP3-AA	Riesgo por Bio-acumulación en la fauna acuática	Escala colorimétrica del riesgo	Riesgo por Potencial de bio-concentración	Escala colorimétrica del riesgo
Octadecano, 3-etil-5-(2-etilbutilo) - IUPAC: 3-etil-5-(2-etilbutilo) octadecano	13.4	Alta	Rojo	Con Potencial de bio-concentración	Rojo
4-hexil-1-(7-metoxicarbonilheptil) biciclo [4.4.0] deca-2 ,5,7-trieno- IUPAC: metilo 8-(2-hexil-5-naftalen ,6-dihidro-2H-4a-il) octanoato	8.8	Alta	Rojo		
7,8-Epoxilanoestan-11-ol, 3-acetoxi- IUPAC: No registra	8.2	Alta	Rojo		
2,4,7,14,Tetramethyl-4-vinyl-tricyclo[5.4.3.0(1,8)]tetrad IUPAC: No registra	6.6	Alta	Rojo		
2-[4-metil-6-(2,6,6-trimetilciclohex-1-enil) hexa-1 ,3,5-trienil] ciclohex-1-en-1-carboxaldehído-t IUPAC: 2-[(1E,3E,5E)-4-metil-6-(2,6,6-trimetilciclohexen-1-il)hexa-1,3,5-trienil]ciclohexene-1-carbaldehído	6.3	Alta	Rojo		
Ácido pimárico IUPAC: 7-etenil-1, 4a ,7-trimetil-3, 4,4 b, 5,6,9,10,10 a-octahidro-2H-fenantreno-1-carboxílico ácido	5.5	Alta	Rojo		
1,3-benzodioxol, 5 - [1 - [2 - (2-butoxi)etoxi] butil] - IUPAC: 5 - [1 - [2 - (2-butoxi)etoxi] butil] -1,3-benzodioxol	3.6	Media-alta	Amarillo	Sin Potencial de bio-concentración	Azul
5-(hidroximetil) -1,1,4-trimetil-un 6-metilideno-3, 4,5,7,8,8 naftalen-a-hexahidro-2H-2-ol 5 - (hidroximetil) -1,1,4-trimetil-un 6-metilideno-3, 4,5,7,8,8 naftalen-a-hexahidro-2H-2-ol	2.6	Media- baja	Azul		
Androsta-5 ,14-dien-17-ona, 3-hidroxi- IUPAC: (3S,10R,13S)-3-hidroxi-10,13-dimetil-1,2,3,4,7,8,9,11,12,16-decahidrociclopenta[a]fenantreno-17-ona	2.6	Media- baja	Azul		
Butanoico, éster, [1aR-(1a.alpha, 2.alpha, 5.beta, 5a.beta, 8a.alpha, 9.alpha, 10a.alpha.....)] - IUPAC: No registra	1.9	Media-baja	Azul		
1H-ciclopropa[3,4]benzo[1,2-E]azulen-9-il acetato IUPAC: No registra	0.7	Baja	Verde		
Alcohol salicílico IUPAC: 2 - (hidroximetil) fenol	0.7	Baja	Verde		
Bencenometanol, 4-hidroxi- 4 - (hidroximetil) fenol	0.20	Baja	Verde		
4-(3,3-Dimetil-but-1inil)-4-hidroxi-2,6,6-trimetilcic UIPAC: Sin información	Sin información	Sin información	Gris		

Para la calificación del riesgo de los compuestos encontrados en la (Desembocadura del Río Cali), se ajustó a las categorías: i) alta, para seis compuestos en el rango de 5.5 a 13.4; lo anterior correspondió al 42,9%; ii) media-alta, para un compuesto con el valor de 3.6; correspondiente al 7.1%; iii) media-baja, tres compuestos en el rango de 1.9 a 2.6; para una contribución de 21.4%; iv) baja, tres compuestos en el rango 0.2 a 0.7, lo que corresponde al 21.4% y v) con un compuesto sin información correspondiente al 7.1%; el potencial de bio-cocentración correspondió al 42.9% de los compuestos. Tabla 41. La bioacumulación de estas sustancias es directamente proporcional al riesgo.

7.6. ANÁLISIS DEL RIESGO POR COMPUESTOS ORGÁNICOS EN LA ZONA DE ESTUDIO.

7.6.1 Análisis del riesgo de acuerdo a las categorías de toxicidad, para los compuestos orgánicos hallados en cinco estaciones de muestreo del Río Cauca.

En la Tabla 42, se registran las sustancias reportadas en las cinco estaciones, de la zona de estudio, de acuerdo a las categorías de toxicidad, registradas en las fichas de seguridad MSDS, y la información del Sistema Globalmente Armonizado de clasificación y etiquetado de productos químicos – SGA.

Tabla 42. Análisis del riesgo de sustancias por categoría de peligro en todas las estaciones.

Nombre del compuesto.	Categoría de toxicidad	Escala colorimétrica	Estación
Ftalato de di-n-butilo	Categoría 1		E1
4 - (1,1,3,3-tetrametil-butil) fenol	Categoría 1		E2
Ácido palústrico	Categoría 1		E2
Ftalato de di-n-butilo	Categoría 1		E3
Ácido 1,2-bencenodicarboxílico, éster de diisooctilo	Categoría 1		E4
Ácido pimárico	Categoría 1		E5
Butilhidroxitolueno– BHT	Categoría 2		E1
Bencenometano, 4-hidroxi	Categoría 2		E1
Butilhidroxitolueno – BHT	Categoría 2		E3
Bencenometano, 4-hidroxi	Categoría 2		E5
(2-dodecen-1-il) anhídrido succínico	Categoría 3		E1
Fenol, 2-metil-4-(1,1,3,3-tetrametil-butil)–	Categoría 3		E2
Alcohol salicílico	Categoría 3		E3
Alcohol salicílico	Categoría 3		E5
Vitamina A aldehído	Categoría 4		E1
4-Cianotiofenol	Categoría 4		E1
1,4-dimetil-7-isopropilazuleno	Categoría 4		E2
2(3H)-benzotiazolona	Categoría 4		E4
Ácido ursodeoxicólico	Categoría 5		E2
1H-inden-1-ona, 2,3-dihidro-	No peligroso		E1
Linoleicacid ethyl ester	No peligroso		E2
N-nonacosano	No peligroso		E2
Butil Ricinoleate	No peligroso		E2
Éster etílico del ácido palmítico	No peligroso		E3
L-lisina, N6-[(1,1-dimetil-etoxi) carbonil]-N2-[(9H-fluoren-9-ilmetoxi) carbonil] –	No peligroso		E3
1,1'-(4-Metil-1,3-fenilene)bis[3-[5-(p-tolil)-1,3,4-tiadi	Sin información		E1
4-(3,3-Dimetil-but-1inil)-4-hidroxi-2,6,6-trimetilcic	Sin información		E5

La estación 2, presentó el mayor número de compuestos con ficha de seguridad MSDS. También presentó dos compuestos en la categoría 1, lo que corresponde al mayor porcentaje de riesgo, con un valor del 33.3%, y las otras estaciones cada una con un porcentaje de 16.7%. Para la categoría 2, la estación 1, aporta el 50% de estos compuestos, la categoría 3, presentó un compuesto para cada estación, excepto para la estación 4, la categoría 4, estuvo representada en un 50%, para la estación 1, la estación 2, representó la categoría 5, en un 100%, y la no peligroso con un 50%, sin información dos compuestos en las estaciones 1, y 5.

7.6.2 Análisis del riesgo de acuerdo a los potenciales de bio-acumulación y bio-concentración, para los compuestos orgánicos hallados en cinco estaciones de muestreo del Río Cauca.

Tabla 43. Análisis del riesgo por bio-acumulación y potencial de bio-concentración en la zona de estudio.

Nombre del compuesto	XlogP3-AA	Riesgo por Bio-acumulación en la fauna acuática	Escala colorimétrica del riesgo	Riesgo por Potencial de bio-concentración	Escala colorimétrica del riesgo	Estación
1-Heptatriacotanol	18.7	Alta		Con Potencial de bio-concentración		E2
N-nonacosano	15.3	Alta				
Octadecano, 3-etil-5-(2-etilbutilo) -	13.4	Alta				
Octadecano, 3-etil-5-(2-etilbutilo) -	13.4	Alta				
4-hexil-1-(7-metoxycarbonilheptil) biciclo [4.4.0] deca-2 ,5,7-trieno	8.8	Alta				
Acido Ciclopropanobutanico, 2 - [(2 - [(2-pentilciclopropil) metil] ciclopropil) metil] - éster metílico	8.6	Alta				
Acido 1,2-benzenodicarboxílico, éster de disooctilo	8.5	Alta				
7,8-Epoxilano-11-ol, 3-acetoxi-	8.2	Alta				
7,8-Epoxilano-11-ol, 3-acetoxi-	8.2	Alta				
4-hexil-1-(7-metoxycarbonilheptil) biciclo [4.4.0] deca-2 ,5,7-trieno-	8.8	Alta				
7,8-Epoxilano-11-ol, 3-acetoxi-	8.2	Alta				
Ester etílico del ácido palmítico	7.8	Alta				
Ester etílico del ácido linoleico	7.3	Alta				
Butil Ricinoleate	7.3	Alta				
2-metil-Z, Z-3, 13-octadecadienol	7.1	Alta				
2,4,7,14-tetrametil-4-vinil-triciclo [5,4,3,0 (1,8)] tetradecan-6-ol	6.6	Alta				
2,4,7,14-tetrametil-4-vinil-triciclo [5,4,3,0 (1,8)] tetradecan-6-ol	6.6	Alta				
2-[4-metil-6-(2,6,6-trimetilciclohex-1-enil) hexa-1 ,3,5-trienil] ciclohex-1-en-1-carboxaldehído	6.3	Alta				
2-[4-metil-6-(2,6,6-trimetilciclohex-1-enil) hexa-1 ,3,5-trienil] ciclohex-1-en-1-carboxaldehído	6.3	Alta				
2-[4-metil-6-(2,6,6-trimetilciclohex-1-enil) hexa-1 ,3,5-trienil] ciclohex-1-en-1-carboxaldehído	6.3	Alta				
Vitamina A aldehído	6.2	Alta				
Acido dodecanoico, éster, [1aR-(1a.alpha, 2.alpha, 5.beta, 8a.alpha, 9.alpha, 10a.alpha.....)] -	6.2	Alta				
7-isopropil-1-metil-, 2,3,4,4 a, 9,10,10 a-octahidrofenantreno	6.1	Alto				
Acido pimálico	5.5	Alta				
Butilhidroxitolueno - BHT	5.3	Alta				
Fenol, 2-metil-4-(1,1,3,3-tetrametil-butil)-	5.3	Alta				
Butilhidroxitolueno- BHT	5.3	Alta				
(2-dodecen-1-il) anhídrido succínico	5.1	Alta				
4 - (1,1,3,3-tetrametil-butil) fenol	5.0	Media-alta				
Acido ursodeoxicólico	4.9	Media-alta				
1,4-dimetil-7-isopropilazuleno	4.8	Media-alta				
Ftalato de di-n-butilo	4.7	Media-alta				
Ftalato de di-n-butilo	4.7	Media-alta				
L-lisina, N6-[(1,1-dimetil-etoxi) carbonil]-N2-[(9H-fluoren-9-ilmetoxi) carbonil] -	4.5	Media-alta				
Acido palústrico	4.5	Media-alta				
Etil-iso allocholate	4.3	Media-alta				
Etil-iso allocholate	4.3	Media-alta				
Etil-iso allocholate	4.3	Media-alta				
4H-tiopirano, 4 - (2,6-dimetil-4H-tiopiran-4-iliden) -2,6-dimetil-	4.0	Media-alta				
1,3-benzodioxol, 5 - [1 - [2 - (2-butoxi)etoxi] butil] -	3.6	Media-alta				
1,3-benzodioxol, 5 - [1 - [2 - (2-butoxi)etoxi] butil] -	3.6	Media-alta				
Ciclohexanona, 2-ciclohexilideno-	2.9	Media-baja				
7,7-dimetilbicyclo [2,2,1] hept- acetato de 2-il	2.7	Media-baja				
Androsta-5, 14-dien-17-ona, 3-hidroxi-	2.6	Media-baja				
5-hidroxi-metil-, 1,1,4-trimetil-un-6-metilideno-3, 4,5,7,8,8 naftalen-a-hexahidro-2H-2-ol	2.6	Media-baja				
Androsta-5, 14-dien-17-ona, 3-hidroxi-	2.6	Media-baja				
2-hidroxi-4 ,4,8-trimetiltriciclo [6,3,1,0 (1,5)] dodecan-9-ona	2.5	Media-baja				
Fenilalanina, ácido 4-amino-N-butiloxicarbonil-, éster t-butilo	2.4	Media-baja				
Phen-1 ,4-diol, 2,3-dimetil-5-trifluorometil-2,3-dimetil-5-(trifluorometil) benceno-1 ,4-diol	2.2	Media-baja				
4-Cianotofeno	2.1	Media-baja				
Acido 11,13-dihidro-tetradec-5-inoico, éster de metilo	2.1	Media-baja				
Butanico, éster, [1aR-(1a.alpha, 2.alpha, 5.beta, 8a.alpha, 9.alpha, 10a.alpha.....)] -	1.9	Media-baja				
2(3H)-benzotiazolona	1.8	Media-baja				
1H-inden-1-ona, 2,3-dihidro-; 1-Indanone	1.7	Media-baja				
4a-formil-7alpha-hidroxi-1-metil-8-metilideno-4aalpha, 4bbeta-qb-bane-1 alfa, ácido 10beta-dicarboxílico	0.7	Baja				
2-hidrobencyl alcohol	0.7	Baja				
1H-ciclopropa[3,4]benzo[1,2-E]azulen-9-il acetato	0.7	Baja				
Alcohol salicílico - 2 - (hidroximetil) fenol	0.7	Baja				
1H-ciclopropa[3,4]benzo[1,2-E]azulen-9-il acetato(1	0.7	Baja				
Ingol 12-acetato	0.5	Baja				
Bencenometanol, 4-hidroxi-	0.20	Baja				
Bencenometanol, 4-hidroxi-	0.20	Baja				
Acido 6-hidroxi-2-metil-4-oxo-1H-piridina-3-carboxílico-	-0.3	Baja				
Forbol	-0.8	Baja				
Forbol	-0.8	Baja				
1a,2,3,5a,6,9,10,10a-Octahidro-5,5a,6-trihidro-1,4-bis(hidroximetil)-1,7,9-trimetil-1H-2,8a-	-1.0	Baja				
1,1'(4-Metil-1,3-fenileno)bis[3'5'-(p-tolil)-1,3,4-tiad]	Sin información	Sin información				
4-(3,3-Dimetil-but-1-ynil)-4-hidroxi-2,6,6-trimetilic	Sin información	Sin información				

7.6.3 Análisis del riesgo de acuerdo a las categorías de toxicidad, bio-cumulación, potencial de bio-concentración y variación espacial para los compuestos orgánicos hallados en cinco estaciones de muestreo del Río Cauca.

Tabla 44. Análisis del riesgo por categorías de toxicidad, bio-acumulación, bio-concentración y variación espacial en la zona de estudio.

Nombre del compuesto	XlogP3-AA	Riesgo por Bio-acumulación en la fauna acuática	Escala colorimétrica del riesgo	Riesgo por Potencial de bio-concentración	Escala colorimétrica del riesgo	Categoría de toxicidad	Escala colorimétrica de toxicidad	Estación	Compuestos que se repiten en diferentes estaciones - variación espacial de algunos compuestos
1-Heptatriacotanol	18.7	Alta				Sin información		E2	
1-Nonacosano	15.3	Alta				No peligroso		E2	
Octadecano, 3-etil-5-(2-etilbutil) -	13.4	Alta				Sin información		E2	E2 y E5
Octadecano, 3-etil-5-(2-etilbutil) -	13.4	Alta				Sin información		E5	E2 y E5
4-hexil-1-(7-metoxycarbonilheptil) biciclo [4.4.0] deca-2,5,7-trieno	8.8	Alta				Sin información		E2	E2 y E5
4-hexil-1-(7-metoxycarbonilheptil) biciclo [4.4.0] deca-2,5,7-trieno-	8.8	Alta				Sin información		E5	E2 y E5
Acido Ciclopropanobutanoico, 2 - [(2 - [(2-penticiclopropil) metil] ciclopropil) metil] ciclopropil) metil] -, éster metílico	8.6	Alta				Sin información		E2	
Acido 1,2-bencenedicarbóxico, éster de diisocitilo	8.5	Alta				Categoría 1		E4	
7,8-Epoxilano-11-ol, 3-acetoxi-	8.2	Alta				Sin información		E3	E3, E4 y E5
7,8-Epoxilano-11-ol, 3-acetoxi-	8.2	Alta				Sin información		E4	E3, E4 y E5
7,8-Epoxilano-11-ol, 3-acetoxi-	8.2	Alta				Sin información		E5	E3, E4 y E5
Éster etílico del ácido palmítico	7.8	Alto				No peligroso		E3	
Éster etílico del ácido linoleico	7.3	Alta				No peligroso		E2	
Butil Ricinoleate	7.3	Alta				No peligroso		E2	
2-metil-2,3,13-octadecadienol	7.1	Alta				Sin información		E2	
2,4,7,14-tetrametil-4-vinil-triciclo [5,4,3,0 (1,8)] tetradecan-6-ol	6.6	Alta				Sin información		E4	E4 y E5
2,4,7,14-tetrametil-4-vinil-triciclo [5,4,3,0 (1,8)] tetradecan-8-ol	6.6	Alta				Sin información		E5	E4 y E5
2-[4-metil-6-(2,6,6-trimetilciclohex-1-enil) hexa-1,3,5-trienil] ciclohex-1-en-1-carboxaldehído	6.3	Alta				Sin información		E5	E3, E4 y E5
2-[4-metil-6-(2,6,6-trimetilciclohex-1-enil) hexa-1,3,5-trienil] ciclohex-1-en-1-carboxaldehído	6.3	Alto				Sin información		E3	E3, E4 y E5
2-[4-metil-6-(2,6,6-trimetilciclohex-1-enil) hexa-1,3,5-trienil] ciclohex-1-en-1-carboxaldehído	6.3	Alta				Sin información		E4	E3, E4 y E5
Vitamina A aldehído	6.2	Alta				Categoría 4		E1	
Acido dodecanoico, éster (1aR-(1a.alpha.,2.alpha.,5.beta.,5a.beta.,8a.alpha.,9.alpha.,10a.alpha.,.....)) -	6.2	Alta				Sin información		E4	
7-isopropil-1-metil-1,2,3,4,4a,9,10,10a-octahidrofenantreno	6.1	Alto				Sin información		E3	
Acido pimarico	5.5	Alta				Categoría 1		E5	
Butilhidroxitolueno - BHT	5.3	Alta				Categoría 2		E1	E1 y E3
Butilhidroxitolueno - BHT	5.3	Alto				Categoría 2		E3	E1 y E3
Fenol, 2-metil-4-(1,1,3,3-tetrametil-butil)-	5.3	Alta				Categoría 3		E2	
(2-dodecen-1-il) anhídrido succinico	5.1	Alta				Categoría 3		E1	
4-(1,1,3,3-tetrametil-butil) fenol	5.0	Media-alta				Categoría 1		E1	
Acido ursodeoxicólico	4.9	Media-alta				Categoría 5		E2	
1,4-dimetil-7-isopropilazuleno	4.8	Media-alta				Categoría 4		E2	
Falato de di-n-butilo	4.7	Media-alta				Categoría 1		E1	E1 y E3
Falato de di-n-butilo	4.7	Media-alta				Categoría 1		E3	E1 y E3
L-lisina, N6-[(1,1-dimetil-etoxi) carbonil]-N2-[(9H-fluoren-9-ilmetoxi) carbonil] -	4.5	Media-alta				No peligroso		E3	
Acido palústrico	4.5	Media-alta				Categoría 1		E2	
Etil-iso alcoholate	4.3	Media-alta				Sin información		E2	E1, E2, y E4
Etil-iso alcoholate	4.3	Media-alta				Sin información		E1	E1, E2, y E4
Etil-iso alcoholate	4.3	Media-alta				Sin información		E4	E1, E2, y E4
4H-tiopirano, 4 - (2,6-dimetil-4H-tiopiran-4-iliden) -2,6-dimetil-	4.0	Media-alta				Sin información		E4	
1,3-benzodioxol, 5 - [1 - [2 - (2-butoxi)etoxi] butil] -	3.6	Media-alta				Sin información		E3	E3 y E5
1,3-benzodioxol, 5 - [1 - [2 - (2-butoxi)etoxi] butil] -	3.6	Media-alta				Sin información		E5	E3 y E5
Ciclohexanona, 2-ciclohexilideno-	2.9	Media-baja				Sin información		E2	
7,7-dimetilbicyclo [2,2,1] hept-2-acetato de 2-il	2.7	Media-baja				Sin información		E1	
Androsta-5,14-dien-17-ona, 3-hidroxi-	2.6	Media-baja				Sin información		E2	E2 y E5
Androsta-5,14-dien-17-ona, 3-hidroxi-	2.6	Media-baja				Sin información		E5	E2 y E5
5-(hidroximetil) -1,1,4-trimetil-un 6-metilideno-3,4,5,7,8,8 naftalen-a-hexahidro-2H-2-ol	2.6	Media-baja				Sin información		E5	
2-hidroxi-4,4,8-trimetilbicyclo [6,3,1,0 (1,5)] dodecan-9-ona	2.5	Media-baja				Sin información		E1	
Fenilalanina, ácido 4-amino-N-butiloxycarbonil-, éster t-butilo	2.4	Media-baja				Sin información		E3	
Phen-1,4-diol, 2,3-dimetil-5-trifluorometil-2,3-dimetil-5-(trifluorometil) benceno-1,4-diol	2.2	Media-baja				Sin información		E3	
4-Cianotifendi	2.1	Media-baja				Categoría 4		E1	
Acido 11,13-dihidroxi-tetradec-5-inoico, éster de metilo	2.1	Media-baja				Sin información		E1	
Butanoico, éster, (1aR-(1a.alpha.,2.alpha.,5.beta.,5a.beta.,8a.alpha.,9.alpha.,10a.alpha.,.....)) -	1.9	Media-baja				Sin información		E5	
2(3H)-benzotiazolona	1.8	Media-baja				Categoría 4		E4	
1H-inden-1-ona, 2,3-dihidro-; 1-Indanone	1.7	Media-baja				No peligroso		E1	
4a-formil-7alpha-hidroxi-1-metil-8-metilideno-4aajpha,4bbeta-gibbano-1 alfa, ácido 10beta-dicarboxílico	0.7	Baja				Sin información		E2	
2-hidrobenczy alcohol	0.7	Baja				Categoría 3		E3	E3 y E5
2-hidrobenczy alcohol	0.7	Baja				Categoría 3		E5	E3 y E5
1H-ciclopropa[3,4]benzo[1,2-E]azulen-9-il acetato	0.7	Baja				Sin información		E5	E4 y E5
1H-ciclopropa[3,4]benzo[1,2-E]azulen-9-il acetato'	0.7	Baja				Sin información		E4	E4 y E5
Ingol 12-acetato	0.5	Baja				Sin información		E4	
Bencenometanol, 4-hidroxi-	0.20	Baja				Categoría 2		E1	E1 y E5
Bencenometanol, 4-hidroxi-	0.20	Baja				Categoría 2		E5	E1 y E5
Acido 6-hidroxi-2-metil-4-oxo-1H-piridina-3-carboxílico-	-0.3	Baja				Sin información		E3	
Forbol	-0.8	Baja				Sin información		E1	E1 y E3
Forbol	-0.8	Baja				Sin información		E3	E1 y E3
1a,2,5,5a,6,9,10,10a-Octahidro-5,5a,6-trihidroxi-1,4-bis(hidroximetil)-1,7,9-trimetil-1H-2,8a-	-1.0	Baja				Sin información		E4	
1,1'-(4-Metil-1,3-fenilene)bis(3-[5-(p-toil)]-1,3,4-tadi		Sin información	Sin información			Sin información		E1	
4-(3,3-Dimetil-but-1inil)-4-hidroxi-2,6,6-trimetilic		Sin información	Sin información			Sin información		E5	

En la Tabla 43, se registran las sustancias reportadas en las cinco estaciones, de la zona de estudio, con relación a las categorías de bio-acumulación y al potencial de bio-concentración de acuerdo al coeficiente de partición octanol-agua, tomado de la base de datos NCBI Pubchemcompound.

En este sentido, la estación 2 presentó las sustancias con mayor valor de bio-acumulación, y el mayor número de estas, correspondiente al 28.6%, seguido de la estación 5, con un 21.4 %, el otro 50%, se repartió entre las estaciones 3 y 4, con 17.8% cada una, y la estación 1, con el 14.2%. En cuanto, a sustancias con potencial de bio-concentración, la estación 2, tiene 33.3%, las estaciones 3 y 4, con 17.9%, y las estaciones 1 y 5, con el 15.4%. Lo anterior, muestra que las sustancias identificadas en la estación 2, son la que presentan un mayor riesgo de bio-acumulación, y de bio-concentración.

La tabla 44, relacionó las categorías de toxicidad, bio-acumulación, potencial de bio-concentración, y la variación espacial de las sustancias en la zona de estudio. Encontrando que el 63.2% de los compuestos no tienen ficha de seguridad MSDS, lo anterior, demostró que se desconoce en un porcentaje alto los efectos tóxicos, que puedan causar dichas sustancias al recurso hídrico y a los organismos acuáticos. La estación 2, presentó el 33.3% de sustancias con categoría de toxicidad 1.

Pero, se dispuso de la base de datos NCBI Pubchemcompound, que suministró los datos del XlogP3:AA, del 97% de las sustancias en estudio, esta información permitió conocer el potencial de bio-acumulación y bio-concentración de las sustancias, encontrando el 79.4% de las sustancias en categoría de bio-acumulación, alta, media alta y media baja, y un 57,4% con potencial de bio-concentración. En este sentido, estos porcentajes indican que existe riesgo alto de que estas sustancias se bio-acumulen y bio-concentren en organismos acuáticos.

Igualmente se observó que algunas de estas sustancias se repiten en dos y tres estaciones de muestreo, lo anterior, se denominó, variación espacial, encontrando el 20.6% de sustancias con estas características en la zona de estudio, en este sentido, la estación 5, presentó 71.4% de las sustancias, que varían en las estaciones, seguida de la estación 3, con un 50%.

Es importante destacar que la sustancia N-nonacosano, registrada en la estación 2, presenta un valor alto de bio-acumulación. Pero, la ficha de seguridad lo reporta como una sustancia no peligrosa, igual sucede con otras sustancias de la estación 2, lo que indica que falta estudiar el riesgo de toxicidad de estas sustancias, en un tiempo mayor que el que se realiza en los bioensayos, para correlacionar la toxicidad y los potenciales de bio-acumulación y bio-concentración.

8. DISCUSIÓN.

Los resultados encontrados en esta investigación, demostraron que las sustancias registradas en la zona de estudio, presentan riesgo de toxicidad, potencial de bio-acumulación, y de bio-concentración al recurso hídrico, la fauna acuática y la salud de la población. Igualmente, se encontró que la estación 2 (Canal – Sur Oriental), es la que presentó mayor riesgo por categoría de toxicidad, bio-acumulación y bio-concentración, también, en esta estación se encontraron las sustancias con mayor valor numérico de bio-acumulación y de potencial de bio-concentración, de acuerdo a los valores del coeficiente de partición octanol-agua, $X_{logP3:AA}$, de la base de datos NCBI Pubchemcompound. En el mismo sentido, es importante destacar que valores altos de bio-acumulación y de bio-concentración, corresponden en algunos casos, donde se obtuvo información de la ficha de seguridad MSDS, a la categoría de toxicidad, no peligrosa.

La anterior anomalía, ha sido estudiada en el documento de NACIONES UNIDAS, (2011). En el cual, se registra que compuestos como hidrocarburos volátiles o muy hidrófobos, es decir de muy baja solubilidad en agua, no registran datos de toxicidad en organismos, esta información corresponde a los compuestos identificados: n-nonacosano, Éster etílico del ácido palmítico, Éster etílico del ácido linoleico, y Butil Ricinoleate, con coeficiente de partición octanol-agua: 15.3, 7.8, 7.3 y 7.3, respectivamente, y todos ellos con categoría de toxicidad MSDS, como (no peligrosos). Pero, algunas investigaciones registran que estas sustancias son tóxicas.

En este sentido la base de datos TOXNET, registra información de artículos donde se evidencia la toxicidad, y bio-acumulación del n-nonacosano, en sedimentos, organismos acuáticos, terrestres y en el hombre. Brack *et al.* (1999), en Alemania, y Hyland *et al.* (1999), en Estados Unidos, evidenciaron toxicidad en sedimentos y organismos acuáticos. Halse *et al.* (1993), demostraron que la muerte de ganado de rara enfermedad, hace 50 años, se debió a la contribución del n-nonacosano, igualmente, se comprobó la muerte de humanos por este compuesto, por Rocchiccioli *et al.* (1987), y Salvayre *et al.* (1988). También, los investigadores Luthria & Sprecher (1994), descubrieron que el Éster etílico del ácido linoleico, se bio-acumula en ratas en la siguiente proporción: hígado 54%, riñón 37,4%, y corazón 35%. De otro lado, Hara *et al.* (1996), demostraron que los lípidos oxidados, como el linoleato de etilo oxidado, afectan el metabolismo cecal y pueden estar asociados con el cáncer de colon.

En cuanto al Butil Ricinoleate, La base de datos (NCBI PubChem compound, 2005), no registra información de bioactividad, ni sobre toxicidad del compuesto. Lo que indica, que faltan estudios sobre la toxicidad de este compuesto, dado su

potencial de bio-acumulación y bio-concentración. De otra parte, el compuesto Éster etílico del ácido palmítico, Saeed *et al.* (2012), lo registraron como inhibidor de células inflamatorias, también se demostró que tiene efecto hepatoprotector (Lu *et al.*, 2012). Este último, estaría de acuerdo con la información de las fichas MSDS, de sustancia con categoría de toxicidad no peligrosa, pero de acuerdo al valor del XlogP3, se bio-acumula y bio-concentra.

Para los compuestos registrados por las bases de datos MSDS, con toxicidad categoría 1, presentan valores del coeficiente de partición octanol-agua XlogP3:AA, mayores de 4, por lo tanto, tienen riesgo de bio-acumulación en las categorías alta y media alta, y con potencial de bio-concentración (NACIONES UNIDAS, 2011). Los compuestos son: Ácido 1,2-bencenodicarboxílico, éster de diisooctilo, Ácido pimárico, 4 - (1,1,3,3-tetrametil-butil) fenol, Ftalato de di-n-butilo y Ácido palústrico, con coeficiente de partición octanol-agua: 8.5, 5.5, 5.0, 4.7, y 4.5, respectivamente.

El compuesto, Ácido 1,2-bencenodicarboxílico, éster de diisooctilo, es un ftalato clasificado como disruptor endocrino. Se encontró que en el agua, la vida media de volatilización es de 4,3 años, y el Factor de Bio-concentración – FBC, en organismos acuáticos es alta (Toxnet Home. HSDS, 2012, November). También, se encontró en partes por trillón – ppt, haciendo parte de la cadena trófica en False Harbor, Vancouver, Columbia Británica. Mackintosh *et al.* (2004). De otra parte, Colón *et al.* (2000), estudiaron en Puerto Rico, el desarrollo prematuro de mama (Telarca), que es el crecimiento del tejido mamario en las niñas menores de 8 años de edad sin otras manifestaciones de la pubertad. Este estudio sugiere una posible asociación entre ftalatos con actividad estrogénica y antiandrogénica conocida, y la causa del desarrollo prematuro de mama en las niñas.

El Ácido pimárico, se encuentra en las aguas por vertimientos de las plantas de pulpa para papel. En estudio con peces (*Coregonus laietas*), expuestos a los efluentes diluidos de tres fábricas de pasta de celulosa en el sur del lago Saimaa, Finlandia. Se encontró aumento de los niveles de mRNA, lo que indica que estos efluentes tienen compuestos estrogénicos (Mellanen *et al.*, 1999). En el mismo sentido, en estudio de la concentración de Retene en la bilis del rutilo (*Rutilus rutilus*) y la perca (*Perca fluviatilis*), muestreado en sedimento de estaciones de muestreo entre 1 a 2 km aguas abajo de las fábricas de pulpa y papel, en un lago en Finlandia, encontró mayor concentración en rutilo, el cual se alimenta de organismos bentónicos, que en la perca (Leppanen & Oikari, 1999). De otra parte, Kato *et al.* (2012), encontraron que el ácido pimaradienoico, es genotóxico, dado que en ensayo en vivo, se observó un aumento significativo en la frecuencia de daño del ADN, en hepatocitos de animales tratados con la dosis más alta (80mg/kg) en comparación con el grupo de control.

El 4 - (1,1,3,3-tetrametil-butil) fenol, es un intermediario de diversos productos químicos, en aguas residuales puede provenir de la degradación del tensoactivo no-iónico nonilfenol, es también un reconocido disruptor endocrino. Dado que su valor del Factor de Bioconcentración - FBC es de 6000, se espera que este compuesto se bioacumule en los organismos acuáticos. También en estudio donde se suministró en la dieta a ratas, valores de 300 ppm y superiores, se observaron signos tóxicos que incluyen disminución de peso. Para 3000 ppm, las hembras redujeron los valores de hematocrito y tiroxina. (TOXNET Home-HSDB, November 2012). Los investigadores (Lee & Choi, 2013), estudiaron el efecto endocrino en las células de cáncer de mama humano, concluyendo que este compuesto a concentraciones de 10^{-6} M, puede acelerar la proliferación de células de cáncer de mama.

Para el Ftalato de di-n-butilo, la base de datos (TOXNET Home-HSDB, 2013), registró valores de Bioconcentración - FBC experimentales de ftalato de dibutilo en peces: *Pimephales promelas* de 12, 167 y 172; *Cyprinus carpio* de 3.6 y bluegill fish de 117; en ostras de 22 y 42; en camarones de 1500, 31 y 3; en otros crustáceos, insectos y algas, valores de 662, 624 y 3399 respectivamente. También Scott *et al.* (1987), encontraron absorción percutánea de una serie de ésteres de ftalato de dimetilo, ftalato de dietilo, ftalato de dibutilo, y ftalato di-(2-etilhexil), a través de membranas epidérmicas humanas y de rata.

Para el Ácido palústrico, NCBI. PubChem compound (2005), registra información de dos bioensayos, ambos inactivos, y no tiene información sobre toxicidad del compuesto. Para los compuestos anteriores, excepto para el Ácido palústrico, existe una correlación entre la toxicidad y los valores del coeficiente de partición octanol-agua.

Para compuestos registrados por la base de datos MSDS, con toxicidad categoría 2. Como: Butilhidroxitolueno – BHT, y Bencenometanol, 4-hidroxi-, con coeficiente de partición octanol-agua de 5.3 y 0.20. El primero con bio-acumulación alta, con potencial de bio-concentración, y por arriba del 66.7% de compuestos de toxicidad categoría 1. Pero, menor que el 25% categoría 4, y del 66.7% de la categoría no peligrosos. El segundo, tiene los potenciales de bio-acumulación y bio-concentración más bajo de todos los compuestos, que tiene ficha MSDS. La base de datos NCBI Pubchemcompound, registró la siguiente información de estos compuestos.

El Butilhidroxitolueno (BHT) se utiliza como un antioxidante para grasas y aceites o en material de envasado para alimentos que contienen grasa. Su función es evitar que las sustancias grasas se acidifiquen, se rancien, y finalmente entren en proceso de pudrición. De acuerdo con TOXNET (NLMUS, 1993). En estudios en animales se ha encontrado que el BHT se absorbe fácilmente. Hay algo de

deposición en el tejido adiposo después de altas dosis administradas a ratas. En el mismo sentido, los estudios de Kouki-Inai *et al.*, (1988), mostraron que el BHT está relacionado con la aparición de tumores en ratas, los cuales están relacionados con el tiempo y porcentaje de administración de este compuesto en la dieta.

Los investigadores Selassie *et al.* (2005), estudiaron el efecto de la concentración mínima para inducir la actividad de la caspasa, en un 50% de 51 fenoles sustituidos en una línea celular de leucemia murina (L1210), los resultados mostraron que la mayoría de estos fenoles, a concentraciones mínimas contribuyen con una respuesta de citotoxicidad. Chihoung *et al.* (1992), investigaron los efectos antioxidantes de los fenoles BHA, BHT y PG con relación al índice de mutagenicidad de las aminas heterocíclicas MeIQ, IQ, y MeIQx, mediante el test de Ames. Este trabajo, confirmó que el BHT, no presenta actividad antimutágena, contrariamente aumenta la respuesta del test de Ames, en presencia de activador enzimático.

Para el compuesto Bencenometano, 4-hidroxi, Ball *et al.* (1984), registraron respuesta negativa con el test de Ames, usando la cepa TA100, sin activador enzimático, con una dosis entre 50-2000µg por placa. Es importante resaltar que este ensayo, no es concluyente para el test de Ames, ya que faltaría probar con las otras cepas de ames (TA97a, TA98 y TA102), además de realizar análisis con activador enzimático (S9) con cada una de las cepas de dicho test. Este compuesto registró toxicidad alta, pero su potenciales bio-acumulación y bio-concetración son bajos, lo anterior, es contradictorio.

Compuestos clasificados con toxicidad categoría 3, de acuerdo a los datos de la MSDS: Fenol, 2-metil-4-(1,1,3,3-tetrametil-butil)-, (2-dodecen-1-il) anhídrido succínico, y 2-hydrobenzil alcohol, con coeficiente de partición octanol-agua: 5.3, 5.1 y 0.7, respectivamente.

La base de datos NCBI Pubchemcompoud no registra información de toxicidad de los compuestos: Fenol, 2-metil-4-(1,1,3,3-tetrametil-butil)- y (2-dodecen-1-il) anhídrido succínico, lo anterior es ratificado por la compañía SIGMA-ALDRICH, cuando asegura “Según nuestras informaciones, creemos que no se han investigado adecuadamente las propiedades químicas, físicas y toxicológicas” del compuesto (2-dodecen-1-il) anhídrido succínico. Para estos compuestos, los valores de XlogP3, los clasifica como bio-acumulables y con potencial de bio-concentración. Caso contrario, para el 2-hydrobenzil alcohol conocido por sus propiedades anti-inflamatorias y por su contribución a la mejoría de los trastornos neuro-siquiátricos tales como la depresión, en asocio con la administración de otras drogas (Ulrich-Merzenich *et al.*, 2012), igualmente se ha estudiado su efecto inhibidor de la polimerasa del virus de la poliomiélitis (Campagnola *et al.*, 2011), es

igualmente efectivo su uso asociado a otros medicamentos contra la malaria (Yuan *et al.*, 2011), es también conocido por sus efectos antioxidantes (Dhiman *et al.*, 2009).

La Vitamina A aldehído, clasificada con categoría de toxicidad 4. Pero, su coeficiente de partición octanol-agua de 6.2, lo sitúa por arriba del 83.3% de los compuestos con categoría 1, y del 100% de los compuestos categoría 2,3 y 5.

Herrmann (1995), estudio los efectos teratogénicos de la Vitamina A aldehído y ocho sustancias químicamente relacionados, en el pez cebrá, y encontró que estas sustancias generan malformaciones tales como edema, deformidades cerebrales (anophthalmia, microcefalia y acefalia), la duplicación de los placodesóticas y otolitos, y una cola más corta y curvada. De otra parte, Bagnasco & Vainio (1999), a partir de una revisión de una base de datos de 500 estudios, concluyen que los carotinoides y vitamina A no inducen efectos genotóxicos. Por el contrario, muestran algunos mecanismos que desempeñan un papel de protección en la promoción y progresión de tumores.

El compuesto Ácido ursodeoxicólico, clasificado con categoría de toxicidad 5, y con coeficiente de partición octanol-agua de 4.9, posee categoría de bio-acumulación media-alta, con potencial de bio-concentración y por arriba del 50% de los compuestos categoría 1,2 y 3, el 75% de categoría 4, y el 33% de los no peligrosos. Watabe & Bernstein (1985), registraron respuesta positiva al test de Ames. De otra parte, Earnest *et al.* (1994), lo registran como: citoprotector, anti-apoptóticos, inmunomoduladora y colerético. En el mismo sentido, este compuesto presenta 707 bioensayos de los cuales 11 son positivos, de estos se pueden destacar dos trabajos que evalúan la citotoxicidad en células humanas, de esta sustancia y sustancias con características similares en cuanto a la protección contra el cáncer. (NCBI PubChem BioAssay, 2001).

En la zona de estudio se evidenció variación espacial de algunos de los compuestos, en dos y tres estaciones (Tabla 43). Tres Compuestos que varían entre tres estaciones: 7,8-Epoxilano-11-ol, 3-acetoxi-, 2-[4-metil-6-(2,6,6-trimetilciclohex-1-enil) hexa-1 ,3,5-trienil] ciclohex-1-en-1-carboxaldehído, Etilisovalcolato; todos ellos bio-acumulables y con potencial de bio-concentración, y once compuestos que varían entre dos estaciones: Octadecano,3etil-5-(2-ethylbutil)-, 4-hexil-1-(7-metoxycarbonilheptil) biciclo [4.4.0] deca-2 ,5,7-trieno, 2,4,7,14-tetrametil-4-vinil-triciclo [5.4.3.0 (1,8)] tetradecano-6-ol, Butilhidroxitolueno – BHT, Ftalato de di-n-butilo, 1,3-benzodioxol, 5 - [1 - [2 - (2-butoxi) etoxi] butil]-, Androsta-5 ,14-dien-17-ona, 3-hidroxi-, 2-hidrobencil alcohol, 1H-ciclopropa[3,4]benzo[1,2-E]azulen-9-yl acetato, Bencenometanol, 4-hidroxi-, y Forbol.

El 45% de estos compuestos figuran con potencial de bio-concentración y bio-acumulación alta y media alta, la estación 5, presenta el 71.4% de los compuestos que varían espacialmente en la zona de estudio. En este sentido, La literatura, registra trabajos en ríos, en los cuales existe variación espacial de compuestos orgánicos, entre: farmacéuticos, de cuidado personal, hidrocarburos aromáticos policíclicos (HAP) y pesticidas. (Gómez *et al.*, 2012; Zhang *et al.*, 2012; Bu *et al.*, (2013)). Debido a vertimientos domésticos, industriales y agrícolas. De acuerdo a Gómez *et al.* (2012) La distribución espacial de los contaminantes indica que los contaminantes estudiados persisten a lo largo del río.

De los 68 compuestos estudiados en la zona de estudio, 25 registran ficha de seguridad MSDS, y 43 no la tienen, correspondiendo al 63.2% de las sustancias sin registro de la categoría de toxicidad. Pero, el 97 % de estas sustancias registra el valor del coeficiente de partición octanol-agua $X_{logP3:AA}$, o modelo computacional de estructura química, actividad biológica – QSAR, que da a conocer, la categoría de bio-acumulación y el potencial de bio-concentración. Los modelos QSAR, han sido utilizados para la gestión del riesgo de las sustancias químicas peligrosas, por las autoridades reguladoras, en la Unión Europea, sugeridos por el Reglamento REACH, “Registro, evaluación, autorización y restricción de sustancias químicas” (Gramatica, 2007). También se utilizaron, por primera vez en la zona de estudio para el “Análisis del riesgo potencial por compuestos orgánicos presentes en aguas del Río Cauca, a su paso por la zona urbana de la ciudad de Cali (Colombia)”.

El trabajo de investigación del río Cauca, aplicó diferentes metodologías para estudiar la mutagenicidad, y dado que la contaminación vienen de diversas fuentes, se cuantificaron metales pesados y pesticidas, y además se identificó en modo Scan compuestos orgánicos con GC-MS, los que de acuerdo a la información de las bases de datos Pubchemcompound, las fichas de seguridad, y los valores QSAR, presentan riesgo potencial, de producir mutagenicidad, disrupción endocrina, y cáncer, entre otros. En el mismo sentido, Viganò *et al.*, (2008), estudiaron la genotoxicidad de compuestos disrutores endocrinos como: estrona (E1), 17 bestradiol (E2), estriol (E3), 4 - nonilfenol (NP), 4 - terc-octilfenol (t-OP), bisfenol A (BPA), en sedimentos de un tributario del río Po, y realizaron análisis de GC-MS en modo SCAN, el cual identificó otros contribuyentes potenciales de producir disrupción, tales como los ftalatos, e isómeros octilfenol. Igualmente, Yea *et al.* (2014), analizaron la genotoxicidad de 16 fuentes de agua, entre ríos y reservorios, en China, e identificaron el o-fenilfenol como la causa principal de los efectos que deterioran el ADN mientras que los Hidrocarburos Aromáticos Policíclicos - HAP, pesticidas, antraquinona y fenoles, se identificaron como agentes que dañan los cromosomas. En concordancia con estos resultados,

los autores concluyeron, que una combinación de la pruebas para detectar daños al ADN, y al cromosoma podrían utilizarse como una herramienta para la evaluación y clasificación de genotoxicidad de mezclas complejas, y los genotóxicos potenciales pueden ser identificados inicialmente con información adicional de la técnica GC-MS, en modo SIM, y SCAN, y usando los modelos QSAR.

De igual manera, en la investigación del río Cauca, Larmat *et al.*, (2009); Sierra *et al.*, (2012), en la zona de estudio, registraron el valor más alto de mutagenicidad en época de invierno en la estación 2, Canal Interceptor CVC - Sur o Canal Navarro, lo anterior, coincide con lo encontrado en este estudio, en el cual, se identificó la estación 2, como la que presenta el mayor riesgo, y también cuenta con los compuestos con mayor riesgo: 1-Heptatriacotanol, n-nonacosano, Octadecano, 3-etil-5-(2-etilbutilo)-. El resultado anterior, se obtuvo al aplicar la metodología diseñada para este trabajo, la cual, parte de la identificación de los compuestos orgánicos, por la técnica GC-MS en modo SCAN, y revisa cada uno de los compuestos identificados en: bases de datos, fichas de seguridad y el modelo QSAR, de la base de datos validada Pubchemcompound. Lo anterior, permitió clasificar el riesgo ambiental potencial de cada una de los compuestos, y de cada estación de muestreo, de acuerdo a la información de la revisión bibliográfica, y los valores de bio-concentración y bio-acumulación.

En este sentido, y con la información de las bases de datos, que registran que los fenoles son disruptores endocrinos, como producto de este trabajo, se presentó en el XLVIII, Congreso Nacional de Ciencias Biológicas, el trabajo de investigación. "ANÁLISIS DEL RIESGO AMBIENTAL POR ALQUIL-FENOLES PRESENTES EN AGUAS DEL RÍO CAUCA A SU PASO POR LA ZONA URBANA DE LA CIUDAD DE CALI". Anexo 7.

9. CONCLUSIONES.

A partir de los resultados encontrados en este estudio se pudo demostrar que en la zona de estudio, la estación de muestreo 2, (Desembocadura Canal Interceptor CVC - Sur), se encontraron los compuestos con mayor categoría de toxicidad, de bio-acumulación, y con mayor potencial de bio-concentración. Por tanto, en la zona de estudio, es la estación de muestreo, que presenta mayor riesgo al recurso hídrico, la biodiversidad acuática y a la población. También se encontró, el compuesto con mayor valor de coeficiente de partición octanol – agua XlogP3:AA, con un valor de 18.7, el compuesto 1-Heptatriacotanol, no registra información de las bases de datos MSDS, ni de la bioactividad. Lo anterior, lo convierte en un compuesto de mayor riesgo, dado su alto valor de bio-acumulación y bio-concentración.

En la zona de estudio, se analizó el riesgo potencial por 68 compuestos orgánicos, de los cuales el 63.2%, no registraron ficha de seguridad. Pero, se encontraron el 97% de los valores del coeficiente de partición XlogP3:AA. Al analizar estos resultados, se encontró que compuestos con la categoría de toxicidad no peligroso, correspondían a valores altos de categoría de bio-acumulación y con potencial de bio-concentración. Los compuestos con categoría de toxicidad 1, se ajustaron mejor a los valores del coeficiente de partición octanol-agua, hallando entre estos, fenoles y ftalatos, los cuales son reconocidos disruptores endocrinos, las categorías 2, 3, 4, y 5, para algunos compuestos no se ajustaron a los valores de XlogP3:AA, y tampoco a un orden de acuerdo a la categoría de toxicidad. Entre estos compuestos se encontraron algunos registrados como: disruptores endocrinos, cancerígenos, genotóxicos y mutagénicos.

El análisis de los valores del coeficiente de partición octanol-agua, mostró dos aspectos de los compuestos con respecto a cada estación de muestreo: (i) para 43 compuestos clasificados en las categorías alta y media alta, la distribución por estaciones fue: E2 > E3 > E4 = E5 > E1, con 13, 8, 7, 7 y 6, compuestos respectivamente, demostrando en este caso que la estación 2, es la que presenta el mayor número de compuestos con mayor valor de bio-acumulación y potencial de bio-concentración y (ii) algunos compuestos se repiten entre estaciones, correspondiente a una “variación espacial”: (a) tres compuestos que varían entre tres estaciones, con altos valores de bio-acumulación y con potencial de bio-concentración, (b) once compuestos que varían entre dos estaciones, cinco de ellos con altos valores de bio-acumulación y con potencial de bio-concentración, y seis con valores bajos. Siendo la variación espacial por estación para todos los compuestos la siguiente: E5 > E3 > E4 = E1 > E2, con 10, 7, 5, 5 y 4, respectivamente, siendo la estación 5, la que presenta el mayor número de

sustancias que varían espacialmente, y la estación 2 la de menor movilidad. Esta variación espacial tiene en común el vertimiento de aguas residuales domésticas.

Los resultados de este trabajo, concuerdan con los registrados en el estudio, **“Evaluación de la actividad mutagénica del Río Cauca en el área urbana de la Ciudad de Cali - Colombia, por medio del test de Ames”**, en el cual se registró que la estación 2, es la que presenta mayor valor de mutagenicidad en la época de invierno, y en el estudio actual, se comprobó que la estación 2, y los compuestos identificados en ella, presentan el mayor riesgo potencial ambiental. Este resultado, está de acuerdo, con los resultados reportados en la literatura, de estudios, que buscan correlacionar respuestas de mutagenicidad, genotoxicidad, carcinogenicidad, entre otros, con análisis químico, en muestras ambientales.

Se debe planificar e implementar un programa de monitoreo, para evaluar, analizar y mitigar el riesgo por compuestos orgánicos en la zona de estudio, justificado en el riesgo de estos compuestos al recurso hídrico, a la biodiversidad acuática, y al 80% de la población que se surte de agua potable, del Río Cauca, en la zona de estudio. Teniendo en cuenta que en este estudio, se demostró, que el mayor riesgo por sustancias orgánicas, se debe a la estación de muestreo 2, (Desembocadura Canal Interceptor CVC - Sur), el cual vierte aguas residuales y lixiviados del antiguo basuro de navarro, a escasos kilómetros de la Bocatoma de Planta de Agua Potable Puerto Mallarino. Este programa debe estar acompañado de análisis de cromatografía acoplada a masas, identificación de los vertimientos de agua residual doméstica, industrial, y agrícola, e inventario de los insumos químicos empleados en la industria y la agricultura.

10. BIBLIOGRAFÍA

Alcaldía Municipal de Popayán (2002). Plan de Ordenamiento Territorial de Popayán, Cauca 2002-2006. Popayán (Colombia), 552 p.

Anonymous. (2005). Source: SIDS. Screening Information Data Set for High Production Volume Chemicals, Document Number: RISKLINE/2006100051, 185 p.

APHA, AWWA, WPCF. (1992). Métodos normalizados para el análisis de aguas potables y residuales. Madrid: Ediciones Díaz de Santos.

Apollo Scientific Limited, Material Safety Data Sheet. Product name: 4-Thiobenzonitrile. Version 2. Revision Date 18/08/2011, 6 p.

Arizabaleta, C.A., Tascón, C.A., Soto-Duque, A. & Larmat, F.E. (2008). Determinación de mercurio, plomo y cadmio en solución acuosa por voltamperometría de redisolución anódica usando electrodos de platino y carbón vitrificado. XV Congreso de Química, Bogotá D.C., Octubre. 2008.

Arizabaleta, C.A., Tascón, C.A., Correa, W., Soto-Duque, A. & Larmat, F.E. (2008). Determinación de metales pesados en aguas del Río Cauca en la zona urbana de la ciudad de Cali por voltamperometría de redisolución anódica. VIII Seminario Colombiano de Limnología y I Reunión Internacional de Cuencas Bajas y Zonas Estuarinas. Cali (Valle) Colombia, Noviembre 2008.

Bartolomé M del C, (2004). Valoración del riesgo toxicológico sobre larvas de “*Artemia*” de desinfectantes utilizados en torres de refrigeración. Tesis de Doctorado. Universidad Complutense de Madrid. Facultad de Veterinaria. Madrid (España), 202 p.

Barba-Ho L.E. (1994). Contaminación del Río Cauca por residuos de pesticidas. *In:* Memorias II Simposio Internacional y III Nacional. “Efectos de los plaguicidas sobre el ambiente y Salud Humana”. Universidad Nacional de Colombia, Sede Palmira (Valle). RAPAL-MIRA, Red de Acción Contra Plaguicidas – América Latina. SENA: 54-65.

Bagnasco M. & Vainio H. 1999. Modulation of genotoxic and related effects by carotenoids and vitamin A in experimental models: mechanistic issues. *Mutagenesis*, 14 (2): 153-172.

Ball J.C., Foxall-Vanaken S. & Jensen T.E. (1984). Mutagenicity studies of p-substituted benzyl derivatives in the Ames salmonella plate-incorporation assay; *Mutat. Res.*, 138 (2-3): 145-151.

Belalcázar-Martínez J.E., Páez M.M.I. & Granada L.A. (1999). Determinación de Clorpirifos en aguas del Río Cauca por cromatografía de gases con detector ECD. Tesis de Grado. Universidad del Valle. Facultad de Ciencias. Departamento de Química.

Besse P., Combourieu B., Boyse G., Sancelme M., De Wever H. & Delort A.M. (2001). Long-range (1)H-(15)N heteronuclear shift correlation at natural abundance: a tool to study benzothiazole biodegradation by two *Rhodococcus* strains. *Appl. Environ. Microbiol.*, 67 (4): 1412-1417.

Brack W., Altenburger R., Ensenbach U., Moeder M., Segner, H. & Schueuermann G. (1999). Bioassay-directed identification of organic toxicants in river sediment in the industrial region of Bitterfeld (Germany) A contribution to hazard assessment. *Archives of Environmental Contamination and Toxicology*, 37 (2): 164-174.

Bouaid A. (2001). Nuevos métodos de tratamiento de muestra para la preconcentración, estabilización y determinación de pesticidas por cromatografía de gases. Memoria para optar al Grado de Doctor. Universidad Complutense de Madrid. Facultad de CC Química. Madrid (España). 244 p. ISBN: 84-669-2700-X.

Bouzide A., Sauvé G. & Yelle J. (2005). Lysine derivatives as potent HIV protease inhibitors. Discovery, synthesis and structure-activity relationship studies. *Bioorg. Med. Chem. Lett.*, 15 (5): 1509-1513.

Bu Q., Wang B., Huang J., Deng S. & Yu G. (2013). Pharmaceuticals and personal care products in the aquatic environment in China: A review. *Journal of Hazardous Materials.*, Volume 262, 189–211.

bvsde.paho.org. (2005). Curso de autoinstrucción en evaluación de riesgos. Evaluación de Riesgos Ambientales. ANEXO 4. Evaluación de la distribución ambiental: uso de modelos para este fin. Disponible en: <http://www.bvsde.paho.org/tutorial/ambientales/anexo4.html>

Cali, Datos y Cifras. (1998). Alcaldía de Santiago de Cali. Departamento Administrativo de Planeación. Unidad de Sistemas de Información para la Planificación y Técnicas cuantitativas. Cali (Colombia).

Cali en Cifras. (2012). Alcaldía Santiago de Cali. Departamento Administrativo de Planeación. Cali (Colombia), 181 p.

Cansyn Chemical Corp. (2010). Material Safety Data Sheet. Product name: Palustric acid. R006. Revision Date 01 January, 2 p.

Campagnola G., Gong P. & Peersen O.B. (2011). High-throughput screening identification of poliovirus RNA-dependent RNA polymerase inhibitors. *Antiviral Res.*, 91 (3): 241-251.

Colón I., Caro D., Bourdony C.J. & Rosario O. (2000). Identification of phthalate esters in the serum of young Puerto Rican girls with premature breast development. *Environ. Health Perspect.*, 108 (9): 895-900.

Comuna 7. (2012). Panorama Ambiental. Alcaldía de Santiago de Cali Departamento Administrativo de Gestión del Medio Ambiente, DAGMA. Recuperado el 12 de Octubre de 2013. Disponible en: <http://www.cali.gov.co/publico2/gobierno/dagmaweb/comuna7.htm>

CONPES. 3624. (2009). Consejo Nacional de Política Económica y Social. República de Colombia. Departamento Nacional de Planeación. Programa para el saneamiento, manejo y recuperación ambiental de la cuenca alta del Río Cauca. Bogotá D.C., 60 p.

Corporación Autónoma Regional del Valle & Universidad del Valle. (2007). El Río Cauca en su Valle Alto: Un aporte al conocimiento de uno de los ríos más importantes de Colombia. Publicaciones CVC-Universidad del Valle, Cali (Colombia), 400 p.

Correa, W.A., Soto-Duque, A. & Larmat, F.E. (2008a). Cuantificación de mercurio por espectrometría de absorción atómica en aguas del Río Cauca en la zona urbana de Cali. XV Congreso de Química, Bogotá D.C., Colombia, Octubre 2008.

Correa, W.A., Sánchez, R., Soto-Duque, A., Jimenez-Botero, G.A. & Larmat, F.E. (2008b). Evaluación de los niveles de cromo, plomo y cadmio en aguas del río Cauca en la zona urbana de Cali por espectrometría de absorción atómica. XV Congreso de Química, Bogotá D.C., Colombia. Octubre. 2008.

Cheng T., Zhao Y., Li X., Lin F., Xu Yong, Z.X., Li Y. & Wang R. (2007). Computation of Octanol-Water Partition Coefficients by Guiding an Additive Model with Knowledge. *J. Chem. Inf. Model.* 47, 2140-2148

Chihoung C., Pearson A.M. & Gray J.I. (1992). Effects of synthetic antioxidants (BHA, BHT and PG) on the mutagenicity of IQ-like compounds. *Food Chemistry*, 43 (3): 177-183.

Cosnefroy A., Brion F., Maillot-Maréchal E., Porcher J.M., Pakdel F., Balaguer P. & Aït-Aïssa S. (2012). Selective activation of zebrafish estrogen receptor

subtypes by chemicals by using stable reporter gene assay developed in a zebrafish liver cell line. *Toxicol Sci.*, 125 (2):439-449.

De Wever, H., Vereecken K., Stolz A. & Verachtert H. (1998). Initial transformations in the biodegradation of benzothiazoles by *Rhodococcus* isolates. *Appl. Environ. Microbiol.*, 1998 Sep; 64 (9):3270-3274.

Dhiman S.B., Kamat J.P. & Naik D.B. (2009). Antioxidant activity and free radical scavenging reactions of hydroxybenzyl alcohols. *Biochemical and pulse radiolysis studies. Chem. Biol. Interact.*, 2009 Dec. 10; 182 (2-3): 119-1127.

Dang Z. (2010). Comparison of relative binding affinities to fish and mammalian estrogen receptors: the regulatory implications. *Toxicol Lett.*, 192 (3): 298-303.

Earnest D.L., Holubec H., Wali, R.K., Jolley, C.S., Bissonette, M., Bhattacharyya, A.K., Roy, H., Khare, S. & Brasitus, T.A. (1964). Chemoprevention of azoxymethane-induced colonic carcinogenesis by supplemental dietary ursodeoxycholic acid. *Cancer Res.*, 54 (19): 5071-5084.

ECHA (2012). Guía práctica 5: Cómo comunicar los análisis (Q)SAR. Agencia Europea de Sustancias y Mezclas Químicas. Helsinki, Finlandia.

EMCALI. (2013). Recuperado el 25 de Septiembre de 2013. Disponible en: <http://www.emcali.com.co/web/guest/nuestra-emcali/calidad/acueducto>

El País. (2007). Cali. Medio Ambiente. Los Ríos de Cali matan al Cauca. Recuperado el 2 de Octubre de 2013. Disponible en: <http://historico.elpais.com.co/paionline/calionline/notas/Noviembre182007/cali02.html>.

El Pueblo. (2012). Con todo el poder de la información. Recuperado el 12 de Octubre de 2013. Disponible en: <http://elpueblo.com.co/gobernacion-y-mintransporte-invertiran-en-puente-de-juanchito/>

Ferreira J., Coloma L., Fones E., Letelier M.E., Repetto Y., Morello A. & Aldunate J. (1988). Source effects of t-butyl-4-hydroxyanisole and other phenolic antioxidants on tumoral cells and *Trypanosoma* parasites. *FEBS Lett.* 1988, Jul 18; 234(2):485-8. [FEBS letters]. Document Number: medline/3292295.

Fiori J., Teti G., Gotti R., Mazzotti G. & Falconi M. (2010). Cytotoxic activity of guaiazulene on gingival fibroblasts and the influence of light exposure on guaiazulene-induced cell death. *Toxicol In Vitro*, 25 (1): 64-72.

Fischer G.R. (1990). La problemática de los plaguicidas en Latinoamérica. *In: Memorias I Simposio Internacional y II Nacional. "Plaguicidas, Medio Ambiente y*

Salud Humana". Universidad Nacional de Colombia, Sede Palmira. RAPAL-MIRA, Red de Acción Contra Plaguicidas – América Latina. SENA. pg. 69.

Gómez M.J, Herrera S., Solé D., García-Calvo E. & Fernández-Alba A.R. (2012). Spatio-temporal evaluation of organic contaminants and their transformation products along a river basin affected by urban, agricultural and industrial pollution. *Science of The Total Environment*. Volume 420, 134–145.

Gramatica P. (2007). Principles of QSAR models validation: internal and external. *QSAR & Comb. Sci.*, 26: 694-701.

Halse K., Solheim E. & Nordstoga K. (1993). Pathological hepatic accumulation of long-chain n-alkanes ("paraffin liver") in cows (Harbitz and Fölling, 1940). An overlooked discovery. Description of lesions and identification of alkanes. *APMIS: Acta Pathologica, Microbiologica, et Immunologica Scandinavica*, 101 (6): 430-436.

Hara H., Miyashita K., Ito S. & Kasai T. (1996). Oxidized ethyl linoleate induces mucosal hypertrophy of the large intestine and affects cecal fermentation of dietary fiber in rats. *J. Nutr.*, 126 (4): 800-806.

Hellar-Kihampa H., De Wael K., Lugwisha E., Malarvannan G., Covaci A. & Van Grieken R. (2013). Spatial monitoring of organohalogen compounds in surface water and sediments of a rural–urban river basin in Tanzania. *Science of the Total Environment.*, 447: 186-197.

Hidrobo-Libreros, G., Bravo, E., Benítez, N. Soto, A. & Larmat, F. (2007). Detección de agentes mutagénicos mediante el test de Ames en aguas del Río Cauca en el municipio de Cali. *Memorias del VII Congreso Latinoamericano de Mutagénesis, Carcinógenesis y Teratogénesis Ambiental*. Cartagena de Indias (Bol.) Colombia.

Hidrobo-Libreros, G., Bravo, E. Soto-Duque & F.E. Larmat, F. (2007). **Detección de agentes mutágenicos mediante el test *Salmonella* / Microsomas en aguas del Río Cauca en el municipio de Cali. IV Seminario de Tópicos actuales de Investigación en Genética & I Seminario de Microbiología y Biotecnología de Microorganismos. Cali (Valle) Colombia, Septiembre.**

Hidrobo-Libreros, G., Bravo, E., Soto-Duque, Larmat, F.E. & Benítez, N. (2007c). Evaluación de mutagénesis usando el test de microsomas y *Samonella* en extractos de muestras del Río Cauca. Benítez. *Memorias del XLII Congreso Nacional de Ciencias Biológicas*. Barranquilla (Atl.) Colombia, Octubre de 2007.

Hidrobo-Libreros, G., Bravo, E., Soto-Duque, A., Larmat, F.E. & Benítez, N. (2008a). El problema de la contaminación con sustancias mutagénicas en aguas superficiales: el caso de la detección de agentes mutagénicos mediante el test de

Ames en el Río Cauca. Memorias del XLIII Congreso Nacional de Ciencias Biológicas. Armenia (Quindío) Colombia.

Hidrobo-Libreros, G., Bravo, E., Soto-Duque, A., Benítez, N. & Larmat, F.E. (2008b). Detection of mutagenic agents by means of the Ames test in waters of the Cauca River in the city of Cali, Colombia. Pittsburgh Conference, New Orleans (USA), 2008.

Herrmann K. 1995. Teratogenic effects of retinoic acid and related substances on the early development of the zebrafish (*Brachydanio rerio*) as assessed by a novel scoring system. *Toxicology In Vitro*, 9 (3): 267-283.

Hyland J.L., Van Dolah R.F. & Snoots T.R. (1999). Predicting stress in benthic communities of southeastern U.S. estuaries in relation to chemical contamination of sediments. *Environmental Toxicology and Chemistry*, 18 (11): 2557-2564.

Kato F.H., Viana NI, Santini C.B., de Souza C.G., Veneziani R.C., Ambrósio S.R., Tavares D.C. (2012). Assessment of the in vitro and in vivo genotoxic and antigenotoxic effects of pimaradienoic acid in mammalian cells. *Mutat Res.*, 749 (1-2): 87-92.

Kouki-Inai, T., Kobuke, S., Nambu, T., Takemoto, E., Kou, H., Nishina, M.F., Shoji, Y., Shin-ichi, S., Takafumi, T., Kenji, H. & Shoji, T. (1988). Hepatocellular Tumorigenicity of Butylated Hydroxytoluene Administered Orally to B6C3F1 Mice. *Cancer Science*, 79 (1): 49-58.

Larmat F.E., Soto-Duque A. & Bravo E. (2009). Evaluación de la actividad mutagénica del Río Cauca en el área urbana de la ciudad de Cali - Colombia, por medio del test de Ames. Universidad del Valle / Universidad Autónoma de Occidente. Informe a COLCIENCIAS. Cali (Valle), 174 p.

Larmat, F.E., Bravo, E., Sierra, J.C., Benitez, N. & Soto-Duque, A. (2010). Mutagenicity evaluation of water from the Cauca River in the city of Cali-Colombia using the Ames test. Pittsburgh Conference, Orlando (USA), Febrero.

Larmat, F.E. & Soto-Duque, A. (2010a). Monitoring of pesticides levels in water from Cauca River in the city of Cali-Colombia. Pittsburgh Conference, Orlando (USA), Febrero.

Larmat, F.E. & Soto-Duque, A. (2010b). Determination of the heavy metal levels (Pb, Cd, Cr and Hg) in water from Cauca River in the city of Cali-Colombia. Pittsburgh Conference, Orlando (USA), Febrero.

Lee H.R. & Choi K.C. (2013). 4-tert-Octylphenol stimulates the expression of cathepsins in human breast cancer cells and xenografted breast tumors of a

mouse model via an estrogen receptor-mediated signaling pathway. *Toxicology*, 8, 304: 13-20.

Leppanen H. & Oikari A. (1999). Recoveries of some chlorophenolics and resin acids from humic water. *Environmental Toxicology and Chemistry*, 18 (7). 1498-1505.

Li X., Liu N., Zhang H., Knudson S.E., Slayden R.A. & Tonge P.J. (2010). Synthesis and SAR studies of 1,4-benzoxazine MenB inhibitors: novel antibacterial agents against *Mycobacterium tuberculosis*. *Bioorg. Med. Chem. Lett.*, 20 (21): 6306-6309.

Luthria D.L. & Sprecher H. (1994). A comparison of the specific activities of linoleate and arachidonate in liver, heart and kidney phospholipids after feeding rats ethyl linoleate-9,10,12,13-d4. *Biochim. Biophys Acta.*, 23; 1213 (1): 1-4.

Lu L., Zhang M., Wang Y., Zhang Y. & Zhao X. (2012). Screening and identifying of hepatoprotective compounds in paeoniae radix rubra. *ZhongguoZhongYaoZaZhi.*, 37 (5): 597-600.

Martínez A., Galvis A. & Holguín J. (2007). Optimización de la modelación de la calidad del agua del Río Cauca. Tramo: La Balsa-Anacaro. *In: Seminario Prevención y Control de la Contaminación de los Recursos Hídricos, LATINOSAN 2007.* Cali (Colombia).

Mackintosh C.E., Maldonado J., Hongwu J., Hoover N., Chong A., Ikonomou M.G. & Gobas F.A. (2004). Distribution of phthalate esters in a marine aquatic food web: comparison to polychlorinated biphenyls. *Environ. Sci. Technol.*, 38 (7): 2011-2020.

Malecón Janchito. (2011). Historia de Juanchito. Recuperado el 12 de Octubre de 2013. Disponible en: <http://www.maleconjuanchito.com/html/historia.htm>

Mellanen P., Soimasuo M., Holmbom B., Oikari A. & Santti R. (1999). Expression of the vitellogenin gene in the liver of juvenile whitefish (*Coregonus lavaretus* L. s.l.) exposed to effluents from pulp and paper mills. *Ecotoxicology and Environmental Safety*, 43 (2): 133-137.

MP Biomedicals L.L.C. (2006). Material Safety Data Sheet. Product name: n-butyl ricinoleate practical grade. 5 p.

Naciones Unidas. (2011). Sistema Globalmente Armonizado de Clasificación y Etiquetado de Productos Químicos – SGA. Cuarta Edición Revisada. New York y Ginebra. 607 p.

NCBI. PubChem Bioassay. (2001, Junio). National Center for Biotechnology Information, U.S. National Library of Medicine 8600 Rockville Pike, Bethesda MD, 20894 USA. Recuperado el 26 de Agosto de 2013. Disponible en: <http://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/assay/assay.cgi?cid=31401>

NCBI. PubChem Bioassay. (2001, Junio). National Center for Biotechnology Information, U.S. National Library of Medicine 8600 Rockville Pike, Bethesda MD, 20894 USA. Recuperado el 27 de Agosto de 2013. Disponible en: <http://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/assay/assay.cgi?cid=3515>

NCBI. PubChem Bioassay. (2005, Octubre). National Center for Biotechnology Information, U.S. National Library of Medicine 8600 Rockville Pike, Bethesda MD, 20894 USA. Recuperado el 31 de Agosto de 2013. Disponible en: <http://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/assay/assay.cgi?cid=75206>

NCBI. PubChem Compounds. (2005, Marzo). National Center for Biotechnology Information, U.S. National Library of Medicine 8600 Rockville Pike, Bethesda MD, 20894 USA. Recuperado el 31 de Agosto de 2013. Disponible en: <http://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/summary/summary.cgi?cid=537071>

NCBI. PubChem Bioassay. (2009, Octubre). National Center for Biotechnology Information, U.S. National Library of Medicine 8600 Rockville Pike, Bethesda MD, 20894 USA. Recuperado el 7 de Agosto de 2013. Disponible en: <http://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/assay/assay.cgi?cid=6735NCBI>

NCBI. PubChem Compounds. (2004, Septiembre). National Center for Biotechnology Information, U.S. National Library of Medicine 8600 Rockville Pike, Bethesda MD, 20894 USA. Recuperado el 7 de Agosto de 2013. Disponible en: <http://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/summary/summary.cgi?cid=6735#itabs-2d>

NCBI. PubChem Compounds. (2004, Septiembre). National Center for Biotechnology Information, U.S. National Library of Medicine 8600 Rockville Pike, Bethesda MD, 20894 USA. Recuperado el 7 de Agosto de 2013. Disponible en: <http://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/summary/summary.cgi?cid=585058>

NCBI. PubChem Compounds. (2004, Septiembre). National Center for Biotechnology Information, U.S. National Library of Medicine 8600 Rockville Pike, Bethesda MD, 20894 USA. Recuperado el 8 de Agosto de 2013. Disponible en: http://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/summary/summary.cgi?cid=638015&loc=ec_rcs#itabs-2d

NCBI. PubChem Compounds. (2004, Septiembre). National Center for Biotechnology Information, U.S. National Library of Medicine 8600 Rockville Pike, Bethesda MD, 20894 USA. Recuperado el 21 de Septiembre de 2013. Disponible en: <http://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/summary/summary.cgi?cid=614842#itabs-2d>

NCBI.PubChem Compounds. (2004, Septiembre). National Center for Biotechnology Information, U.S. National Library of Medicine 8600 Rockville Pike, Bethesda MD, 20894 USA. Recuperado el 21 de Septiembre de 2013. Disponible en: <http://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/summary/summary.cgi?cid=5363101#itabs-2d>

NCBI.PubChem Compounds. (2004, Septiembre). National Center for Biotechnology Information, U.S. National Library of Medicine 8600 Rockville Pike, Bethesda MD, 20894 USA. Recuperado el 21 de Septiembre de 2013. Disponible en: <http://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/summary/summary.cgi?cid=541562#itabs-2d>

NCBI.PubChem Compounds. (2004, Septiembre). National Center for Biotechnology Information, U.S. National Library of Medicine 8600 Rockville Pike, Bethesda MD, 20894 USA. Recuperado el 21 de Septiembre de 2013 Disponible en:
http://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/summary/summary.cgi?cid=5146&loc=ec_rcs#itabs-3d

NCBI.PubChem Compounds. (2005, Marzo). National Center for Biotechnology Information, U.S. National Library of Medicine 8600 Rockville Pike, Bethesda MD, 20894 USA. Recuperado el 11 de Julio de 2013. Disponible en:
<http://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/summary/summary.cgi?cid=31404>.

NCBI.PubChem Compounds. (2005, Marzo). National Center for Biotechnology Information, U.S. National Library of Medicine 8600 Rockville Pike, Bethesda MD, 20894 USA. Recuperado el 13 de Julio de 2013. Disponible en:
<http://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/summary/summary.cgi?cid=125>

NCBI.PubChem Compounds. (2005, Marzo). National Center for Biotechnology Information, U.S. National Library of Medicine 8600 Rockville Pike, Bethesda MD, 20894 USA. Recuperado el 14 de Agosto de 2013. Disponible en:
<http://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/summary/summary.cgi?q=all&cid=5364412#ec>

NCBI.PubChem Compounds. (2005, Marzo). National Center for Biotechnology Information, U.S. National Library of Medicine 8600 Rockville Pike, Bethesda MD, 20894 USA. Recuperado el 14 de Agosto de 2013. Disponible en:
<http://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/summary/summary.cgi?cid=539270>

NCBI.PubChem Compounds. (2005, Marzo). National Center for Biotechnology Information, U.S. National Library of Medicine 8600 Rockville Pike, Bethesda MD, 20894 USA. Recuperado el 5 de Agosto de 2013. Disponible en:
<http://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/assay/assay.cgi?cid=31404>

NCBI.PubChem Compounds (2005, Marzo). National Center for Biotechnology Information,U.S. National Library of Medicine8600 Rockville Pike, Bethesda MD, 20894 USA. Recuperado el 10 de Agosto de 2013 Disponible en:
<http://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/summary/summary.cgi?cid=3026#itabs-2d>

NCBI. PubChem Compounds. (2005, Agosto). National Center for Biotechnology Information,U.S. National Library of Medicine 8600 Rockville Pike, Bethesda MD, 20894 USA. Recuperado el 22 de Septiembre de 2013. Disponible en:
<http://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/summary/summary.cgi?cid=3085012>

NCBI.PubChem Compound. (2005, Julio). National Center for Biotechnology Information,U.S. National Library of Medicine 8600 Rockville Pike, Bethesda MD, 20894 USA. Recuperado el 21 de Septiembre de 2013. Disponible en:
http://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/summary/summary.cgi?cid=2724628&loc=ec_rcs#itabs-2d

NCBI.PubChem Compound. (2005, Marzo). National Center for Biotechnology Information,U.S. National Library of Medicine 8600 Rockville Pike, Bethesda MD, 20894 USA. Recuperado el 21 de Septiembre de 2013. Disponible en:
<http://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/summary/summary.cgi?cid=5363101#itabs-2d>

NCBI.PubChem Compounds. (2005, Marzo). National Center for Biotechnology Information,U.S. National Library of Medicine 8600 Rockville Pike, Bethesda MD, 20894 USA. Recuperado el 21 de Septiembre de 2013. Disponible en:
<http://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/summary/summary.cgi?cid=590850#itabs-2d>

NCBI.PubChem Compounds. (2005, Marzo). National Center for Biotechnology Information,U.S. National Library of Medicine 8600 Rockville Pike, Bethesda MD, 20894 USA. Recuperado el 21 de Septiembre de 2013. Disponible en:
<http://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/summary/summary.cgi?cid=571498#itabs-2d>

NCBI.PubChem Compounds. (2005, Marzo). National Center for Biotechnology Information,U.S. National Library of Medicine8600 Rockville Pike, Bethesda MD, 20894 USA. Recuperado el 20 de Septiembre de 2013. Disponible en:
[internet:http://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/summary/summary.cgi?cid=542303#itabs-2d](http://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/summary/summary.cgi?cid=542303#itabs-2d)

NCBI.PubChem Compounds. (2005, Marzo). National Center for Biotechnology Information,U.S. National Library of Medicine8600 Rockville Pike, BethesdaMD, 20894USA. Recuperado el 11 de Julio de 2013. Disponible en:
http://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/summary/summary.cgi?cid=31404&loc=ec_rcs#x27

NCBI.PubChem Compounds. (2005, Marzo). National Center for Biotechnology Information, U.S. National Library of Medicine 8600 Rockville Pike, Bethesda MD, 20894 USA. Recuperado el 10 de Agosto de 2013. Disponible en: <http://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/summary/summary.cgi?cid=3026#itabs-2d>

NCBI.PubChem Compounds. (2005, Marzo). National Center for Biotechnology Information, U.S. National Library of Medicine 8600 Rockville Pike, Bethesda MD, 20894 USA. Recuperado el 20 de Septiembre de 2013. Disponible en: <http://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/summary/summary.cgi?cid=12366#itabs-2d>

NCBI. PubChem Compounds. (2005, Marzo). National Center for Biotechnology Information, U.S. National Library of Medicine 8600 Rockville Pike, Bethesda MD, 20894 USA. Recuperado el 31 de Agosto de 2013. Disponible en: <http://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/summary/summary.cgi?cid=562334>http://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/summary/summary.cgi?cid=&loc=ec_rcs

NCBI. PubChem Compounds. (2005, Marzo). National Center for Biotechnology Information, U.S. National Library of Medicine 8600 Rockville Pike, Bethesda MD, 20894 USA. Recuperado el 31 de Agosto de 2013. Disponible en: <http://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/summary/summary.cgi?cid=13892>

NCBI. PubChem Compounds. (2005, Marzo). National Center for Biotechnology Information, U.S. National Library of Medicine 8600 Rockville Pike, Bethesda MD, 20894 USA. Recuperado el 31 de Agosto de 2013. Disponible en: <http://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/summary/summary.cgi?cid=554084>

NCBI. PubChem Compounds. (2005, Marzo). National Center for Biotechnology Information, U.S. National Library of Medicine 8600 Rockville Pike, Bethesda MD, 20894 USA. Recuperado el 31 de Agosto de 2013. Disponible en: <http://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/summary/summary.cgi?cid=536919#itabs-2d>

NCBI. PubChem Compounds. (2005, Marzo). National Center for Biotechnology Information, U.S. National Library of Medicine 8600 Rockville Pike, Bethesda MD, 20894 USA. Recuperado el 28 de Agosto de 2013. Disponible en: <http://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/summary/summary.cgi?cid=5282184#itabs-2d>

NCBI. PubChem Compounds. (2005, Marzo). National Center for Biotechnology Information, U.S. National Library of Medicine 8600 Rockville Pike, Bethesda MD, 20894 USA. Recuperado el 31 de Agosto de 2013. Disponible en: http://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/summary/summary.cgi?cid=5364552&loc=ec_rcs#itabs-2d

NCBI. PubChem Compounds. (2005, Marzo). National Center for Biotechnology Information, U.S. National Library of Medicine 8600 Rockville Pike, Bethesda MD, 20894 USA. Recuperado el 31 de Agosto de 2013. Disponible en:

http://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/summary/summary.cgi?cid=12409&loc=ec_rcs#itabs-2d

NCBI. PubChem Compounds. (2005, Marzo). National Center for Biotechnology Information, U.S. National Library of Medicine 8600 Rockville Pike, Bethesda MD, 20894 USA. Recuperado el 31 de Agosto de 2013. Disponible en:
<http://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/summary/summary.cgi?cid=292285#itabs-2d>

NCBI. PubChem Compounds. (2005, Marzo). National Center for Biotechnology Information, U.S. National Library of Medicine 8600 Rockville Pike, Bethesda MD, 20894 USA. Recuperado el 31 de Agosto de 2013. Disponible en:
http://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/summary/summary.cgi?cid=16040&loc=ec_rcs#itabs-2d

NCBI. PubChem Compounds. (2005, Marzo). National Center for Biotechnology Information, U.S. National Library of Medicine 8600 Rockville Pike, Bethesda MD, 20894 USA. Recuperado el 31 de Agosto de 2013. Disponible en:
<http://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/summary/summary.cgi?cid=75206#itabs-2d>

NCBI. PubChem Compounds. (2005, Marzo). National Center for Biotechnology Information, U.S. National Library of Medicine 8600 Rockville Pike, Bethesda MD, 20894 USA. Recuperado el 28 de Agosto de 2013. Disponible en:
http://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/summary/summary.cgi?cid=8814&loc=ec_rcs#itabs-2d

NCBI. PubChem Compounds. (2005, Marzo). National Center for Biotechnology Information, U.S. National Library of Medicine 8600 Rockville Pike, Bethesda MD, 20894 USA. Recuperado el 1 de Octubre de 2013. Disponible en:
<http://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/summary/summary.cgi?cid=142612>

NCBI. PubChem Compounds. (2005, Marzo). National Center for Biotechnology Information, U.S. National Library of Medicine 8600 Rockville Pike, Bethesda MD, 20894 USA. Recuperado el 1 de Octubre de 2013. Disponible en:
http://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/summary/summary.cgi?cid=33934&loc=ec_rcs

NCBI. PubChem Compounds. (2005, Marzo). National Center for Biotechnology Information, U.S. National Library of Medicine 8600 Rockville Pike, Bethesda MD, 20894 USA. Recuperado el 1 de Octubre de 2013. Disponible en:
<http://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/summary/summary.cgi?cid=541562#itabs-2d>

NCBI. PubChem Compounds. (2005, Marzo). National Center for Biotechnology Information, U.S. National Library of Medicine 8600 Rockville Pike, Bethesda MD, 20894 USA. Recuperado el 1 de Octubre de 2013. Disponible en:
<http://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/summary/summary.cgi?cid=536571#itabs-3d>

NCBI.PubChem Compounds. (2005, Marzo). National Center for Biotechnology Information,U.S. National Library of Medicine 8600 Rockville Pike, Bethesda MD, 20894 USA. Recuperado el 2 de Octubre de 2013. Disponible en:
<http://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/summary/summary.cgi?cid=537289#itabs-3d>

NCBI.PubChem Compounds. (2005, Marzo). National Center for Biotechnology Information,U.S. National Library of Medicine 8600 Rockville Pike, Bethesda MD, 20894 USA. Recuperado el 2 de Octubre de 2013. Disponible en:
<http://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/summary/summary.cgi?cid=538182#x400>

NCBI.PubChem Compounds. (2005, Marzo). National Center for Biotechnology Information,U.S. National Library of Medicine 8600 Rockville Pike, Bethesda MD, 20894 USA. Recuperado el 2 de Octubre de 2013. Disponible en:
<http://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/summary/summary.cgi?cid=590916#itabs-2d>

NCBI.PubChem Compounds. (2005, Marzo). National Center for Biotechnology Information,U.S. National Library of Medicine 8600 Rockville Pike, Bethesda MD, 20894 USA. Recuperado el 2 de Octubre de 2013. Disponible en:
http://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/summary/summary.cgi?cid=10116&loc=ec_rcs#itabs-2d

NCBI.PubChem Compounds. (2005, Marzo). National Center for Biotechnology Information,U.S. National Library of Medicine 8600 Rockville Pike, Bethesda MD, 20894 USA. Recuperado el 2 de Octubre de 2013. Disponible en:
<http://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/summary/summary.cgi?cid=537833#itabs-2d>

NCBI.PubChem Compounds. (2005, Marzo). National Center for Biotechnology Information,U.S. National Library of Medicine 8600 Rockville Pike, Bethesda MD, 20894 USA. Recuperado el 2 de Octubre de 2013. Disponible en:
<http://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/summary/summary.cgi?cid=584513>

NCBI.PubChem Compounds. (2006, Octubre). National Center for Biotechnology Information,U.S. National Library of Medicine8600 Rockville Pike, Bethesda MD, 20894 USA. Recuperado el 14 de Agosto de 2013 Disponible en:
<http://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/summary/summary.cgi?q=all&cid=10105543#ec>

NCBI.PubChem Compounds. (2008, Julio). National Center for Biotechnology Information,U.S. National Library of Medicine8600 Rockville Pike, Bethesda MD, 20894 USA. Recuperado el 14 de Agosto de 2013. Disponible en:
http://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/summary/summary.cgi?cid=24832117&loc=ec_rcs#x332

NCBI.PubChem Compounds. (2008, Marzo). National Center for Biotechnology Information, U.S. National Library of Medicine 8600 Rockville Pike, Bethesda MD, 20894 USA. Recuperado el 14 de Agosto de 2013. Disponible en: <http://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/summary/summary.cgi?q=all&cid=542226#itabs-3d>

NCBI.PubChem Compounds. (2011, Diciembre). National Center for Biotechnology Information, U.S. National Library of Medicine 8600 Rockville Pike, Bethesda MD, 20894 USA. Recuperado el 21 de Septiembre de 2013. Disponible en: <http://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/summary/summary.cgi?cid=54708942#itabs-2d>

NCBI. PubChem Compounds. (2012, Julio). National Center for Biotechnology Information, U.S. National Library of Medicine 8600 Rockville Pike, Bethesda MD, 20894 USA. Recuperado el 31 de Agosto de 2013. Disponible en: http://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/summary/summary.cgi?cid=5460209&loc=ec_rcs#itabs-2d

NCBI. PubChem Compounds. (2012, Julio). National Center for Biotechnology Information, U.S. National Library of Medicine 8600 Rockville Pike, Bethesda MD, 20894 USA. Recuperado el 31 de Agosto de 2013. Disponible en: http://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/summary/summary.cgi?cid=57349103&loc=ec_rcs#itabs-2d

Niimi A.J. & Lee H.B. (1992). Free and conjugated concentrations of nine resin acids in rainbow trout (*Oncorhynchus mykiss*) following waterborne exposure. *Environ. Toxicol. Chem.*, 11 (10): 1403-1407.

NLM.U.S. National Library of Medicine (1993, Enero). 2,6-DI-T-BUTYL-P-CRESOL. CASRN: 128-37-0. Recuperado el 13 de Julio de 2013. Disponible en: <http://toxnet.nlm.nih.gov/cgi-bin/sis/search/r?dbs+hsdb:@term+@rn+128-37-0>

Osmiro-Coneo, V., Soto-Duque, A., Jiménez-Botero, G.A. & Larmat, F.E. (2008). Contamination for organochloride pesticides in water of the Cauca River in the city of Cali, Colombia. Pittsburgh Conference, New Orleans (USA), 2008.

Ospino I., Lans I., Olivero J. & Vivas R. (2005). Modelo QSAR para la predicción de los tiempos de vida media de Bifenilos Policlorados en Humanos. *Univ. de Antioquia, Medellín (Colombia). Vitae*, 12 (1): 45-53.

Ostrov D.A., Hernández-Prada J.A., Corsino P.E., Finton K.A., Le N. & Rowe T.C. (2007). Discovery of novel DNA gyrase inhibitors by high-throughput virtual screening. *Antimicrob. Agents Chemother.*, 51 (10): 3688-3698.

Política Nacional para la Gestión Integral del Recurso Hídrico (2010). Bogotá, D.C.: Colombia, Ministerio de Ambiente, Vivienda y Desarrollo Territorial. 124 p.

PubMed. (2001, Junio). National Center for Biotechnology Information, U.S. National Library of Medicine 8600 Rockville Pike, Bethesda MD, 20894 USA. Recuperado el 7 de Agosto de 2013. Disponible en: http://www.ncbi.nlm.nih.gov/pubmed?linkname=pccompound_pubmed&from_uid=585058

Qi W., Müller B., Pernet-Coudrier B., Singer H., Liu H., Qu J. & Berg M. (2014). Organic micropollutants in the Yangtze River: Seasonal occurrence and annual loads. *Science of the Total Environment.*, 472, 789-799.

Rocchiccioli F., Lageron A. & Duboucher C. (1987). Abnormal n-nonacosane storage in humans: detection by gas chromatography/mass spectrometry of tissue extracts. *Biomed. Environ. Mass. Spectrom. Biomedical & Environmental Mass Spectrometry*, 14 (9): 481-485.

Roebuck B.D., MacMillan D.L., Bush D.M., Kensler T.W. & Natl J. (1984). Modulation of azaserine-induced pancreatic foci by phenolic antioxidants in rats. Document Number: medline/6610071. *J. of the National Cancer Inst.*, 72 (6): 1405-1410.

Ríos-Acevedo J.J., Páez M.M.I. & Granada P.A. (2001). Determinación de Glifosato en aguas por cromatografía de Gases – DCE. Tesis de Grado. Universidad del Valle. Facultad de Ciencias. Departamento de Química.

Ríos-Ardila R., Granada P. A., Páez M.M.I. (2001). Estandarización de la técnica de extracción y análisis de Carbofuran en aguas del Río Cauca por HPLC. Tesis de Grado. Universidad del Valle. Facultad de Ciencias. Departamento de Química.

Salvayre R., Nègre A., Rocchiccioli F., Duboucher C., Maret A., Vieu C., Lageron A., Polonovski J. & Douste-Blazy L. (1988). A new human pathology with visceral accumulation of long-chain n-alkanes; tissue distribution of the stored compounds and pathophysiological hypotheses. *Biochim. Biophys Acta.*, 958 (3):477-483.

Schweikert K., Gafner F. & Dell'Acqua G. (2010). A bioactive complex to protect proteins from UV-induced oxidation in human epidermis. *Int. J. Cosmet. Sci.*, 32 (1): 29-34.

Saeed N.M., El-Demerdash E., Abdel-Rahman H.M., Algandaby M.M., Al-Abbasi F.A. & Abdel-Naim A.B. (2012). Anti-inflammatory activity of methyl

palmitate and ethyl palmitate in different experimental rat models. *Toxicol. Appl. Pharmacol.*, 264 (1): 84-93.

Sánchez, R., Soto-Duque, Jiménez-Botero, G.A. & Larmat, F.E. (2008). Monitoring of heavy metal levels in water from the Cauca River in the urban zone of the city of Cali, Colombia. Pittsburgh Conference, New Orleans (USA), 2008.

Selassie C.D., Kapur S., Verma R.P. & Rosario M.(2005). Cellular apoptosis and cytotoxicity of phenolic compounds: a quantitative structure-activity relationship study. *J. Med. Chem.*, 48 (23): 7234-7242.

Scott R.C., Dugard P.H., Ramsey J.D. & Rhodes C. (1987). *In vitro* absorption of some o-phthalate diesters through human and rat skin. *Environ. Health Perspect.*, 74: 223-227.

Slobodnik J., Mrafkova L., Carere M., Ferrara F., Pennelli B., Schüürmann G. & Von der Ohe P.C. (2012). Identification of river basin specific pollutants and derivation of environmental quality standards: A case study in the Slovak Republic. *Trends in Analytical Chemistry*, 41: 133-145.

Soto-Duque, A. (2009). Actividad mutagénica en aguas, sedimentos y biodiversidad acuática. Universidad Autónoma de Occidente, Cali, Colombia. 59 p.

Soto-Duque, A., Jiménez-Botero, G.A., Osmiro-Coneo, V. & Larmat, F.E. (2008). Detección de pesticidas clordano y clorpirifos en aguas del río Cauca, en la zona urbana de la ciudad de Cali, Colombia.

Sierra J.C., Benítez N., Bravo, E., Soto-Duque, A. & Larmat F.E. (2009). Determinación de la actividad mutagénica de las aguas del Río Cauca en el tramo puente el Hormiguero y la desembocadura del Río Cali, por medio del test de Ames. Memorias del XLIV Congreso Nacional de Ciencias Biológicas. Popayán (Cauca) Colombia.

Sierra J.C., Benítez N., Bravo, E., Soto-Duque, A. & Larmat F.E. (2012). Evaluation of the mutagenic activity of waters collected from Cauca River in the city of Cali, Colombia by using the *Salmonella* / Microsome Assay. *Revista de Ciencias y Exactas, Universidad del Valle*: 131-143.

SIGMA-ALDRICH.(2010). Material Safety Data Sheet. Product name: 1-Indanone. Version 3.2. Date Revision 10/21/2010, 5 p.

SIGMA-ALDRICH. (2011). Material Safety Data Sheet. Product name: 4-Hydroxybenzyl alcohol. Version 3.2, 6 p.

SIGMA-ALDRICH. (2012). Material Safety Data Sheet. Product name: Dibutyl phthalate. Version 4.5, 7 p.

SIGMA-ALDRICH. (2012). Material Safety Data Sheet. Product name:(2-Dodecen-1-yl)succinic anhydride. Version 5.0, 7 p.

SIGMA-ALDRICH. (2012) Material Safety Data Sheet.Product name: 2,6-Di-*tert*-butyl-4-methylphenol. Version 5.0, 7 p.

SIGMA-ALDRICH. (2012) Material Safety Data Sheet.Product name: all trans-Retinal. Version 5.0, 6 p.

SIGMA-ALDRICH. (2012) Material Safety Data Sheet. Product name: 4-*tert*-Octilfenol -. Version 5.0, 8p.

SIGMA-ALDRICH. (2012). Material Safety Data Sheet. Product name: Ursodeoxycholic acid. Version 3.3, 6 p.

SIGMA-ALDRICH, (2012). Material Safety Data Sheet. Product name: 4-(1,1,3,3-Tetrametilbutil)-*o*-cresol. Version 5.0, 8p.

SIGMA-ALDRICH. (2012). Material Safety Data Sheet. Product name: Nonacosano. Version 5.0, 8p.

SIGMA-ALDRICH. (2012) Ficha de datos de seguridad. Nombre del producto: Fmoc-Lys (Boc)-OH. Versión 5.0, 8p

SIGMA-ALDRICH. (2012). Ficha de datos de seguridad. Nombre del producto: Palmitato de etilo. Versión 5.0, 8 p

SIGMA-ALDRICH. (2012). Material Safety Data Sheet. Product name: Dibutyl phthalate. Version 4.5, 7 p.

SIGMA-ALDRICH. (2012). Material Safety Data Sheet.Product name: 2,6-Di-*tert*-butyl-4-methylphenol. Version 5.0, 7 p.

SIGMA-ALDRICH (2012). Ficha de datos de seguridad. Nombre del producto: Isopimaric Acid. Versión 5.2, 7 p.

SIGMA-ALDRICH. (2013). Material Safety Data Sheet. Product name: Azulene, 1,4-dimethyl-7-(1-methylethyl)-. Version 5.0, 8p.

SIGMA-ALDRICH, (2013). Material Safety Data Sheet. Product name: Linoleato de etilo. Version 5.0, 8p.

SIGMA-ALDRICH. (2013). Ficha de datos de seguridad. Nombre del producto: 2-Hydroxybenzothiazole. Versión 5.1, 8p

SIGMA-ALDRICH. (2013). Ficha de datos de seguridad. Nombre del producto: Alcohol 2-hidroxi-bencílico. Versión 5.2, 8p

Trauner M. & Graziadeil W. (1999). Mechanisms of action and therapeutic applications of ursodeoxycholic acid in chronic liver diseases. *Aliment Pharmacol. Ther.*, 13 (8): 979-996.

ToxnetHome-CCRIS. (1997, Octubre). Ursodeoxycholic acid casrn: 128-13-2. National Center for Biotechnology Information,U.S. National Library of Medicine8600 Rockville Pike, Bethesda MD, 20894 USA. Recuperado el 24 de Agosto de 2013. Disponible en: <http://toxnet.nlm.nih.gov/cgi-bin/sis/search/r?dbs+ccris:@term+@rn+128-13-2>

ToxnetHome.HSDS. (2012, November). Diisooctyl phthalatecasrn: 27554-26-3.National Center for Biotechnology Information,U.S. National Library of Medicine8600 Rockville Pike, Bethesda MD, 20894 USA.Recuperado el 1 de Octubre de 2013. Disponible en: <http://toxnet.nlm.nih.gov/cgi-bin/sis/search/r?dbs+hsdb:@term+@rn+@rel+27554-26-3>

ToxnetHome. HSDS. (2013, Junio). Dibutyl phthalate.National Center for Biotechnology Information, U.S. National Library of Medicine8600 Rockville Pike, Bethesda MD, 20894 USA. Recuperado el 11 de Agosto de 2013. Disponible en: <http://toxnet.nlm.nih.gov/cgi-bin/sis/search/r?dbs+hsdb:@term+@rn+@rel+84-74-2>

ToxnetHome.HSDS. (2013, Junio). Phorbol. National Center for Biotechnology Information,U.S. National Library of Medicine8600 Rockville Pike, BethesdaMD, 20894 USA. Recuperado el 14 de Agosto de 2013. Disponible en: <http://toxnet.nlm.nih.gov/cgi-bin/sis/search/r?dbs+hsdb:@term+@rn+@rel+17673-25-5>

ToxnetHome.HSDS. (2013, Junio). Dibutyl phthalate. National Center for Biotechnology Information,U.S. National Library of Medicine8600 Rockville Pike, Bethesda MD, 20894 USA. Recuperado el 11 de Agosto de 2013. Disponible en: <http://toxnet.nlm.nih.gov/cgi-bin/sis/search/r?dbs+hsdb:@term+@rn+@rel+84-74-2>

ToxnetHome-HSDS (2013, Junio). Phorbol. National Center for Biotechnology Information,U.S. National Library of Medicine8600 Rockville Pike, Bethesda MD, 20894 USA. Recuperado el 14 de Agosto de 2013. Disponible en: <http://toxnet.nlm.nih.gov/cgi-bin/sis/search/r?dbs+hsdb:@term+@rn+@rel+17673-25-5>

Ucar H., Van Derpoorten K., Cacciaguerra S., Spampinato S., Stables J.P., Depovere P., Isa M., Masereel B., Delarge J. & Poupaert J.H. (1998). Synthesis and anticonvulsant activity of 2(3H)-benzoxazolone and 2(3H)-benzothiazolone derivatives. *J. Med. Chem.*, 41 (7): 1138-1145.

Ulrich-Merzenich G., Kelber O., Koptina A., Freischmidt A., Heilmann J., Müller J., Zeitler H., Seidel M.F., Ludwig M., Heinrich E.U. & Winterhoff H. (2012). Novel neurological and immunological targets for salicylate-based phytopharmaceuticals and for the anti-depressant imipramine. *Phytomedicine*, 19 (10): 930-939.

UNITAR & ILO. (2005). Desarrollo de una Estrategia Nacional para la Implementación del SGA. Documento Guía para el Apoyo a la Implementación del Sistema Globalmente Armonizado para la Clasificación y el Etiquetado de Productos Químicos (SGA), 68 p.

UNITAR & ILO. (2010). Desarrollo de una Estrategia Nacional para la Implementación del SGA. Documento Guía para el Apoyo a la Implementación del Sistema Globalmente Armonizado para la Clasificación y el Etiquetado de Productos Químicos (SGA), 90 p.

UNITAR, OIT & OCDE. (2012). The GHS and the Global Partnership: a success story from Rio to Rio Achievements, lessons learned and future directions June 2012. WSSD Global Partnership for Capacity Building to Implement the Globally Harmonized System of Classification and Labelling of Chemicals (GHS), 32 p.

Valcárcel Y., González-Alonso S, Rodríguez-Gil J.L. & Gil-Catalá A.M. (2011). Detection of pharmaceutically active compounds in the rivers and tap water of the Madrid Region (Spain) and potential ecotoxicological risk. *Chemosphere.*, 84, 1336-1348.

Vélez C., Galvis A., Duque A. & Restrepo G. (2003). La modelación matemática en el estudio de calidad del agua del Río Cauca. Antecedentes y perspectivas. Seminario Internacional La Hidroinformática en la Gestión Integrada de los Recursos Hídricos. Instituto Cinara, Universidad del Valle, CVC, Cali, Colombia. P 107.

Viganò L., Benfenati E., van Cauwenberge A., Eidem J.K., Erratico C., Goksøyr A., Kloas W., Maggioni S., Mandich A. & Urbatzka R. (2008). Estrogenicity profile and estrogenic compounds determined in river sediments by chemical analysis, ELISA and yeast assays., *Chemosphere* 73: 1078–1089

Von der Ohe P.C., Dulio V., Slobodnik J., De Deckere E., Kühne R., Ralf-Uwe E., Ginebred A., De Cooman W., Schüürmann G. & Brack W. (2011). A new risk

assessment approach for the prioritization of 500 classical and emerging organic microcontaminants as potential river basin specific pollutants under the European Water Framework Directive. *Science of the Total Environment.*, 409: 2064-2077.

Wang L., Yan J., Fu P.P., Parekh K.A. & Yu H. (2003). Photomutagenicity of cosmetic ingredient chemicals azulene and guaiazulene. *Mutat Res.*, 530 (1-2): 19-26.

Watabe J. & Bernstein H. (1985). The mutagenicity of bile acids using a fluctuation test. *Mutat. Res.*, 158 (1-2):45-51,

Water OASIS (2002). Environmental & Agrochemical Applications Note book, 80 p.

Williams D.T. & Blanchfield B.J. (1975) .Theretention, distribution, excretion, and metabolism of dibutyl phthalate-7-14C in therat. *J. Agric. Food Chem.*, 23 (5): 854-857.

Yea Y., Weiweib J., Nab L., Meia M., Donghonga W., Zijiana W. & Kaifengb R. (2014). Assessing of genotoxicity of 16 centralized source-waters in China bymeans of the SOS/umu assay and the micronucleus test: Initial identification of the potential genotoxicants by use of a GC/MS method and the QSAR Toolbox 3.0., *Mutation Research* 763: 36–43.

Yu L.L., Hu W.C., Ding G., Li R.T., Wei J.H., Zou Z.M. & Wang M.H. (2011). Gusanlungionosides A-D, potential tyrosinase inhibitors from *Arcangelisia gusanlung*. *J. Nat. Prod.*, 74 (5): 1009-1114. Recuperado el 13 de julio de 2013. Disponible en: internet: <http://www.ncbi.nlm.nih.gov/pubmed/21500777>

Yuan J., Cheng K.C., Johnson R.L., Huang R., Pattaradilokrat S., Liu A., Guha R., Fidock D.A., Inglese J., Wellems T.E., Austin C.P. & Su, X.Z. (2011). Chemical genomic profiling for antimalarial therapies, response signatures, and molecular targets. *Science*, 333 (6043): 724-729.

Zhang X., Zhang D., Zhang H., Luo Z. & Yan C. (2012). Occurrence, distribution, and seasonal variation of estrogenic compounds and antibiotic residues in Jiulongjiang River, South China *Environ Sci Pollut Res.* 19:1392–1404.

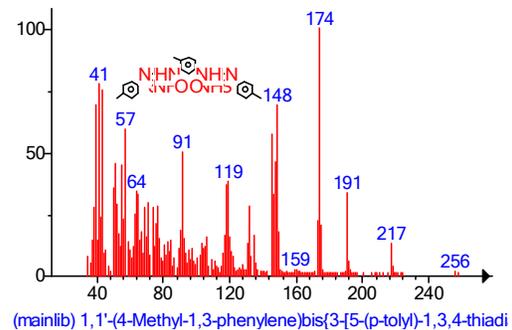
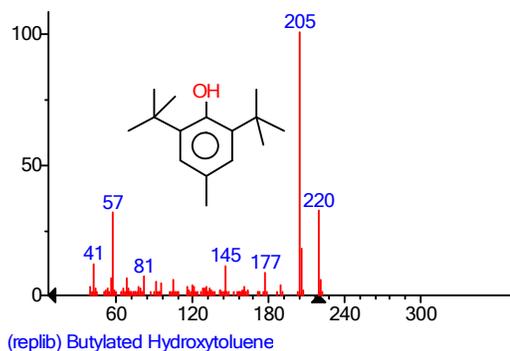
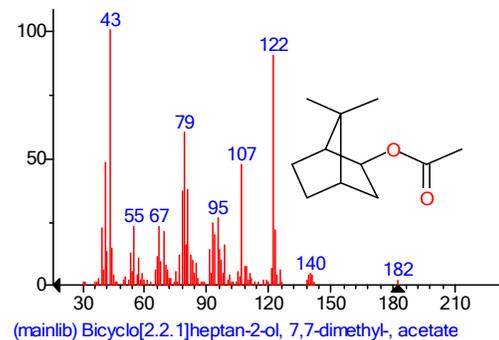
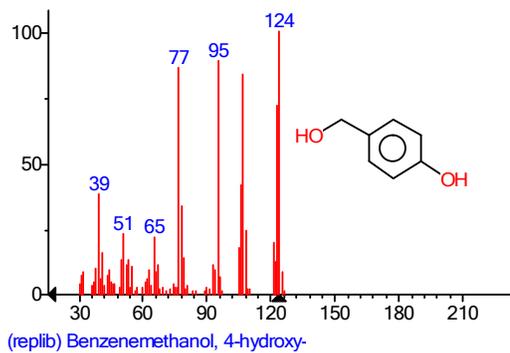
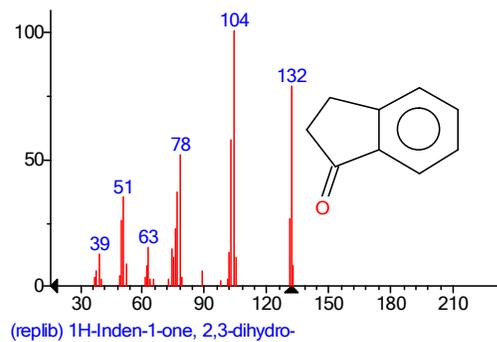
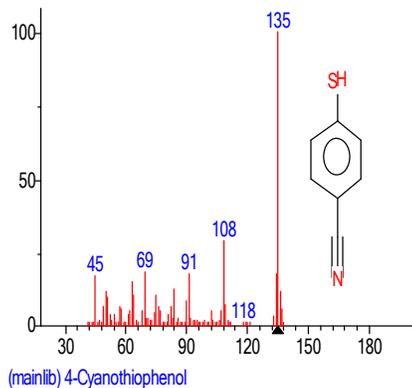
ANEXOS

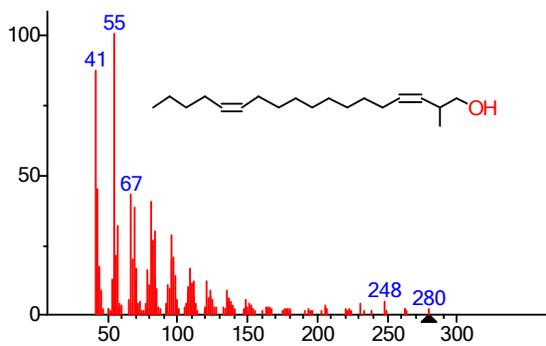
ANEXO 1

ESPECTROS DE MASA DE ALGUNOS DE LOS COMPUESTOS ORGÁNICOS HALLADOS EN LOS SITIOS DE MUESTREO UTILIZANDO LOS CROMATOGRAMAS TOMADOS EN EL MODO SCAN.

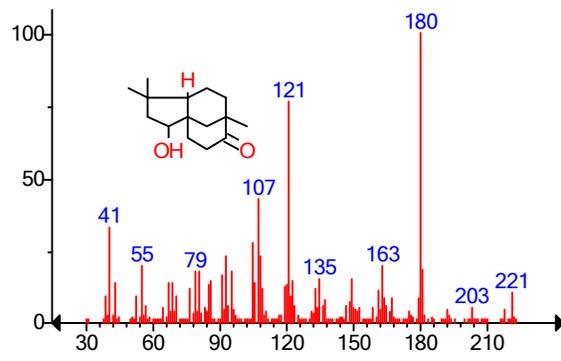
Para la identificación de los compuestos orgánicos encontrados en los cromatogramas tomados en el modo SCAN en los puntos de muestreo se utilizó el software "The NIST Mass Spectral Library version 2.0f (julio 23, 2008)" distribuido por The Standard Reference Data Program of NIST. Copyright 1987-2008. Se presentan solo los compuestos que el software identificó como los más probables, sin embargo no se puede garantizar un 100%, ya que se necesita hacer un análisis más completo con patrones y utilizando el modo SIM.

Algunos de los compuestos orgánicos encontrados en el Puente El Hormiguero. Estación E1.

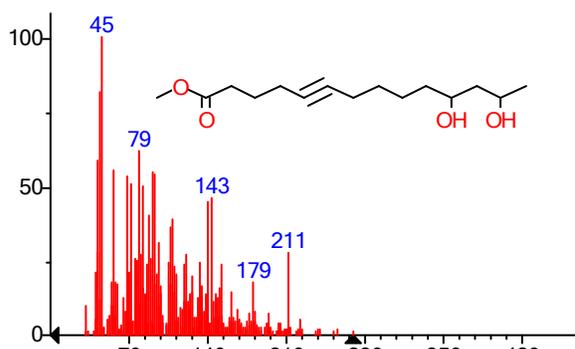




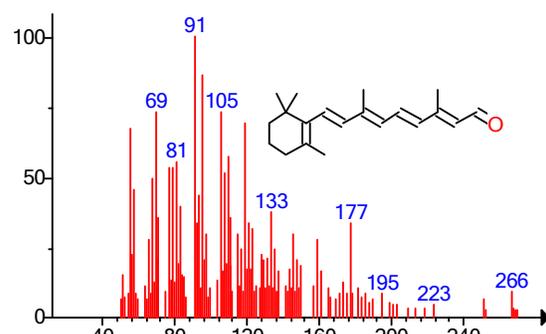
(mainlib) 2-Methyl-Z,Z-3,13-octadecadienol



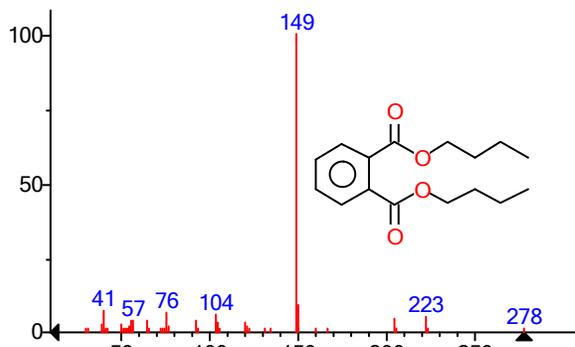
(mainlib) 2-Hydroxy-4,4,8-trimethyltricyclo[6.3.1.0(1,5)]dodecan-



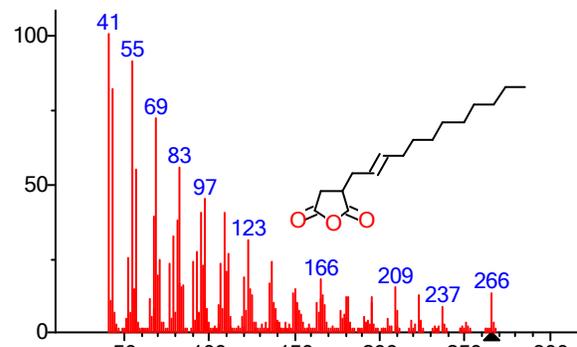
(mainlib) 11,13-Dihydroxy-tetradec-5-ynoic acid, methyl ester



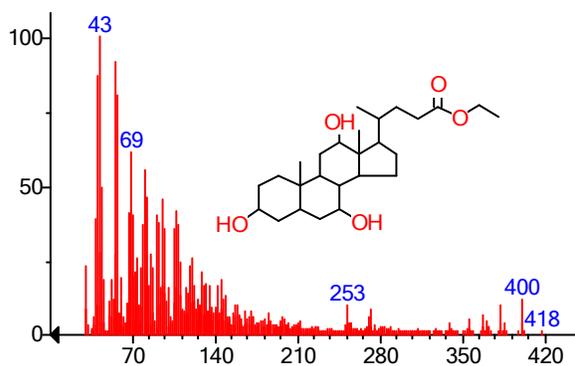
(mainlib) Vitamin A aldehyde



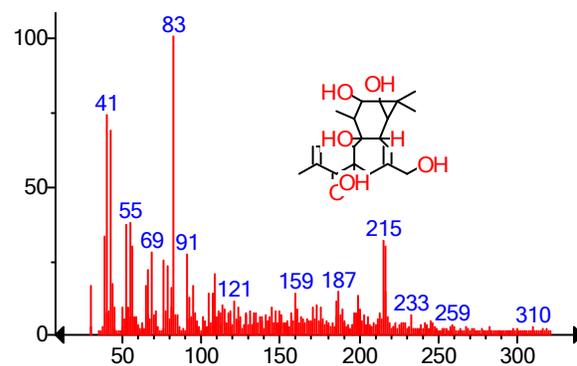
(mainlib) Dibutyl phthalate



(replib) 2-Dodecen-1-yl(-)-succinic anhydride

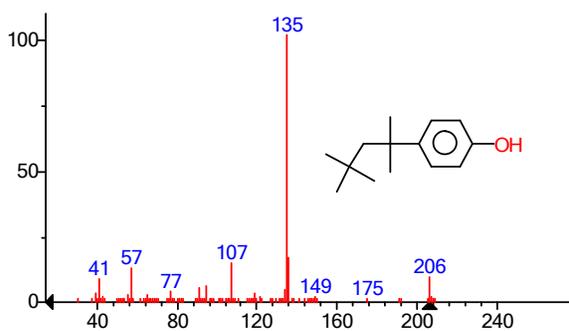


(mainlib) Ethyl iso-allochololate

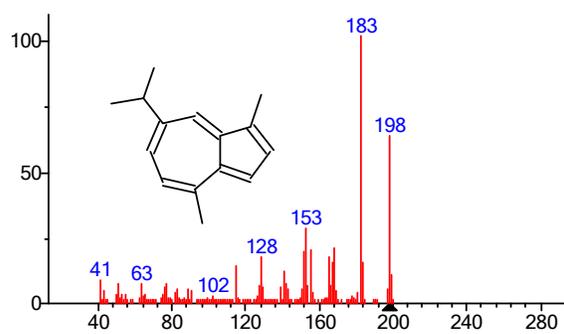


(mainlib) Phorbol

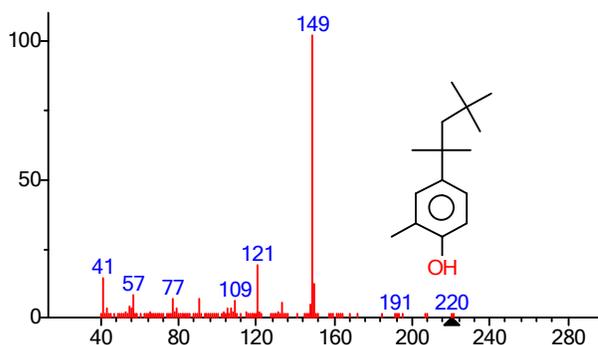
Compuestos orgánicos encontrados en la Canal CVC-Sur. Estación E2.



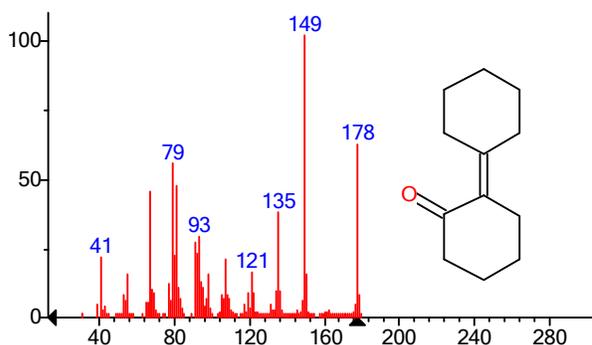
(mainlib) Phenol, 4-(1,1,3,3-tetramethylbutyl)-



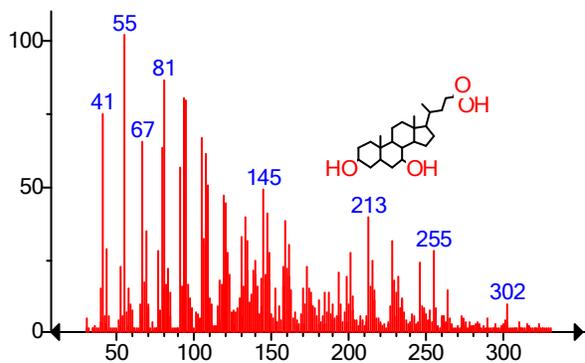
(replib) Azulene, 1,4-dimethyl-7-(1-methylethyl)-



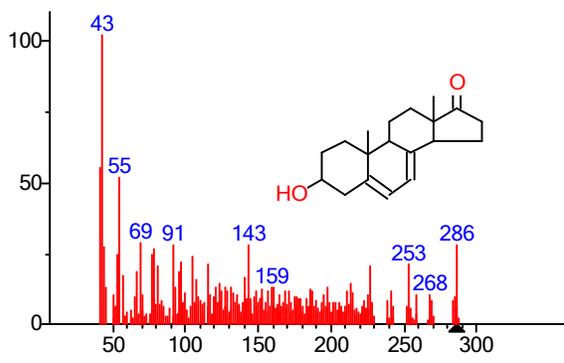
(mainlib) Phenol, 2-methyl-4-(1,1,3,3-tetramethylbutyl)-



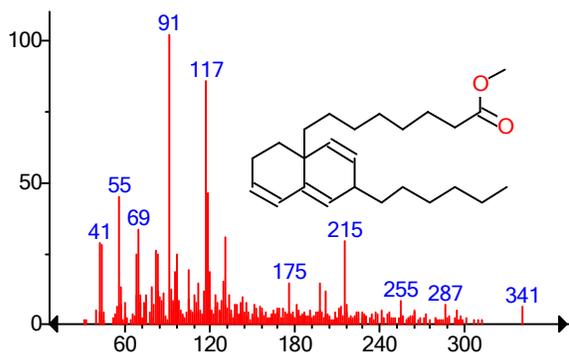
(replib) Cyclohexanone, 2-cyclohexylidene-



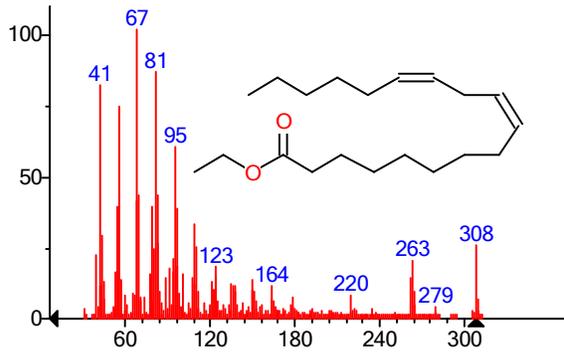
(mainlib) Ursodeoxycholic acid



(mainlib) Androst-5,7-dien-3-ol-17-one

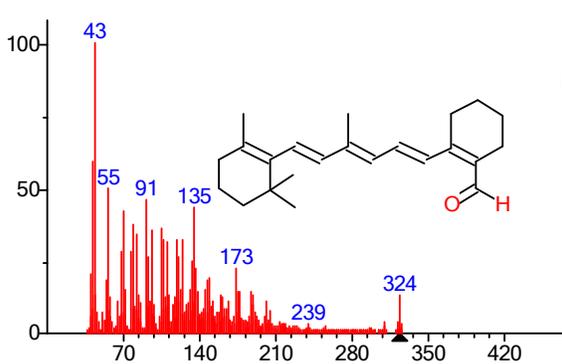


(mainlib) 4-Hexyl-1-(7-methoxycarbonylheptyl)bicyclo[4.4.0]decane

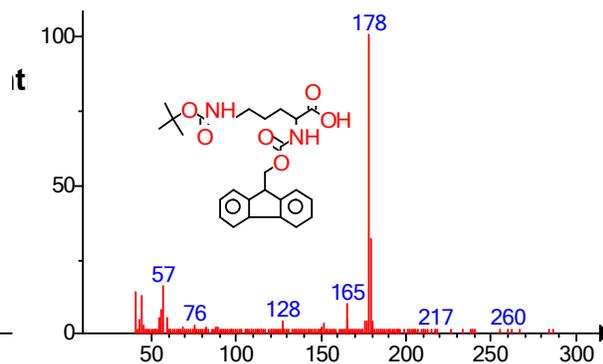


(replib) Linoleic acid ethyl ester

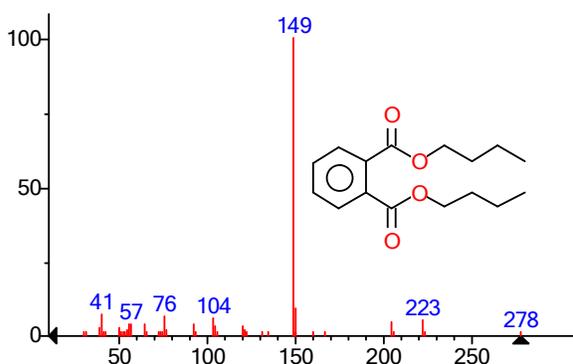
Compuestos orgánicos encontrados en la Bocatoma de la PTAP. Estación E3.



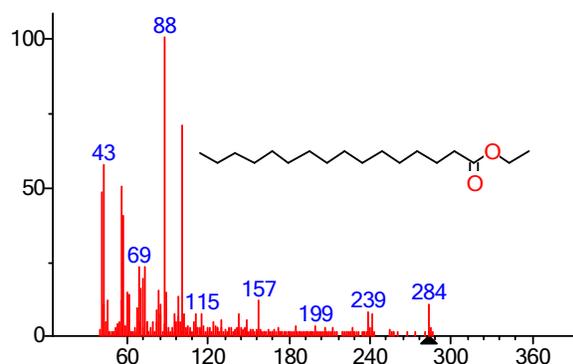
(mainlib) 2-[4-methyl-6-(2,6,6-trimethylcyclohex-1-enyl)hexa-1,3,5-]hexa-1,3,5-triene-2-carbaldehyde



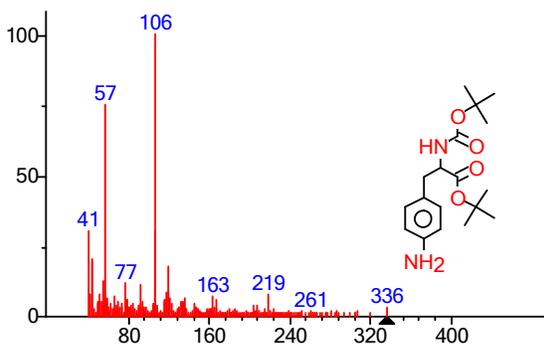
(mainlib) L-Lysine, N(6)-[(1,1-dimethylethoxy)carbonyl]-N(2)-[(9H-fluoren-2-ylmethoxy)carbonyl]-



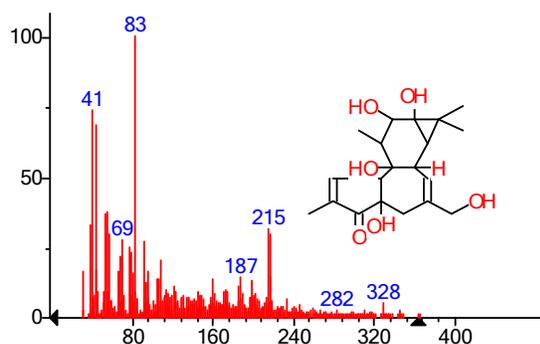
(mainlib) Dibutyl phthalate



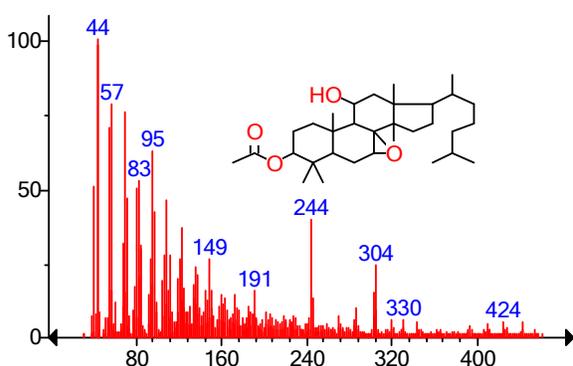
(replib) Hexadecanoic acid, ethyl ester



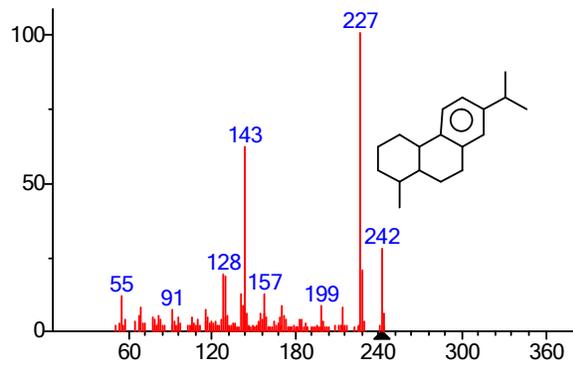
(mainlib) Phenylalanine, 4-amino-N-t-butyloxycarbonyl-, t-butyl ester



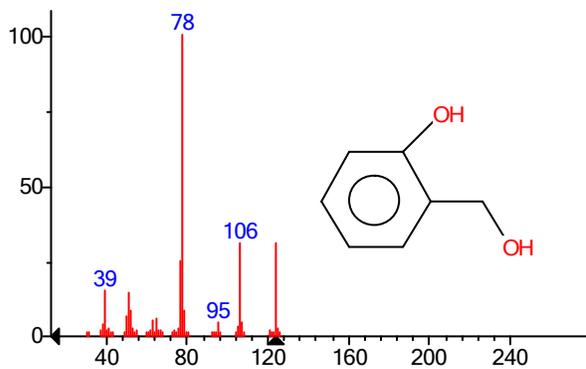
(mainlib) Phorbol



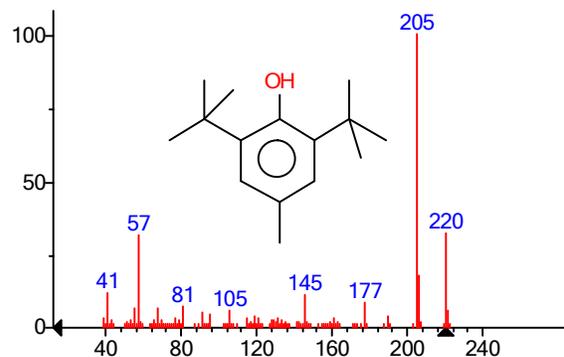
(mainlib) 7,8-Epoxyanostan-11-ol, 3-acetoxy-



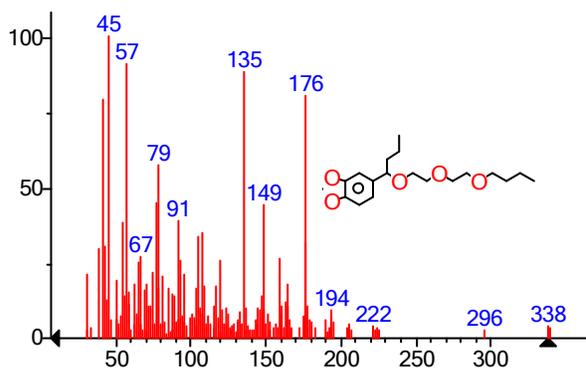
(mainlib) 10,18-Bisnorabieta-8,11,13-triene



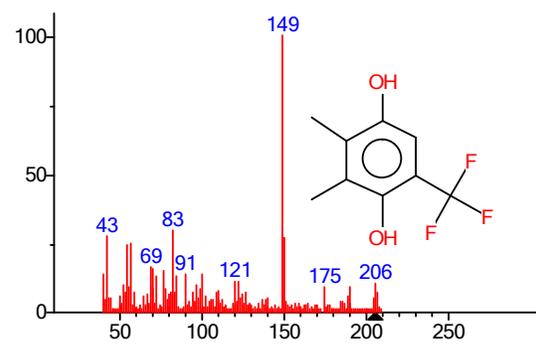
(mainlib) Salicyl Alcohol



(replib) Butylated Hydroxytoluene

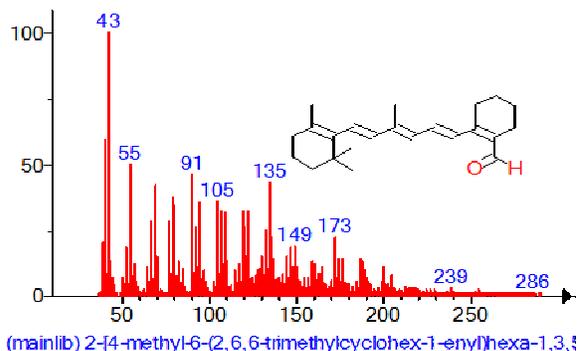


(mainlib) 1,3-Benzodioxole, 5-[1-[2-(2-butoxyethoxy)ethoxy]butyl]

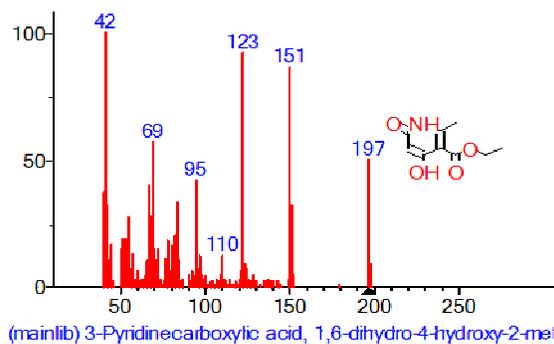


(mainlib) Phen-1,4-diol, 2,3-dimethyl-5-trifluoromethyl-

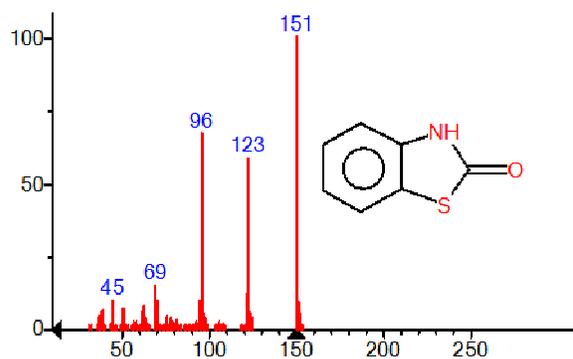
Compuestos orgánicos encontrados en el Puente de Juanchito. Estación E4



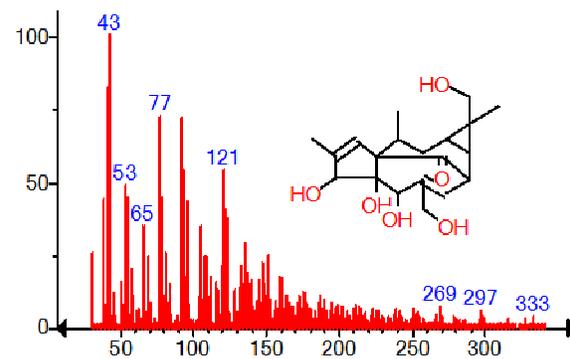
(mainlib) 2-[4-methyl-6-(2,6,6-trimethylcyclohex-1-enyl)hexa-1,3,5-trienyl]hexa-1,3,5-trienal



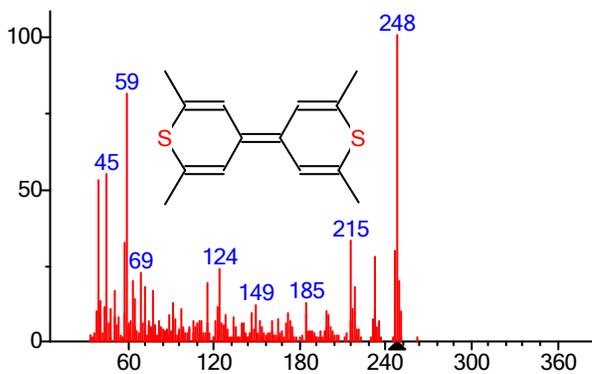
(mainlib) 3-Pyridinecarboxylic acid, 1,6-dihydro-4-hydroxy-2-methyl-



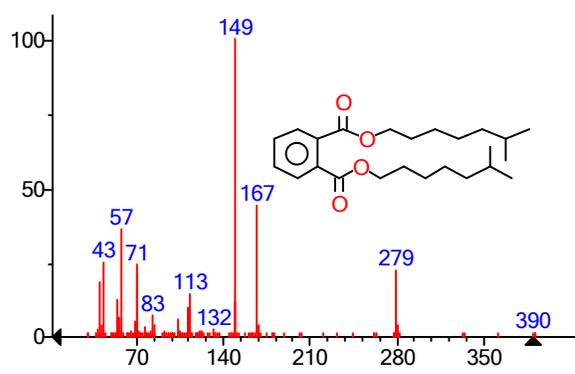
(replib) 2(3H)-Benzothiazolone



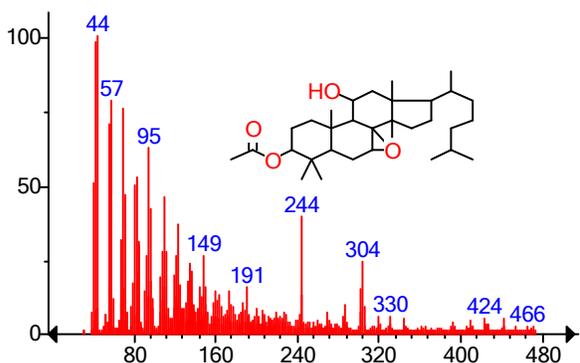
(mainlib) 1H-2,8a-Methanocyclopenta[a]cyclopropa[e]cyclodec-1-ol



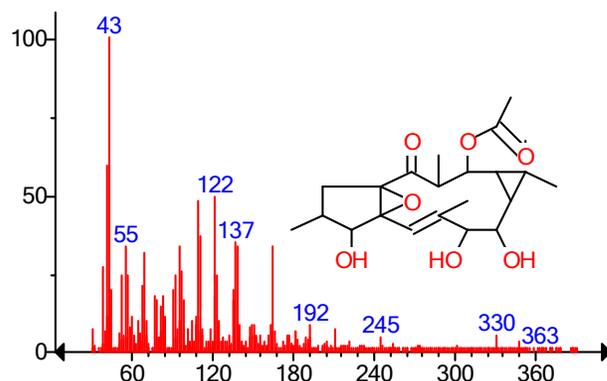
(mainlib) Bithiopyranylidene, 2,2',6,6'-tetramethyl-



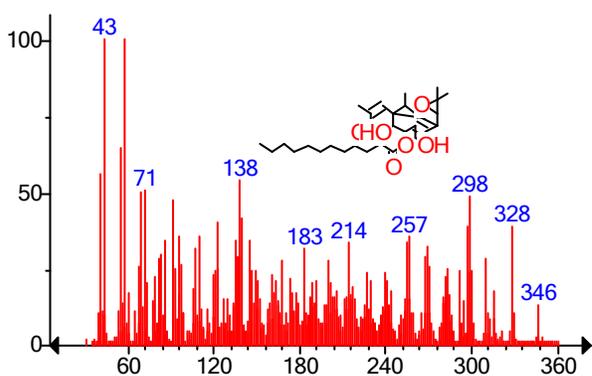
(mainlib) 1,2-Benzenedicarboxylic acid, diisooctyl ester



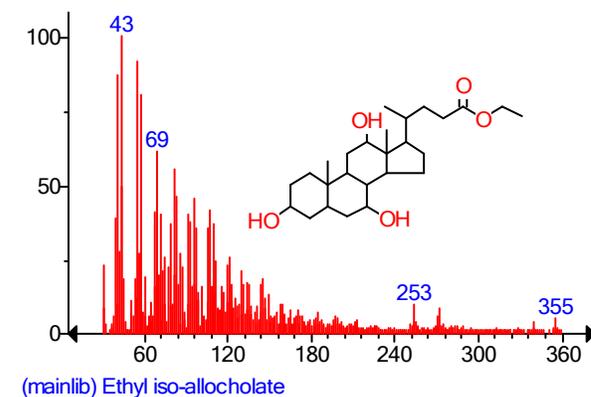
(mainlib) 7,8-Epoxylostan-11-ol, 3-acetoxy-



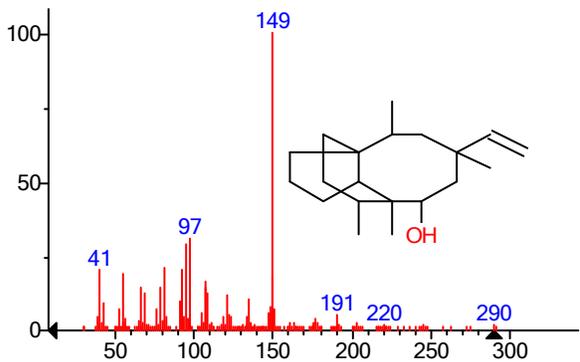
(mainlib) Ingol 12-acetate



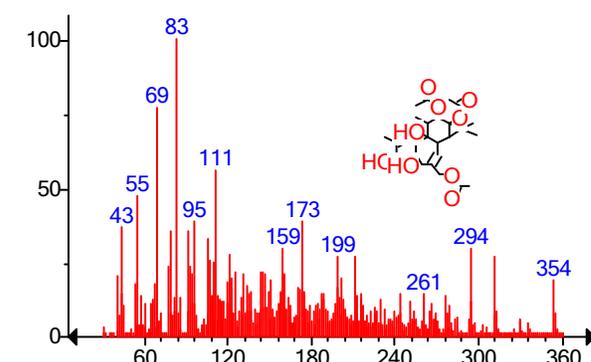
(mainlib) Dodecanoic acid, 1a,2,5,5a,6,9,10,10a-octahydro-5a-



(mainlib) Ethyl iso-allocholate

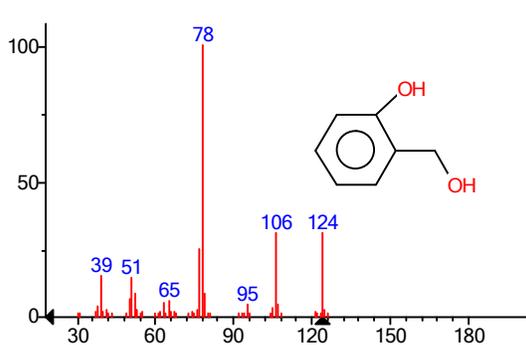


(mainlib) 2,4,7,14-Tetramethyl-4-vinyl-tricyclo[5.4.3.0(1,8)]tetrad

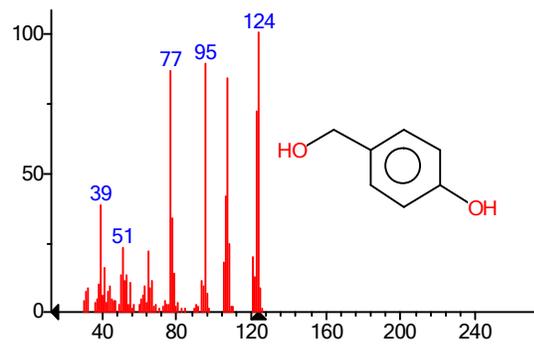


(mainlib) 1H-Cyclopropa[3,4]benz[1,2-e]azulene-4a,5,7b,9,9a(1

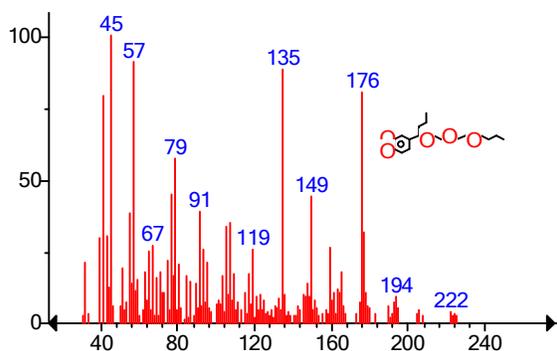
Compuestos orgánicos encontrados en la desembocadura del Río Cali. Estación E5.



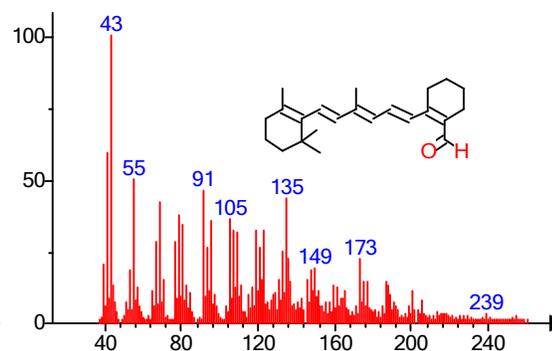
(mainlib) Salicyl Alcohol



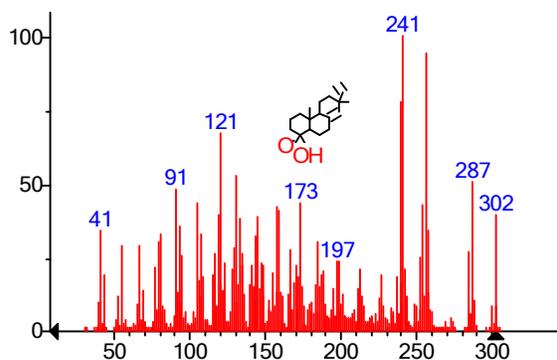
(replib) Benzenemethanol, 4-hydroxy-



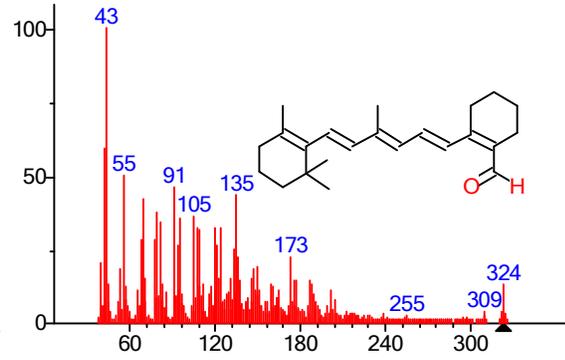
(mainlib) 1,3-Benzodioxole, 5-[1-[2-(2-butoxyethoxy)ethoxy]butyl]



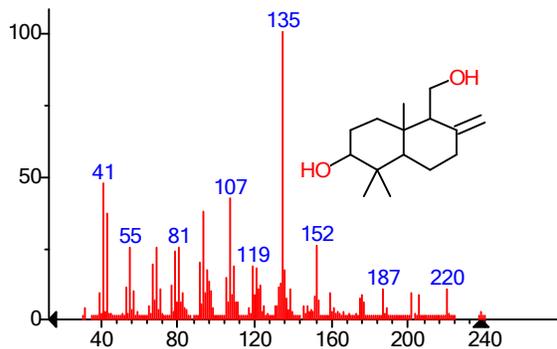
(mainlib) 2-[4-methyl-6-(2,6,6-trimethylcyclohex-1-enyl)hexa-1,3,5-t



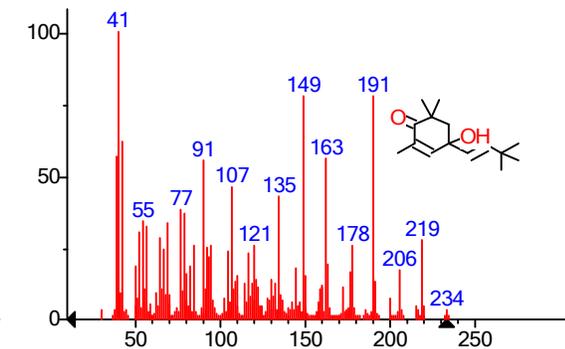
(mainlib) Pimaric acid



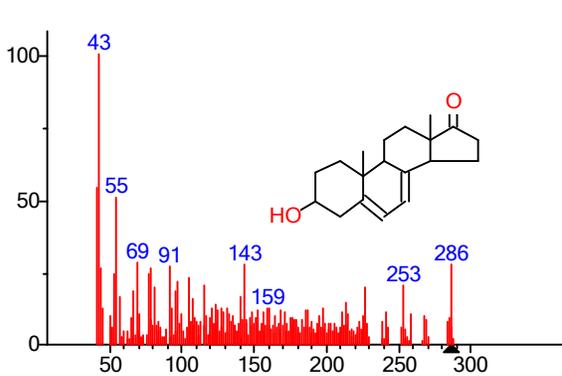
(mainlib) 2-[4-methyl-6-(2,6,6-trimethylcyclohex-1-enyl)hexa-1,3,5



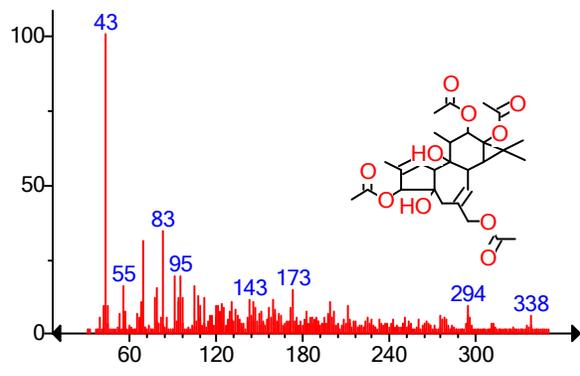
(mainlib) 5-Hydroxymethyl-1,1,4a-trimethyl-6-methylenedecahydro



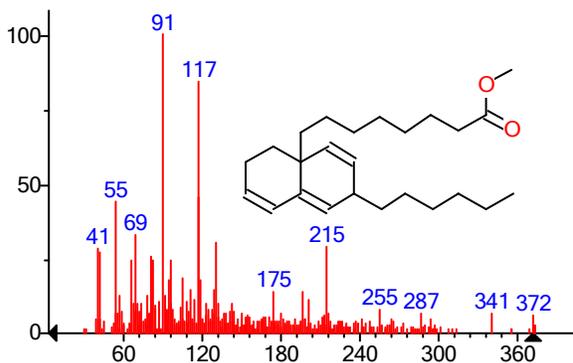
(mainlib) 4-(3,3-Dimethyl-but-1-ynyl)-4-hydroxy-2,6,6-trimethylcycl



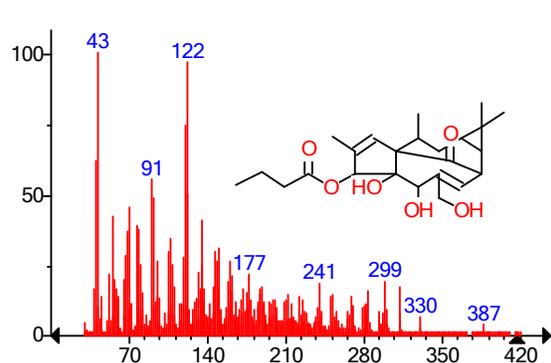
(mainlib) Androst-5,7-dien-3-ol-17-one



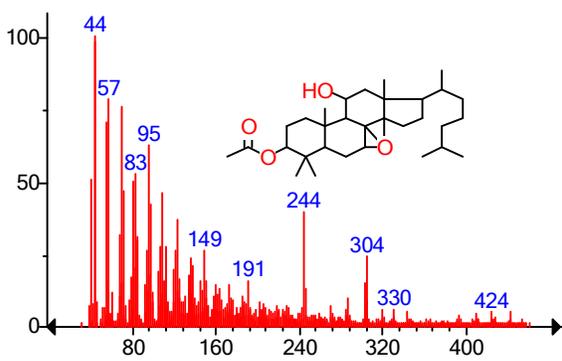
(mainlib) 1H-Cyclopropa[3,4]benz[1,2-e]azulene-4a,5,7b,9,9a(1)



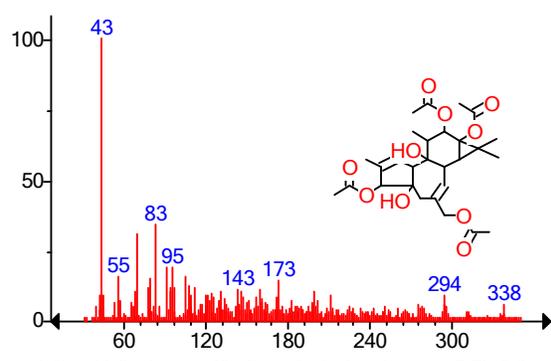
(mainlib) 4-Hexyl-1-(7-methoxycarbonylheptyl)bicyclo[4.4.0]decane



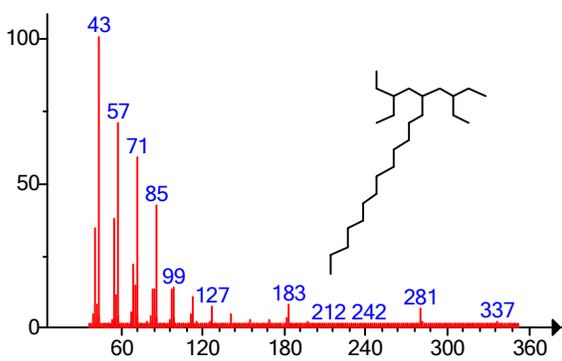
(mainlib) Butanoic acid, 1a,2,5,5a,6,9,10,10a-octahydro-5,5a-d



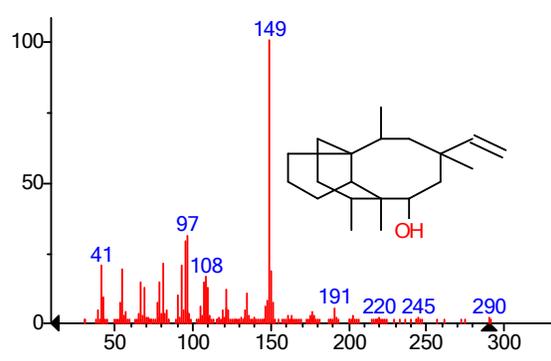
(mainlib) 7,8-Epoxyxanostan-11-ol, 3-acetoxy-



(mainlib) 1H-Cyclopropa[3,4]benz[1,2-e]azulene-4a,5,7b,9,9a(1)



(mainlib) Octadecane, 3-ethyl-5-(2-ethylbutyl)-



(mainlib) 2,4,7,14-Tetramethyl-4-vinyl-tricyclo[5.4.3.0(1,8)]tetrad

ANEXO 2

Caracterización del riesgo, información toxicológica, ecológica y regulatoria de compuestos orgánicos de la estación Puente Hormiguero - E1.

Tabla 11. Caracterización del riesgo, información toxicológica, ecológica y regulatoria del Benzenemethanol, 4-Hydroxy.

Identificación del riesgo	<p>PERSPECTIVA GENERAL DE EMERGENCIA</p> <p>Peligro OSHA: irritante Clasificación SGA: Irritación de los ojos (Categoría 2A) EI SGA: decreta incluir consejos de precaución en las etiquetas del producto,</p> <p>Pictograma </p> <p>Palabra de Advertencia: Atención</p> <p>Indicación de peligro (s): H319: Provoca irritación ocular grave. Consejos de prudencia (s): P305 + P351 + P338 EN LOS OJOS: Aclarar cuidadosamente con agua durante varios minutos. Si tiene lentes de contacto quitarlos y proseguir con el lavado.</p> <p>Clasificación HMIS: Peligro para la salud: 2 Fuego: 0 Riesgos físicos: 0</p> <p>Clasificación NFPA: Peligro para la salud: 2 Fuego: 0 Riesgo de reactividad: 0</p> <p>Efectos potenciales sobre la salud: Inhalación: Puede ser nocivo si se inhala. Causa irritación del tracto respiratorio. Piel: Puede ser nocivo si se absorbe por la piel. Provoca irritación cutánea. Ojos: Provoca irritación ocular. Ingestión: Puede ser nocivo si se ingiere.</p>
Información toxicológica	<p>Toxicidad aguda: no existente datos disponibles Carcinogenicidad: no existente datos disponibles Toxicidad reproductiva: no existente datos disponibles Efectos sinérgicos: no existente datos disponibles</p>
Información ecológica	<p>Toxicidad: Toxicidad en peces: LC-50 – <i>Jordanella floridae</i> - 10,500 mg/l - 2 h Persistencia y biodegradabilidad: no existente datos disponibles Potencial de biocumulación: no existente datos disponibles Movilidad en el suelo: no existente datos disponibles PBT y Análisis vPvB: no existente datos disponibles Otros efectos Adversos: no existente datos disponibles</p>
Información regulatoria	<p>Peligro OSHA: irritante</p> <p>SARA 311/312 Peligros: Peligro Agudo para la Salud</p>

Fuente: SIGMA-ALDRICH (2012), Material Safety Data Sheet. Product name: 4-Hydroxybenzyl alcohol. Version 3.2, 6 pp.

Tabla 12. Caracterización del riesgo, información toxicológica, ecológica y regulatoria del Butilhidroxitolueno - BHT.

Identificación del riesgo	<p>PERSPECTIVA GENERAL DE EMERGENCIA</p> <p>Clasificación WHMIS: D2B - Materiales tóxicos que causan otros efectos tóxicos, también es irritante moderado de la piel y los ojos</p> <p>Clasificación SGA: Toxicidad Oral aguda (Categoría 4), Irritación de la piel (Categoría 2), Irritación de los ojos (Categoría 2A), Toxicidad acuática aguda (Categoría 2), Toxicidad acuática crónica (Categoría 2)</p> <p>El SGA: decreta incluir consejos de precaución en las etiquetas del producto,</p> <p>Pictograma </p> <p>Palabra de Advertencia: Atención y Toxicidad acuática</p> <p>Indicación de peligro (s): H302 Nocivo en caso de ingestión, H315 Provoca irritación cutánea, H319 Provoca irritación ocular grave, H411 Tóxico para los organismos acuáticos, con efectos nocivos duraderos.</p> <p>Consejos de prudencia (s): P273 Evitar su liberación al medio ambiente; P305 + P351 + P338, EN LOS OJOS: Aclarar cuidadosamente con agua durante varios minutos. Si tiene lentes de contacto quitarlos y proseguir con el lavado.</p> <p>Clasificación HMIS: Peligro para la salud: 2 Fuego: 1 Riesgos físicos: 0</p> <p>Efectos potenciales sobre la salud: Inhalación: Puede ser nocivo si se inhala. Causa irritación del tracto respiratorio. Piel: Puede ser nocivo si se absorbe por la piel. Provoca irritación cutánea. Ojos: Provoca irritación ocular. Ingestión: Puede ser nocivo si se ingiere.</p>
Información toxicológica	<p>Toxicidad aguda: Oral LD50 en ratas 890.0 mg/kg</p> <p>Carcinogenicidad: IARC: 3 - Grupo 3: No clasificable como carcinógeno para los humanos</p> <p>Toxicidad reproductiva: no existente datos disponibles</p> <p>Efectos sinérgicos: no existente datos disponibles</p>
Información ecológica	<p>Toxicidad: Toxicidad en peces: LC-50 - <i>Oryzias</i> - 5,3 mg/l - 48 h</p> <p>Toxicidad para <i>Daphnia</i> y otros invertebrados acuáticos: EC50 - <i>D. pulex</i> (Waterflea) - 1.44 mg/l - 48 h</p> <p>Persistencia y biodegradabilidad: no existente datos disponibles</p> <p>Potencial de biocumulación: no existente datos disponibles</p> <p>Movilidad en el suelo: no existente datos disponibles</p> <p>PBT y Análisis vPvB: no existente datos disponibles</p> <p>Otros efectos Adversos: no existente datos disponibles</p>
Información regulatoria	<p>Clasificación WHMIS: D2B - Materiales tóxicos que causan otros efectos tóxicos, también es irritante moderado de la piel y los ojos</p>

Fuente: SIGMA-ALDRICH (2012), Material Safety Data Sheet. Product name: 2,6-Di-*tert*-butyl-4-methylphenol. Version 5.0, 7p.

Tabla 13. Caracterización del riesgo, información toxicológica, ecológica y regulatoria del 1H-Inden-1-one, 2,3-dihidro-.

<p style="writing-mode: vertical-rl; transform: rotate(180deg);">Identificación del riesgo</p>	<p>PERSPECTIVA GENERAL DE EMERGENCIA</p> <p>Clasificación WHMIS: No clasificado como peligroso. Clasificación SGA: No es una sustancia peligrosa. Clasificación HMIS: Peligro para la salud: 0 Fuego: 1 Riesgos físicos: 0</p> <p>Efectos potenciales sobre la salud: Inhalación: Puede ser nocivo si se inhala. Puede causar irritación del tracto respiratorio. Piel: Puede ser nocivo si se absorbe por la piel. Puede causar irritación de la piel. Ojos: Puede causar irritación de los ojos. Ingestión: Puede ser nocivo si se ingiere.</p>
<p style="writing-mode: vertical-rl; transform: rotate(180deg);">Información toxicológica</p>	<p>Toxicidad aguda: no existente datos disponibles Carcinogenicidad: no existente datos disponibles Toxicidad reproductiva: no existente datos disponibles Efectos sinérgicos: no existente datos disponibles</p>
<p style="writing-mode: vertical-rl; transform: rotate(180deg);">Información ecológica</p>	<p>Toxicidad: no existente datos disponibles Persistencia y biodegradabilidad: no existente datos disponibles Potencial de biocumulación: no existente datos disponibles Movilidad en el suelo: no existente datos disponibles PBT y Análisis vPvB: no existente datos disponibles Otros efectos Adversos: no existente datos disponibles</p>
<p style="writing-mode: vertical-rl; transform: rotate(180deg);">Información regulatoria</p>	<p>Clasificación WHMIS: no controlada.</p>

Fuente: SIGMA-ALDRICH (2010).Material Safety Data Sheet. Product name: 1-Indanone. Version 3.2, 5 p.

Tabla 14. Caracterización del riesgo, información toxicológica, ecológica y regulatoria del 4-Thiobenzonitrile.

Identificación del riesgo	<p>PERSPECTIVA GENERAL DE EMERGENCIA Clasificación en CHIP: Xn: R20/21/22 Clasificación según CLP: AcuteTox. 4: H302; Tox. 4: H312; Tox. 4: H332 Efectos adversos: Nocivo por inhalación, contacto con la piel y por ingestión.</p> <p>Pictograma </p> Palabra de advertencia: Nocivo Frases de riesgo: R20/21/22: Nocivo por inhalación, contacto con la piel y por ingestión. Frases de seguridad: S26: En caso de contacto con los ojos, enjuagar inmediatamente con abundante agua y buscar consejo médico, S36/37/39: Usar ropa protectora adecuada, guantes y protección ocular / facial
Información toxicológica	<p>Toxicidad aguda: 4, Ingerido, Inhalado, dérmico, basado en datos de prueba, los cuales, no están disponibles Carcinogenicidad: no existente datos disponibles Información adicional: alto riesgo químico, Clase III: asignado de acuerdo con árbol de decisión de Cramer.</p>
Información ecológica	<p>Toxicidad: no existente datos disponibles Persistencia y biodegradabilidad: fácilmente biodegradable Potencial de biocumulación: no existente datos disponibles Movilidad en el suelo: no existente datos disponibles PBT y Análisis vPvB: no existente datos disponibles Otros efectos Adversos: no existente datos disponibles</p>
Información regulatoria	<p>El compuesto debe disponerse de acuerdo a la reglamentación, local, regional y nacional</p>

Fuente: Apollo Scientific Limited (2011), Material Safety Data Sheet. Product name: 4-THIOBENZONITRILE. Version 2, 6 pp.

Tabla 15. Caracterización del riesgo, información toxicológica, ecológica y regulatoria de Vitamin A aldehyde.

Identificación del riesgo	<p>PERSPECTIVA GENERAL DE EMERGENCIA</p> <p>Clasificación de acuerdo con el Reglamento: (CE) No. 1272/2008 [EU-GHS/CLP] Toxicidad aguda, Oral (Categoría 4) Irritación de la piel (Categoría 2) Clasificación de acuerdo con la directiva europea 67/548/CEE o 1999/45/CE</p> <p>Etiquetado de acuerdo con el Reglamento: (CE) No. 1272/2008 [CLP] Nocivo en caso de ingestión. Irrita la piel.</p> <p>Pictograma </p> <p>Palabra de Advertencia: Atención</p> <p>Indicación de peligro (s): H302 Nocivo en caso de ingestión, H315 Provoca irritación cutánea.</p> <p>De acuerdo con la Directiva Europea 67/548/CEE en su versión modificada.</p> <p>Símbolo de peligro: </p> <p>R22 Nocivo por ingestión, R38 Irrita la piel. S22 No respirar el polvo, S36/37 usar indumentaria y guantes de protección adecuados.</p>
Información toxicológica	<p>Toxicidad aguda: sin datos disponibles Mutagenicidad: en células germinales; Genotoxicidad in vitro: - ratón – linfocitos por inhibición de ADN, Genotoxicidad in vitro: - rata - la glándula mamaria por la inhibición del ADN. Carcinogenicidad: IARC: Ninguno de los componentes de este producto, que presente niveles mayores que o igual a 0,1% se identifica comprobable, posible o confirmado carcinógeno por la IARC. Toxicidad para la reproducción: Los experimentos de laboratorio han demostrado efectos teratogénicos.</p> <p>Posibles efectos en la salud: Inhalación: Puede ser nocivo si se inhala. Causa irritación del tracto respiratorio. Ingestión: Nocivo por ingestión. Piel: Puede ser nocivo si se absorbe por la piel. Provoca irritación cutánea.</p> <p>Signos y síntomas de exposición: Trastornos gastrointestinales, la exposición repetida puede provocar sequedad o formación de grietas en la piel, Dolor de Cabeza</p>
Información ecológica	<p>Toxicidad: no existen datos disponibles Persistencia y biodegradabilidad: no existente datos disponibles Potencial de bioacumulación: no existente datos disponibles Movilidad en el suelo: no existente datos disponibles PBT y Análisis vPvB: no existente datos disponibles Otros efectos Adversos: no existente datos disponibles</p>
Información regulatoria	<p>Regulación (EC) No. 1907/2006.</p>

Fuente: SIGMA-ALDRICH, (2012) Material Safety Data Sheet. Product name: all trans-Retinal. Version 5.0, 6 p.

Tabla 16. Caracterización del riesgo, información toxicológica, ecológica y regulatoria de Dibutyl phthalate.

Identificación del riesgo	<p>PERSPECTIVA GENERAL DE EMERGENCIA</p> <p>Clasificación de acuerdo con el Reglamento (CE) No. 1272/2008 [EU-GHS/CLP] Toxicidad para la reproducción (categoría 1B); Toxicidad acuática aguda (Categoría 1) Clasificación de acuerdo con la directiva europea 67/548/CEE o 1999/45/CE Puede causar daños al feto. Posible riesgo de perjudicar la fertilidad. Muy tóxico para los organismos acuáticos.</p> <p>Etiquetado de acuerdo con el Reglamento (CE) No. 1272/2008 [CLP]</p> <p>Pictograma </p> <p>Palabra de aviso Peligro</p> <p>Indicación de peligro (s): H360Df Puede dañar al feto. Se sospecha que perjudica la fertilidad; H400 Muy tóxico para los organismos acuáticos.</p> <p>Consejos de prudencia (s): P201 Pedir instrucciones especiales antes del uso; P273 Evitar su liberación al medio ambiente; P308 + P313 EN CASO DE exposición manifiesta o presunta: Consultar a un médico / atención. Reservado exclusivamente a usuarios profesionales</p> <p>De acuerdo con la Directiva Europea 67/548/CEE en su versión modificada.</p> <p>Símbolo de Peligro (s) </p> <p>R Frase (s): R61 Puede perjudicar al feto; R50 Muy tóxico para los organismos acuáticos; R62 Posible riesgo de perjudicar la fertilidad.</p> <p>S Frase (s): S53 Evítese la exposición - recábense instrucciones especiales antes del uso; S45 En caso de accidente o malestar, acuda inmediatamente al médico (mostrar la etiqueta si es posible); S61 Evítese su liberación al medio ambiente. Consulte las instrucciones / seguridad especiales, hojas de datos.</p> <p>Restringido a usos profesionales</p>
Información toxicológica	<p>Toxicidad aguda: DL50 Oral - rata - 8.000 mg/kg; CL50 Inhalación - rata - 4.250 mg/m³; DL50 Cutáneo - conejo - > 20.860 mg/kg</p> <p>Mutagenicidad en células germinales: sin datos disponibles</p> <p>Carcinogenicidad: IARC: No se identifica ningún componente de este producto, que presente niveles mayores que igual a 0,1% como agente carcinógeno humano probable, posible o confirmado por la (IARC)</p> <p>Toxicidad para la reproducción: Posible tóxico reproductivo humano. La exposición excesiva puede provocar trastornos del aparato reproductor, según pruebas realizadas en animales de laboratorio.</p> <p>Efectos potenciales sobre la salud: Inhalación: Puede ser nocivo si se inhala; Ingestión: Puede ser nocivo si es tragado; Piel: Puede ser nocivo si es absorbido por la piel; Ojos: Puede provocar una irritación en los ojos.</p> <p>Signos y Síntomas de la Exposición: Náusea, Vértigo, Dolor de cabeza.</p>
Información ecológica	<p>Toxicidad:</p> <p>Toxicidad para los peces: CL50 – <i>Pimephales promelas</i> - 0,85 mg/l - 96,0 h; NOEC – <i>P. promelas</i> - 0,32 mg/l - 96,0 h</p> <p>Toxicidad para las <i>Daphnia</i> y otros invertebrados acuáticos: CL50 – <i>D. magna</i> - 3,7 mg/l - 48 h</p> <p>Persistencia y degradabilidad: sin datos disponibles</p> <p>Potencial de bioacumulación: <i>P. promelas</i> - 11 d -0,0348 mg/l; Factor de bioconcentración (FBC): 2.165</p> <p>Movilidad en el suelo: sin datos disponibles</p> <p>Resultados de la valoración PBT y vPvB: sin datos disponibles</p> <p>Otros efectos adversos: Muy tóxico para los organismos acuáticos, con efectos nocivos duraderos.</p>
Información regulatoria	<p>La hoja técnica de seguridad cumple con los requisitos de la Reglamento (CE) No. 1907/2006.</p>

Fuente: SIGMA-ALDRICH, (2012) Material Safety Data Sheet. Product name:Dibutyl phthalate. Version 4.5, 7p.

Tabla 17. Caracterización del riesgo, información toxicológica, ecológica y regulatoria de 2-Dodecen-1-yl(-)succinic anhydride.

Identificación del riesgo	<p>PERSPECTIVA GENERAL DE EMERGENCIA</p> <p>Clasificación de acuerdo con el Reglamento (CE) 1272/2008 [UE-GHS/CLP] Irritación cutáneas (Categoría 2); Irritación ocular (Categoría 2) Toxicidad específica en determinados órganos - exposición única (Categoría 3), H335</p> <p>Clasificación de acuerdo con las Directivas de la UE 67/548/CEE ó 1999/45/CE Irrita los ojos, la piel y las vías respiratorias.</p> <p>2.2 Elementos de la etiqueta Etiquetado de acuerdo con el Reglamento (CE) 1272/2008 [UE-GHS/CLP] Pictograma.</p> <p>Pictograma  Palabra de Advertencia atención</p> <p>Indicación(es) de peligro: H315 Provoca irritación cutánea; H319 Provoca irritación ocular grave; H335 Puede irritar las vías respiratorias.</p> <p>Declaración(es) de prudencia: P261 Evitar respirar el polvo/ el humo/ el gas/ la niebla/ los vapores/ el aerosol; P305 + P351 + P338 EN CASO DE CONTACTO CON LOS OJOS: Enjuagar con agua cuidadosamente durante varios minutos. Quitar las lentes de contacto cuando estén presentes y pueda hacerse con facilidad. Proseguir con el lavado.</p> <p>Declaración Suplementaria del Peligro: ninguno(a)</p> <p>De acuerdo con la Directiva Europea 67/548/CEE, y sus enmiendas. Símbolo(s) de peligrosidad </p> <p>Frase(s) - R R36/37/38 Irrita los ojos, la piel y las vías respiratorias.</p> <p>Frase(s) - S S26 En caso de contacto con los ojos, lávense inmediata y abundantemente con agua y acúdase a un médico. S37/39 Úsense guantes adecuados y protección para los ojos/la cara.</p>
Información toxicológica	<p>Toxicidad aguda: sin datos disponibles</p> <p>Mutagenicidad en células germinales: sin datos disponibles</p> <p>Carcinogenicidad: IARC: No se identifica ningún componente de este producto, que presente niveles mayores que igual a 0,1% como agente carcinógeno humano probable, posible o confirmado por la Agencia Internacional de Investigaciones sobre Carcinógenos (IARC).</p> <p>Toxicidad para la reproducción: sin datos disponibles</p> <p>Efectos potenciales sobre la salud: Inhalación: Puede ser nocivo si se inhala; Ingestión: Puede ser nocivo si es tragado; Piel: Puede ser nocivo si es absorbido por la piel; Ojos: Provoca irritación ocular grave.</p> <p>Signos y Síntomas de la Exposición: Según nuestras informaciones, creemos que no se han investigado adecuadamente las propiedades químicas, físicas y toxicológicas.</p>
Información ecológica	<p>Toxicidad: sin datos disponibles</p> <p>Persistencia y degradabilidad: sin datos disponibles</p> <p>Potencial de bioacumulación: sin datos disponibles</p> <p>Movilidad en el suelo: sin datos disponibles</p> <p>Resultados de la valoración PBT y vPvB: sin datos disponibles</p> <p>Otros efectos adversos: sin datos disponibles</p>
Información regulatoria	<p>Regulación (EC) No. 1907/2006.</p>

Fuente: SIGMA-ALDRICH, (2012). Material Safety Data Sheet. Product name: (2-Dodecen-1-yl)succinic anhydride. Version 5.0, 7p.

ANEXO 3

Caracterización del riesgo, información toxicológica, ecológica y regulatoria de compuestos orgánicos de la estación, Desembocadura Canal Interceptor CVC – Sur - E2.

Tabla 20. Caracterización del riesgo, información toxicológica, ecológica y regulatoria de Ursodeoxycholic acid.

Identificación del riesgo	<p>PERSPECTIVA GENERAL DE EMERGENCIA</p> <p>Clasificación SGA: Toxicidad aguda oral (Categoría 5)</p> <p>EI SGA: decreta incluir consejos de precaución en las etiquetas del producto,</p> <p>Pictograma: No</p> <p>Palabra de Advertencia: Atención</p> <p>Indicación de peligro (s): H303: Puede ser nocivo si se ingiere. Consejos de prudencia (s): No.</p> <p>Clasificación HMIS: Peligro para la salud: 1 Fuego: 0 Riesgos físicos: 0</p> <p>Efectos potenciales sobre la salud: Inhalación: Puede ser nocivo si se inhala. Causa irritación del tracto respiratorio. Piel: Puede ser nocivo si se absorbe por la piel. Provoca irritación cutánea. Ojos: Provoca irritación ocular. Ingestión: Puede ser nocivo si se ingiere.</p>
Información toxicológica	<p>Toxicidad aguda: Oral en ratas 4,600 mg/kg Carcinogenicidad: no existente datos disponibles Toxicidad reproductiva: no existente datos disponibles Efectos sinérgicos: no existente datos disponibles</p>
Información ecológica	<p>Toxicidad: no existente datos disponibles Persistencia y biodegradabilidad: no existente datos disponibles Potencial de bioacumulación: no existente datos disponibles Movilidad en el suelo: no existente datos disponibles PBT y Análisis vPvB: no existente datos disponibles Otros efectos Adversos: no existente datos disponibles</p>
Información regulatoria	<p>Clasificación WHMIS: No clasificado como peligroso. Este producto ha sido clasificado de acuerdo con los criterios de peligro de las Regulaciones de Productos Controlados y la MSDS contiene toda la información requerida por las Regulaciones de Productos Controlados</p>

Fuente: SIGMA-ALDRICH (2012). Material Safety Data Sheet. Product name: Ursodeoxycholic acid. Version 3.3, 6 p.

Tabla 21. Caracterización del riesgo, información toxicológica, ecológica y regulatoria del Azulene, 1,4-dimethyl-7-(1-methylethyl)-.

Identificación del riesgo	<p>PERSPECTIVA GENERAL DE EMERGENCIA</p> <p>Clasificación el Reglamento (CE) 1272/2008: Toxicidad aguda, Oral (Categoría 4), H302 Clasificación de acuerdo con las Directivas de la UE 67/548/CEE ó 1999/45/CE Xn Nocivo R22</p> <p>Pictograma </p> <p>Palabra de Advertencia: Atención</p> <p>Indicación de peligro (s): H302 Nocivo en caso de ingestión</p> <p>Consejos de prudencia (s): ninguno</p>
Información toxicológica	<p>Toxicidad aguda: Oral LD50 en ratas 1.550 mg/kg Carcinogenicidad: IARC: 3 - Grupo 3: No clasificable como carcinógeno para los humanos Toxicidad reproductiva: no existente datos disponibles Efectos sinérgicos: no existente datos disponibles Toxicidad específica en determinados órganos - exposición única: sin datos disponibles Toxicidad específica en determinados órganos - exposiciones repetidas: sin datos disponibles Peligro de aspiración: sin datos disponibles Información Adicional: RTECS: CO4790000</p> <p>Según nuestras informaciones, creemos que no se han investigado adecuadamente las propiedades químicas, físicas y toxicológicas.</p>
Información ecológica	<p>Toxicidad: Persistencia y biodegradabilidad: no existente datos disponibles Potencial de biocumulación: no existente datos disponibles Movilidad en el suelo: no existente datos disponibles PBT y Análisis vPvB: no existente datos disponibles Otros efectos Adversos: no existente datos disponibles</p>
Información regulatoria	<p>La hoja técnica de seguridad cumple con los requisitos del Reglamento (CE) No. 1907/2006. Reglamentación y legislación en materia de seguridad, salud y medio ambiente específicas para la sustancia o la mezcla: sin datos disponibles Evaluación de la seguridad química: Para este producto no se ha llevado a cabo una evaluación de la seguridad química</p>

Fuente: SIGMA-ALDRICH (2013). Material Safety Data Sheet. Product name: Azulene, 1,4-dimethyl-7-(1-methylethyl)-. Version 5.0, 7p.

Tabla 22. Caracterización del riesgo, información toxicológica, ecológica y regulatoria del Phenol, 4-(1,1,3,3-tetramethylbutyl)-.

Identificación del riesgo	<p>PERSPECTIVA GENERAL DE EMERGENCIA</p> <p>Clasificación el Reglamento (CE) 1272/2008: Irritación cutáneas (Categoría 2); Lesiones oculares graves (Categoría 1); Toxicidad acuática aguda (Categoría 1); Toxicidad acuática crónica (Categoría 1)</p> <p>Clasificación de acuerdo con las Directivas de la UE 67/548/CEE ó 1999/45/CE: Nocivo en contacto con la piel. Irrita la piel. Posibles efectos cancerígenos. Riesgo de lesiones oculares graves. Posible riesgo de perjudicar la fertilidad. Posibilidad de efectos irreversibles. Muy tóxico para los organismos acuáticos, puede provocar a largo plazo efectos negativos en el medio ambiente acuático.</p> <p style="text-align: center;">  </p> <p>Pictograma</p> <p>Palabra de Advertencia: Peligro</p> <p>Indicación(es) de peligro: H315 Provoca irritación cutánea; H318 Provoca lesiones oculares graves; H410 Muy tóxico para los organismos acuáticos, con efectos nocivos duraderos.</p> <p>Declaración(es) de prudencia:</p> <p>P273 Evitar su liberación al medio ambiente; P280 Llevar guantes de protección/ gafas de protección/ máscara de protección; P305 + P351 + P338 EN CASO DE CONTACTO CON LOS OJOS: Enjuagar con agua cuidadosamente durante varios minutos. Quitar las lentes de contacto cuando estén presentes y pueda hacerse con facilidad. Proseguir con el lavado; P501 Eliminar el contenido/ el recipiente en una planta de eliminación de residuos aprobada.</p> <p>De acuerdo con la Directiva Europea 67/548/CEE, y sus enmiendas. Símbolo(s) de peligrosidad</p> <p style="text-align: center;">  </p> <p>Frase(s) – R: R21 Nocivo en contacto con la piel; R38 Irrita la piel; R40 Posibles efectos cancerígenos; R41 Riesgo de lesiones oculares graves; R62 Posible riesgo de perjudicar la fertilidad; R68 Posibilidad de efectos irreversibles; R50/53 Muy tóxico para los organismos acuáticos, puede provocar a largo plazo efectos negativos en el medio ambiente acuático.</p> <p>Frase(s) – S: S26 En caso de contacto con los ojos, lávense inmediata y abundantemente con agua y acúdase a un médico; S36 Úsese indumentaria protectora adecuada; S61 Evítese su liberación al medio ambiente. Recábense instrucciones específicas de la ficha de datos de seguridad.</p>
Información toxicológica	<p>Toxicidad aguda: Oral LD50 en: ratas 4.600 mg/kg; ratón - 3.210 mg/kg; conejo - 1.880 mg/kg</p> <p>Mutagenicidad en células germinales: sin datos disponibles</p> <p>Carcinogenicidad: IARC: 3 - Grupo 3: No clasificable como carcinógeno para los humanos</p> <p>Toxicidad reproductiva: Supuesto tóxico reproductivo humano; ratón – Oral, efectos sobre el Neonato: Efectos a largo plazo; rata – macho, efectos sobre el Aparato Reprodutor: Espermatogénesis (incluyendo material genético, morfología, motilidad y recuento de los espermatozoides) Efectos sobre el Aparato Reprodutor: Testículos, epidídimo y espermiducto</p> <p>Toxicidad para el desarrollo: ratón – Oral, anomalías sistema urogenital; - rata – Oral, efectos sobre el Feto o Embrión: Muerte fetal; - rata - hembra - Subcutáneo, sistema Endocrino Anormalidades Específicas del Desarrollo: Sistema Urogenital</p>
Información ecológica	<p>Toxicidad: para los peces</p> <p>Ensayo dinámico CL50 - <i>Pimephales promelas</i> (Fathead minnow) - 0,25 mg/l - 96 h</p> <p>Ensayo estático CL50 - <i>Leuciscus idus</i> (Carpas doradas) - 2,2 mg/l - 96 h</p>
Información regulatoria	<p>La hoja técnica de seguridad cumple con los requisitos del Reglamento (CE) No. 1907/2006.</p> <p>Reglamentación y legislación en materia de seguridad, salud y medio ambiente específicas para la sustancia o la mezcla: sin datos disponibles</p> <p>Evaluación de la seguridad química: Para este producto no se ha llevado a cabo una evaluación de la seguridad química</p>

Fuente: SIGMA-ALDRICH (2012). Material Safety Data Sheet. Product name: 4-terc-Octilfenol -. Versión 5.0, 8p.

Tabla 23. Caracterización del riesgo, información toxicológica, ecológica y regulatoria del Linoleic acid ethyl ester.

Identificación del riesgo	<p>PERSPECTIVA GENERAL DE EMERGENCIA</p> <p>.Clasificación de la sustancia o de la mezcla No es una sustancia o mezcla peligrosa de acuerdo con el Reglamento (CE) No. 1272/2008. Esta sustancia no está clasificada como peligrosa según la Directiva 67/548/CEE.</p> <p>Elementos de la etiqueta El producto no necesita ser etiquetado de acuerdo con las directivas de la Comunidad Europea ó las respectivas leyes nacionales.</p> <p>Otros Peligros - ninguno(a)</p>
Información toxicológica	<p>Toxicidad aguda: no existente datos disponibles Carcinogenicidad: no existente datos disponibles Toxicidad reproductiva: no existente datos disponibles Efectos sinérgicos: no existente datos disponibles</p>
Información ecológica	<p>Toxicidad: no existente datos disponibles Persistencia y biodegradabilidad: no existente datos disponibles Potencial de biocumulación: no existente datos disponibles Movilidad en el suelo: no existente datos disponibles PBT y Análisis vPvB: no existente datos disponibles Otros efectos Adversos: no existente datos disponibles</p>
Información regulatoria	<p>La hoja técnica de seguridad cumple con los requisitos del Reglamento (CE) No. 1907/2006.</p> <p>Reglamentación y legislación en materia de seguridad, salud y medio ambiente específicas para la sustancia o la mezcla: sin datos disponibles</p> <p>Evaluación de la seguridad química: Para este producto no se ha llevado a cabo una evaluación de la seguridad química</p>

Fuente: SIGMA-ALDRICH. (2013). Material Safety Data Sheet. Product name: Linoleato de etilo. Versión 5.0, 8 p.

Tabla 24. Caracterización del riesgo, información toxicológica, ecológica y regulatoria del Phenol,2-methyl-4-(1,1,3,3-tetramethylbutyl)-.

<p style="writing-mode: vertical-rl; transform: rotate(180deg);">Identificación del riesgo</p>	<p>PERSPECTIVA GENERAL DE EMERGENCIA</p> <p>Clasificación de acuerdo con el Reglamento (CE) 1272/2008 [UE-GHS/CLP]: Irritación cutáneas (Categoría 2); Lesiones oculares graves (Categoría 1); Toxicidad específica en determinados órganos - exposición única (Categoría 3); Toxicidad acuática crónica (Categoría 4)</p> <p>Clasificación de acuerdo con las Directivas de la UE 67/548/CEE ó 1999/45/CE Irrita las vías respiratorias y la piel. Riesgo de lesiones oculares graves.</p> <p>Pictograma </p> <p>Palabra de Advertencia: Peligro</p> <p>Indicación(es) de peligro: H315 Provoca irritación cutánea; H318 Provoca lesiones oculares graves; H335 Puede irritar las vías respiratorias; H413 Puede ser nocivo para los organismos acuáticos, con efectos nocivos Duraderos.</p> <p>Declaración(es) de prudencia: P261 Evitar respirar el polvo/ el humo/ el gas/ la niebla/ los vapores/ el aerosol; P280 Llevar guantes de protección/ gafas de protección/ máscara de protección; P305 + P351 + P338 EN CASO DE CONTACTO CON LOS OJOS: Enjuagar con agua. cuidadosamente durante varios minutos. Quitar las lentes de contacto cuando estén presentes y pueda hacerse con facilidad. Proseguir con el lavado. Declaración Suplementaria del Peligro ninguno(a)</p> <p>De acuerdo con la Directiva Europea 67/548/CEE, y sus enmiendas. Símbolo(s) de peligrosidad </p> <p>Frase(s) – R: R37/38 Irrita las vías respiratorias y la piel. R41 Riesgo de lesiones oculares graves. Frase(s) – S: S26 En caso de contacto con los ojos, lávense inmediata y abundantemente con agua y acúdase a un médico. S39 Úsese protección para los ojos/la cara.</p>
<p style="writing-mode: vertical-rl; transform: rotate(180deg);">Información toxicológica</p>	<p>Toxicidad aguda: sin datos disponibles Mutagenicidad en células germinales: sin datos disponibles Carcinogenicidad: IARC: 3 - Grupo 3: No clasificable como carcinógeno para los humanos Toxicidad reproductiva: sin datos disponibles Toxicidad para el desarrollo: sin datos disponibles Signos y Síntomas de la Exposición: Según nuestras informaciones, creemos que no se han investigado adecuadamente las propiedades químicas, físicas y toxicológicas.</p>
<p style="writing-mode: vertical-rl; transform: rotate(180deg);">Información ecológica</p>	<p>Toxicidad: no existente datos disponibles Persistencia y biodegradabilidad: no existente datos disponibles Potencial de bioacumulación: no existente datos disponibles Movilidad en el suelo: no existente datos disponibles PBT y Análisis vPvB: no existente datos disponibles Otros efectos Adversos: no existente datos disponibles</p>
<p style="writing-mode: vertical-rl; transform: rotate(180deg);">Información regulatoria</p>	<p>La hoja técnica de seguridad cumple con los requisitos del Reglamento (CE) No. 1907/2006. Reglamentación y legislación en materia de seguridad, salud y medio ambiente específicas para la sustancia o la mezcla: sin datos disponibles Evaluación de la seguridad química: sin datos disponibles</p>

Fuente: SIGMA-ALDRICH (2012). Material Safety Data Sheet. Product name: 4-(1,1,3,3-Tetrametilbutil)-o-cresol. Version 5.0, 8p.

Tabla 25. Caracterización del riesgo, información toxicológica, ecológica y regulatoria del Nonacosane.

Identificación del riesgo	<p>PERSPECTIVA GENERAL DE EMERGENCIA</p> <p>.Clasificación de la sustancia o de la mezcla No es una sustancia o mezcla peligrosa de acuerdo con el Reglamento (CE) No. 1272/2008. Esta sustancia no está clasificada como peligrosa según la Directiva 67/548/CEE.</p> <p>Elementos de la etiqueta El producto no necesita ser etiquetado de acuerdo con las directivas de la Comunidad Europea ó las respectivas leyes nacionales.</p> <p>Otros Peligros - ninguno(a)</p>
Información toxicológica	<p>Toxicidad aguda: no existente datos disponibles Carcinogenicidad: no existente datos disponibles Toxicidad reproductiva: no existente datos disponibles Efectos sinérgicos: no existente datos disponibles Signos y Síntomas de la Exposición: Según nuestras informaciones, creemos que no se han investigado adecuadamente las propiedades químicas, físicas y toxicológicas.</p>
Información ecológica	<p>Toxicidad: no existente datos disponibles Persistencia y biodegradabilidad: no existente datos disponibles Potencial de biocumulación: no existente datos disponibles Movilidad en el suelo: no existente datos disponibles PBT y Análisis vPvB: no existente datos disponibles Otros efectos Adversos: no existente datos disponibles</p>
Información regulatoria	<p>La hoja técnica de seguridad cumple con los requisitos del Reglamento (CE) No. 1907/2006.</p> <p>Reglamentación y legislación en materia de seguridad, salud y medio ambiente específicas para la sustancia o la mezcla: sin datos disponibles</p> <p>Evaluación de la seguridad química: Para este producto no se ha llevado a cabo una evaluación de la seguridad química</p>

Fuente: SIGMA-ALDRICH (2012). Material Safety Data Sheet. Product name:Nonacosano. Versión 5.0, 8 p.

Tabla 26. Caracterización del riesgo, información toxicológica, ecológica y regulatoria del Palustric acid.

Identificación del riesgo	<p>PERSPECTIVA GENERAL DE EMERGENCIA</p> <p>Clasificación de la sustancia o de la mezcla Efectos agudos en los humanos desconocidos, por lo tanto, manejar con precaución. Estudios de sobreexposición en Animales sólo indican una ligera toxicidad oral en mamíferos.</p> <p>Efectos crónicos a largo plazo en los seres humanos desconocidos. No hay efectos significativos en ratas, ni efectos de la sobreexposición en perros alimentados con aceite de la resina durante 2 años. No está listado por la ACGIH</p>
Información toxicológica	<p>Toxicidad aguda: no existente datos disponibles Carcinogenicidad: no existente datos disponibles Toxicidad reproductiva: no existente datos disponibles Efectos sinérgicos: no existente datos disponibles</p>
Información ecológica	<p>Toxicidad para peces: 96 hr, LC 50: 0.5 - 0.6 mg/L (rainbow trout) Persistencia y biodegradabilidad: no existente datos disponibles Potencial de biocumulación: no existente datos disponibles Movilidad en el suelo: no existente datos disponibles PBT y Análisis vPvB: no existente datos disponibles Otros efectos Adversos: no existente datos disponibles</p>
Información regulatoria	<p>Reglamentación y legislación en materia de seguridad, salud y medio ambiente específicas para la sustancia o la mezcla: sin datos disponibles</p> <p>Evaluación de la seguridad química: Para este producto no se ha llevado a cabo una evaluación de la seguridad química</p>

Fuente: CANSYN CHEMICAL CORP. (2010). Material Safety Data Sheet. Product name: Palustric acid. R006. Revisión, 2 p.

Tabla 27. Caracterización del riesgo, información toxicológica, ecológica y regulatoria del **n-Butyl ricinolate**.

Identificación del riesgo	<p>PERSPECTIVA GENERAL DE EMERGENCIA</p> <p>Clasificación de la sustancia o de la mezcla Inhalación: Puede causar irritación del tracto respiratorio Ingestión: Puede ser nocivo si se ingiere. Contacto con la piel: Puede provocar una reacción alérgica en la piel Contacto con los ojos: Evítese el contacto con los ojos Declaraciones de peligro Puede provocar una reacción alérgica de la piel.</p>
Información toxicológica	<p>Toxicidad aguda: no existente datos disponibles Toxicidad crónica: puede causar náuseas y vómitos, e inconsciencia. Carcinogenicidad: no existente datos disponibles Toxicidad reproductiva: no existente datos disponibles Efectos sinérgicos: no existente datos disponibles</p>
Información ecológica	<p>Toxicidad acuática: Puede provocar a largo plazo efectos negativos en el medio medio ambiente acuático. Persistencia y biodegradabilidad: no existente datos disponibles Potencial de biocumulación: no existente datos disponibles Movilidad en el suelo: no existente datos disponibles PBT y Análisis vPvB: no existente datos disponibles Otros efectos Adversos: no existente datos disponibles</p>
Información regulatoria	<p>SARA 313 de emisión informes: Emisiones Tóxicas de los productos químicos. No incluido CERCLA / SARA Sección NTP 302: Extremadamente Peligroso. No incluido IARC - INTERNATIONAL AGENCY FOR RESEARCH ON CANCER: No incluido</p>

Fuente: MP Biomedicals, LLC. (2006). Material Safety Data Sheet. Product name: n-BUTYL RICINOLEATE PRACTICAL GRADE. 5p.

ANEXO 4

Caracterización del riesgo, información toxicológica, ecológica y regulatoria de compuestos orgánicos de la estación, Bocatoma de la Planta de Potabilización – Puerto Mallarino – E3.

Tabla 30. Caracterización del riesgo, información toxicológica, ecológica y regulatoria del Palmitic acid ethyl ester.

Identificación del riesgo	<p>PERSPECTIVA GENERAL DE EMERGENCIA</p> <p>No es una sustancia o mezcla peligrosa de acuerdo con el Reglamento (CE) No. 1272/2008. Esta sustancia no está clasificada como peligrosa según la Directiva 67/548/CEE.</p> <p>Elementos de la etiqueta: El producto no necesita ser etiquetado de acuerdo con las directivas de la Comunidad Europea ó las respectivas leyes nacionales.</p> <p>Otros Peligros - ninguno(a)</p>
Información toxicológica	<p>Toxicidad aguda: sin datos disponibles Corrosión o irritación cutáneas: sin datos disponibles Lesiones o irritación ocular graves: sin datos disponibles Sensibilización respiratoria o cutánea: sin datos disponibles Mutagenicidad en células germinales: sin datos disponibles Carcinogenicidad: IARC: No se identifica ningún componente de este producto, que presente niveles mayores que o igual a 0,1% como agente carcinógeno humano probable, posible o confirmado por la (IARC) Agencia Internacional de Investigaciones sobre Carcinógenos. Toxicidad para la reproducción: sin datos disponibles Toxicidad específica en determinados órganos - exposición única: sin datos disponibles Toxicidad específica en determinados órganos - exposiciones repetidas: sin datos disponibles</p> <p>Efectos potenciales sobre la salud Inhalación: Puede ser nocivo si se inhala. Puede provocar una irritación en el tracto respiratorio. Ingestión: Puede ser nocivo si es tragado. Piel Puede ser nocivo si es absorbido por la piel. Puede provocar una irritación de la piel. Ojos: Puede provocar una irritación en los ojos. Signos y Síntomas de la Exposición: Según nuestras informaciones, creemos que no se han investigado adecuadamente las propiedades químicas, físicas y toxicológicas.</p>
Información ecológica	<p>Toxicidad: sin datos disponibles Persistencia y biodegradabilidad: sin datos disponibles Potencial de biocumulación: sin datos disponibles Movilidad en el suelo: sin datos disponibles PBT y Análisis vPvB: sin datos disponibles Otros efectos Adversos: sin datos disponibles</p>
Información regulatoria	<p>La hoja técnica de seguridad cumple con los requisitos de la Reglamento (CE) No. 1907/2006. Reglamentación y legislación en materia de seguridad, salud y medio ambiente específicas para la sustancia o la mezcla: sin datos disponibles</p> <p>Evaluación de la seguridad química Para este producto: no se ha llevado a cabo una evaluación de la seguridad química.</p>

Fuente: SIGMA-ALDRICH. (2012).Ficha de datos de seguridad. Nombre del producto: Palmitato de etilo. Versión 5.0, 8p.

Tabla 31. Caracterización del riesgo, información toxicológica, ecológica y regulatoria del 2-Hydroxybenzyl alcohol.

<p style="writing-mode: vertical-rl; transform: rotate(180deg);">Identificación del riesgo</p>	<p>PERSPECTIVA GENERAL DE EMERGENCIA</p> <p>Clasificación de acuerdo con el Reglamento (CE) 1272/2008 Irritación cutáneas (Categoría 2), H315, Irritación ocular (Categoría 2), H319, Toxicidad específica en determinados órganos - exposición única (Categoría 3), H335</p> <p>Clasificación de acuerdo con las Directivas de la UE 67/548/CEE ó 1999/45/CE Xi Irritante R36/37/38</p> <p>Pictograma </p> <p>Palabra de Advertencia: Atención</p> <p>Indicación(es) de peligro: H315 Provoca irritación cutánea. H319 Provoca irritación ocular grave. H335 Puede irritar las vías respiratorias.</p> <p>Declaración(es) de prudencia: P261 Evitar respirar el polvo/ el humo/ el gas/ la niebla/ los vapores/ el aerosol. P305 + P351 + P338 EN CASO DE CONTACTO CON LOS OJOS: Enjuagar con agua cuidadosamente durante varios minutos. Quitar las lentes de contacto cuando estén presentes y pueda hacerse con facilidad. Proseguir con el lavado.</p>
<p style="writing-mode: vertical-rl; transform: rotate(180deg);">Información toxicológica</p>	<p>Toxicidad aguda: sin datos disponibles Corrosión o irritación cutáneas: sin datos disponibles Lesiones o irritación ocular graves: sin datos disponibles Sensibilización respiratoria o cutánea: sin datos disponibles Mutagenicidad en células germinales: sin datos disponibles Carcinogenicidad: IARC: No se identifica ningún componente de este producto, que presente niveles mayores que o igual a 0,1% como agente carcinógeno humano probable, posible o confirmado por la (IARC) Agencia Internacional de Investigaciones sobre Carcinógenos. Toxicidad para la reproducción: Toxicidad para la reproducción - rata – Subcutáneo Efectos sobre la Fertilidad: Mortalidad post-implantación: (p.e.: nº total de implantaciones muertas o reabsorbidas por nº total de implantaciones) Anormalidades Específicas del Desarrollo: Sistema musculo-esquelético Toxicidad específica en determinados órganos - exposición única: Inhalación - Puede irritar las vías respiratorias. Toxicidad específica en determinados órganos - exposiciones repetidas: sin datos disponibles Peligro de aspiración: sin datos disponibles</p> <p>Información Adicional RTECS: DO6430000: Los efectos pueden variar desde irritación leve hasta destrucción profunda del tejido, según la intensidad y duración de la exposición., la exposición prolongada o repetida puede provocar., Lesiones oculares, Según nuestras informaciones, creemos que no se han investigado adecuadamente las propiedades químicas, físicas y toxicológicas.</p>
<p style="writing-mode: vertical-rl; transform: rotate(180deg);">Información ecológica</p>	<p>Toxicidad: sin datos disponibles Persistencia y biodegradabilidad: sin datos disponibles Potencial de bioacumulación: sin datos disponibles Movilidad en el suelo: sin datos disponibles PBT y Análisis vPvB: sin datos disponibles Otros efectos Adversos: sin datos disponibles</p>
<p style="writing-mode: vertical-rl; transform: rotate(180deg);">Información regulatoria</p>	<p>La hoja técnica de seguridad cumple con los requisitos de la Reglamento (CE) No. 1907/2006. Reglamentación y legislación en materia de seguridad, salud y medio ambiente específicas para la sustancia o la mezcla: sin datos disponibles</p> <p>Evaluación de la seguridad química Para este producto: no se ha llevado a cabo una evaluación de la seguridad química.</p>

Fuente: SIGMA-ALDRICH. (2013).Ficha de datos de seguridad. Nombre del producto: Alcohol 2-hidroxi-bencílico. Versión 5.2, 8p.

Tabla 32. Caracterización del riesgo, información toxicológica, ecológica y regulatoria del L-Lysine, N(6)-[(1,1-dimethylethoxy)carbonyl]-N(2)-[(9H

Identificación del riesgo	<p>PERSPECTIVA GENERAL DE EMERGENCIA</p> <p>No es una sustancia o mezcla peligrosa de acuerdo con el Reglamento (CE) No. 1272/2008. No es una sustancia o mezcla peligrosa según la Directiva de la CE 67/548/CEE ó 1999/45/CE. Elementos de la etiqueta: El producto no necesita ser etiquetado de acuerdo con las directivas de la Comunidad Europea ó las respectivas leyes nacionales.</p> <p>Otros Peligros - ninguno(a)</p>
Información toxicológica	<p>Toxicidad aguda: sin datos disponibles Corrosión o irritación cutáneas: sin datos disponibles Lesiones o irritación ocular graves: sin datos disponibles Sensibilización respiratoria o cutánea: sin datos disponibles Mutagenicidad en células germinales: sin datos disponibles Carcinogenicidad: IARC: No se identifica ningún componente de este producto, que presente niveles mayores que o igual a 0,1% como agente carcinógeno humano probable, posible o confirmado por la (IARC) Agencia Internacional de Investigaciones sobre Carcinógenos. Toxicidad para la reproducción: sin datos disponibles Toxicidad específica en determinados órganos - exposición única: sin datos disponibles Toxicidad específica en determinados órganos - exposiciones repetidas: sin datos disponibles</p> <p>Efectos potenciales sobre la salud Inhalación: Puede ser nocivo si se inhala. Puede provocar una irritación en el tracto respiratorio. Ingestión: Puede ser nocivo si es tragado. Piel Puede ser nocivo si es absorbido por la piel. Puede provocar una irritación de la piel. Ojos: Puede provocar una irritación en los ojos.</p>
Información ecológica	<p>Toxicidad: sin datos disponibles Persistencia y biodegradabilidad: sin datos disponibles Potencial de biocumulación: sin datos disponibles Movilidad en el suelo: sin datos disponibles PBT y Análisis vPvB: sin datos disponibles Otros efectos Adversos: sin datos disponibles</p>
Información regulatoria	<p>La hoja técnica de seguridad cumple con los requisitos de la Reglamento (CE) No. 1907/2006. Reglamentación y legislación en materia de seguridad, salud y medio ambiente específicas para la sustancia o la mezcla: sin datos disponibles</p> <p>Evaluación de la seguridad química: sin datos disponibles</p>

Fuente: SIGMA-ALDRICH. (2012). Ficha de datos de seguridad. Nombre del producto: Fmoc-Lys(Boc)-OH. Versión 5.0, 8 p.

ANEXO 5

Caracterización del riesgo, información toxicológica, ecológica y regulatoria de compuestos orgánicos de la estación Puente Juanchito – E4.

Tabla 35. Caracterización del riesgo, información toxicológica, ecológica y regulatoria del 1,2-Benzenedicarboxilic acid, diisooctylester.

Identificación del riesgo	<p>PERSPECTIVA GENERAL DE EMERGENCIA</p> <p>Clasificación de acuerdo con el Reglamento (CE) 1272/2008 [UE-GHS/CLP] Toxicidad para la reproducción (Categoría 1B)</p> <p>Clasificación de acuerdo con las Directivas de la UE 67/548/CEE ó 1999/45/CE Puede perjudicar la fertilidad. Riesgo durante el embarazo de efectos adversos para el feto.</p> <p>Elementos de la etiqueta</p> <p>Etiquetado de acuerdo con el Reglamento (CE) 1272/2008 [UE-GHS/CLP] Pictograma</p>  <p>Palabra de advertencia: Peligro</p> <p>Indicación(es) de peligro: H360FD Puede perjudicar a la fertilidad. Puede dañar al feto.</p> <p>Declaración(es) de prudencia: P201 Pedir instrucciones especiales antes del uso. P308 + P313 EN CASO DE exposición manifiesta o presunta: Consultar a un médico.</p> <p>Declaración Suplementaria del Peligro: ninguno(a). Reservado exclusivamente a usuarios profesionales.</p> <p>De acuerdo con la Directiva Europea 67/548/CEE, y sus enmiendas. Símbolo(s) de peligrosidad</p>  <p>Frase(s) – R: R60 Puede perjudicar la fertilidad. R61 Riesgo durante el embarazo de efectos adversos para el feto.</p> <p>Frase(s) – S: S53 Evítese la exposición - recábense instrucciones especiales antes del uso. S45 En caso de accidente o malestar, acúdase inmediatamente al médico (si es posible, muéstresele la etiqueta). Reservado exclusivamente a usuarios profesionales.</p> <p>Otros Peligros - ninguno(a)</p>
Información toxicológica	<p>Toxicidad aguda: sin datos disponibles</p> <p>Corrosión o irritación cutáneas: sin datos disponibles</p> <p>Lesiones o irritación ocular graves: sin datos disponibles</p> <p>Sensibilización respiratoria o cutánea: sin datos disponibles</p> <p>Mutagenicidad en células germinales: sin datos disponibles</p> <p>Carcinogenicidad: IARC: Grupo 3: No clasificable como carcinogénico para los humanos (bis(2-Ethylhexyl) phthalate)</p> <p>Toxicidad para la reproducción: sin datos disponibles</p> <p>Toxicidad específica en determinados órganos - exposición única: sin datos disponibles</p> <p>Toxicidad específica en determinados órganos - exposiciones repetidas: sin datos disponibles</p> <p>Peligro de aspiración: sin datos disponibles</p>
Información ecológica	<p>Toxicidad: sin datos disponibles</p> <p>Persistencia y biodegradabilidad: sin datos disponibles</p> <p>Potencial de biocumulación: sin datos disponibles</p> <p>Movilidad en el suelo: sin datos disponibles</p> <p>PBT y Análisis mPmB: sin datos disponibles</p> <p>Otros efectos Adversos: Nocivo para los organismos acuáticos, con efectos nocivos duraderos.</p>
Información regulatoria	<p>La hoja técnica de seguridad cumple con los requisitos de la Reglamento (CE) No. 1907/2006.</p> <p>Reglamentación y legislación en materia de seguridad, salud y medio ambiente específicas para la sustancia o la mezcla: sin datos disponibles</p> <p>Evaluación de la seguridad química Para este producto: sin datos disponibles</p>

Fuente: SIGMA-ALDRICH (2012). Ficha de datos de seguridad. Nombre del producto: Ftalato de diisooctilo. Versión 5.0, 7p.

Tabla 36. Caracterización del riesgo, información toxicológica, ecológica y regulatoria del 2-Hydroxybenzothiazole.

Identificación del riesgo	<p>PERSPECTIVA GENERAL DE EMERGENCIA</p> <p>Clasificación de acuerdo con el Reglamento (CE) 1272/2008 Toxicidad aguda, Inhalación (Categoría 4), H332 Toxicidad aguda, Cutáneo (Categoría 4), H312 Toxicidad aguda, Oral (Categoría 4), H302</p> <p>Clasificación de acuerdo con las Directivas de la UE 67/548/CEE ó 1999/45/CE Xn Nocivo R20/21/22</p> <p>Pictograma </p> <p>Palabra de Advertencia: Atención</p> <p>Indicación(es) de peligro: H302 Nocivo en caso de ingestión, H312 Nocivo en contacto con la piel, H332 Nocivo en caso de inhalación.</p> <p>Declaración(es) de prudencia: P280 Llevar guantes de protección/ prendas de protección. Declaración Suplementaria del Peligro: ninguno(a)</p>
Información toxicológica	<p>Toxicidad aguda: sin datos disponibles Corrosión o irritación cutáneas: sin datos disponibles Lesiones o irritación ocular graves: sin datos disponibles Sensibilización respiratoria o cutánea: sin datos disponibles Mutagenicidad en células germinales: sin datos disponibles Carcinogenicidad: IARC: No se identifica ningún componente de este producto, que presente niveles mayores que o igual a 0,1% como agente carcinógeno humano probable, posible o confirmado por la (IARC) Agencia Internacional de Investigaciones sobre Carcinógenos. Toxicidad para la reproducción: sin datos disponibles Toxicidad específica en determinados órganos - exposición única: sin datos disponibles Toxicidad específica en determinados órganos - exposiciones repetidas: sin datos disponibles Peligro de aspiración: sin datos disponibles</p>
Información ecológica	<p>Toxicidad: sin datos disponibles Persistencia y biodegradabilidad: sin datos disponibles Potencial de biocumulación: sin datos disponibles Movilidad en el suelo: sin datos disponibles PBT y Análisis vPvB: sin datos disponibles Otros efectos Adversos: sin datos disponibles</p>
Información regulatoria	<p>La hoja técnica de seguridad cumple con los requisitos de la Reglamento (CE) No. 1907/2006. Reglamentación y legislación en materia de seguridad, salud y medio ambiente específicas para la sustancia o la mezcla: sin datos disponibles</p> <p>Evaluación de la seguridad química Para este producto: no se ha llevado a cabo una evaluación de la seguridad química.</p>

Fuente: SIGMA-ALDRICH (2013). Ficha de datos de seguridad. Nombre del producto: 2-Hydroxybenzothiazole. Versión 5.1, 8p.

ANEXO 6

Caracterización del riesgo, información toxicológica, ecológica y regulatoria de compuestos orgánicos de la estación Desembocadura río Cali – E5.

Tabla 39. Caracterización del riesgo, información toxicológica, ecológica y regulatoria del Isopimaric Acid.

Identificación del riesgo	<p>PERSPECTIVA GENERAL DE EMERGENCIA</p> <p>Clasificación de acuerdo con el Reglamento (CE): 1272/2008 Toxicidad acuática aguda (Categoría 1): H400</p> <p>Elementos de la etiqueta: Etiquetado de acuerdo con el Reglamento (CE) 1272/2008</p> <p>Pictograma</p> <div style="text-align: center;">  </div> <p>Palabra de advertencia: Atención</p> <p>Indicación(es) de peligro: H400 Muy tóxico para los organismos acuáticos. Declaración(es) de prudencia: P273 Evitar su liberación al medio ambiente. Declaración Suplementaria del Peligro: ninguno(a)</p> <p>Otros Peligros - ninguno(a)</p>
Información toxicológica	<p>Toxicidad aguda: sin datos disponibles Corrosión o irritación cutáneas: sin datos disponibles Lesiones o irritación ocular graves: sin datos disponibles Sensibilización respiratoria o cutánea: sin datos disponibles Mutagenicidad en células germinales: sin datos disponibles Carcinogenicidad: IARC: No se identifica ningún componente de este producto, que presente niveles mayores que o igual a 0,1% como agente carcinógeno humano probable, posible o confirmado por la (IARC) Agencia Internacional de Investigaciones sobre Carcinógenos. Toxicidad para la reproducción: sin datos disponibles Toxicidad específica en determinados órganos - exposición única: sin datos disponibles Toxicidad específica en determinados órganos - exposiciones repetidas: sin datos disponibles Peligro de aspiración: sin datos disponibles Información Adicional: RTECS: sin datos disponibles. Según nuestras informaciones: creemos que no se han investigado adecuadamente las propiedades químicas, físicas y toxicológicas.</p>
Información ecológica	<p>Toxicidad: Toxicidad para los peces, CL50 – <i>Pimephales promelas</i> - 0,87 mg/l - 96 h Persistencia y degradabilidad: sin datos disponibles Potencial de bioacumulación: Bioacumulación <i>Oncorhynchus mykiss</i> (Trucha arcoiris) - 14 d- 2,7 µg/l Factor de bioconcentración (FBC): 34 Movilidad en el suelo: sin datos disponibles 12.5 Resultados de la valoración PBT y mPmB: La valoración de PBT / mPmB no está disponible ya que la evaluación de la seguridad química no es necesaria / no se ha realizado Otros efectos adversos: Muy tóxico para los organismos acuáticos, sin datos disponibles</p>
Información regulatoria	<p>La hoja técnica de seguridad cumple con los requisitos de la Reglamento (CE) No. 1907/2006. Reglamentación y legislación en materia de seguridad, salud y medio ambiente específicas para la sustancia o la mezcla: sin datos disponibles Evaluación de la seguridad química: Para este producto no se ha llevado a cabo una evaluación de la seguridad química.</p>

Fuente: Modificada de SIGMA-ALDRICH (2012). Ficha de datos de seguridad. Nombre del producto: Isopimaric Acid. Versión 5.2, 7 p.

ANEXO 7

Ponencia presentada en el XLVIII, Congreso Nacional de Ciencias Biológicas, Bogotá, Octubre 2013.

ASOCIACIÓN COLOMBIANA DE CIENCIAS BIOLÓGICAS

PERSONERÍA JURÍDICA 05547 – Diciembre 16 de 1974
Nit. 805.014.676-1



Bogotá, 25 de agosto 2013

Doctor(es):

Gloria Amparo Jiménez Botero, Alejandro Soto Duque & Ricardo Álvarez León

Ref. Trabajo de Investigación

Apreciado Doctor(es):

Conocedores de su trayectoria científica y su experiencia en el medio Universitario, me permito informar a usted y a la Institución a la cual usted representa, que su trabajo titulado **ANÁLISIS DEL RIESGO AMBIENTAL POR ALQUIL-FENOLES PRESENTES EN AGUAS DEL RÍO CAUCA A SU PASO POR LA ZONA URBANA DE LA CIUDAD DE CALI..** Fue **ACEPTADO** para ser presentado en el **XLVIII CONGRESO NACIONAL DE CIENCIAS BIOLÓGICAS** el cual se llevará a cabo del 6 al 9 de Octubre en la Ciudad de Bogotá, Universidad del Bosque

Esperamos contar con su valiosa asistencia a éste evento, de trayectoria Científica.

Cordialmente.

COMITÉ ACADÉMICO CONGRESO.

ASOCIACION COLOMBIANA DE CIENCIAS BIOLÓGICAS

ANÁLISIS DEL RIESGO AMBIENTAL POR ALQUIL-FENOLES PRESENTES EN AGUAS DEL RÍO CAUCA A SU PASO POR LA ZONA URBANA DE LA CIUDAD DE CALI

Gloria Amparo Jiménez-Botero¹; Alejandro Soto-Duque²; Ricardo Alvarez-León³

¹Docente investigadora grupo GEADES, Universidad Autónoma de Occidente, gajimenez@uao.edu.co

²Docente investigadora grupo GEADES, Universidad Autónoma de Occidente, asoto@uao.edu.co

³Docente investigador, Universidad de Manizales, ricardoalvarezleon@gmail.com

RESUMEN

Las aguas del río Cauca a su paso por la zona urbana de la ciudad de Cali, presentan un alto grado de contaminación evidenciado en los siguientes hallazgos: Mutagenicidad, metales pesados (Hg, Cr, Cd y Pb); pesticidas (diazinon, lindano, clordano, clorpirifos, etil-paration, malation, heptaclor, aldrin, α -endosulfan), y de compuestos orgánicos entre los que destacan los alquil-fenoles.

El objetivo del presente trabajo fue analizar el riesgo ambiental en cinco estaciones de muestreo, en la zona de estudio, debido a la presencia de fenoles en el río Cauca. Teniendo como base que algunos de los alquil-fenoles encontrados presentan riesgo de disrupción endocrina en mamíferos incluyendo el hombre.

Se aplicó la técnica de cromatografía de gases acoplada a espectrometría de masas y se identificaron 70 compuestos orgánicos, entre los cuales están algunos Alquil-fenoles, a dichos compuestos se les identificó el riesgo, con el soporte de las bases de datos: Pubmed Compounds, Pubmed Chem, Science Direct, IARC – International Agency of Researchon Cancer y las hojas de seguridad (MSDS). En esta búsqueda se encontró que un grupo de estos fenoles presentan riesgo a la salud humana y a los ecosistemas acuáticos, otros se encuentran sin caracterización del riesgo, y un último grupo sin información.

Lo anterior, será de gran utilidad para que los entes de control de la región: Corporación Autónoma Regional - CAR, Autoridades locales, y Nacionales, puedan tomar las medidas necesarias para la gestión adecuada del río.

ÁREA DE ESTUDIO

El área de estudio está delimitada por el tramo del Río Cauca localizado entre el puente de El Hormiguero y la Desembocadura del Río Cali. (Figura 1).

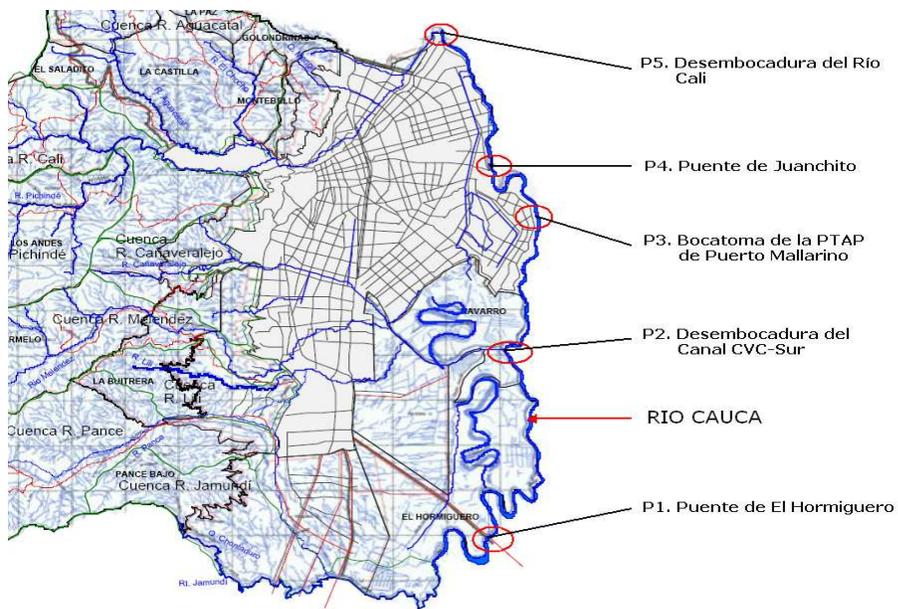


Figura 1. Mapa de la Ciudad de Cali indicando las estaciones de muestreo en el Río Cauca.

El Puente de El Hormiguero se denominó como estación de muestreo (E1), cuyas coordenadas geográficas son $03^{\circ} 18' 09,2''$ N, longitud oeste $76^{\circ} 28' 50,8''$ W y altitud 978.3 msnm; la estación (E2): Desembocadura del Canal CVC-Sur $03^{\circ} 22' 40,2''$ N: $76^{\circ} 28' 17,7''$ W y altitud 967.1 msnm; la estación (E3): Bocatoma de la PTAP de Puerto Mallarino $03^{\circ} 26' 45,4''$ N, $76^{\circ} 28' 30,4''$ W y altitud 966.6 msnm; la estación (E4): Puente de Juanchito $03^{\circ} 26' 59''$ N, $76^{\circ} 28' 32,1''$ W y altitud 963.6 msnm; y la estación (E5): Desembocadura del Río Cali con coordenadas $03^{\circ} 30' 20,9''$ N, $76^{\circ} 29' 29,8''$ W: y altitud 965.8 msnm.

OBJETIVO

El objetivo del presente trabajo fue analizar el riesgo ambiental en cinco estaciones de muestreo, en la zona de estudio (Figura 1), debido a la presencia de fenoles en el río Cauca a su paso por la zona urbana de Cali.

METODOLOGÍA

Se colectaron las muestras de agua de cada una de las estaciones de muestreo, en envases ámbar de 4 litros, se refrigeró a 4 grados hasta su filtración con filtros

de membrana de 0.45 µm, y extracción en fase sólida, con cartuchos OASIS HLB, se aplicó método OASIS de extracción para fenoles.

Los extractos se leyeron en un GC/MS Agilent 6890 N con MS detector Agilent 5973 N e inyección automática Agilent 7673. Columna capilar DB-5MS of 30 m de longitud, 250 µm de diámetro y 0.30 µm de espesor de película modelo No. J&W 122-5532. temperatura máxima de 325 °C. Flujo constante de 1 mL/min. Detector de temperatura de 250 °C. Modo Pulsed Splitless, temperatura Quadropole de 150 °C. Fuente de ionización de 230 °C. Temperatura inicial del horno de 50 °C/min, a una rata de 25 °C/min hasta 100 °C, luego a una rata de 5 °C/min hasta 300 °C durante 5 min.

RESULTADOS Y ANÁLISIS

Usando la metodología anterior se detectaron en la Estación 1, los fenoles: Benzenemethanol,4-hydroxy, y Butylated hydroxytoluene- BHT. (Figura 2).

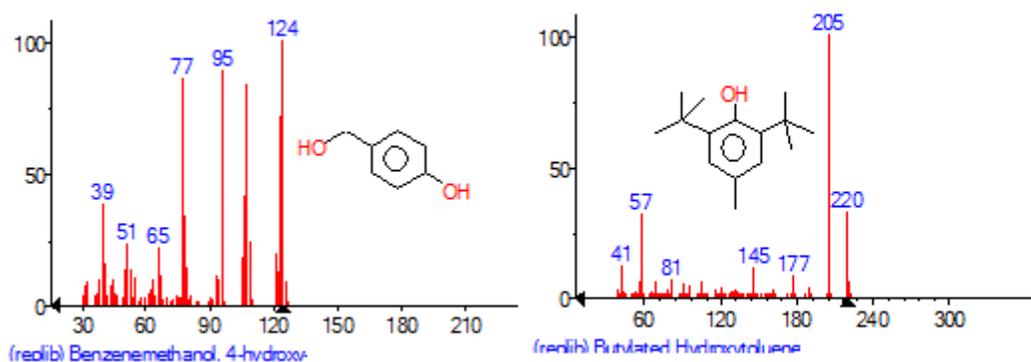


Figura 2. Cromatogramas de los fenoles: Benzenemethanol,4-hydroxy, yButylated hydroxytoluene- BHT.

EL Benzenemethanol,4-hydroxy, presenta toxicidad aguda para la salud humana, y toxicidad en peces: LC-50 – *Jordanella floridae* - 10,5 mg/l - 2 h; y el Butylated hydroxytoluene- BHT, registra toxicidad en peces: LC-50 – *Oryzias sp.*– 5,3 mg/l - 48 h, en *Daphnia* y otros invertebrados acuáticos: EC50 – *Daphnia pulex* (Waterflea) - 1.44 mg/l - 48 h. Kouki- Inai *et al.* (1988), registran el BHT, como un compuesto que produce tumores en el hígado del ratón macho B6CC3F1, en el mismo sentido, Chihoung *et al.* (1992), confirmaron que el BHT, es un antioxidante para grasas y aceites, pero no presenta actividad antimutágena, contrariamente aumenta la respuesta del test de Ames, en presencia de activador enzimático.

En la estación 2, se identificaron los fenoles Phenol, 4-(1,1,3,3-tetramethylbutyl)-, y Phenol,2-methyl-4-(1,1,3,3-tetramethylbutyl)-. Figura 3.

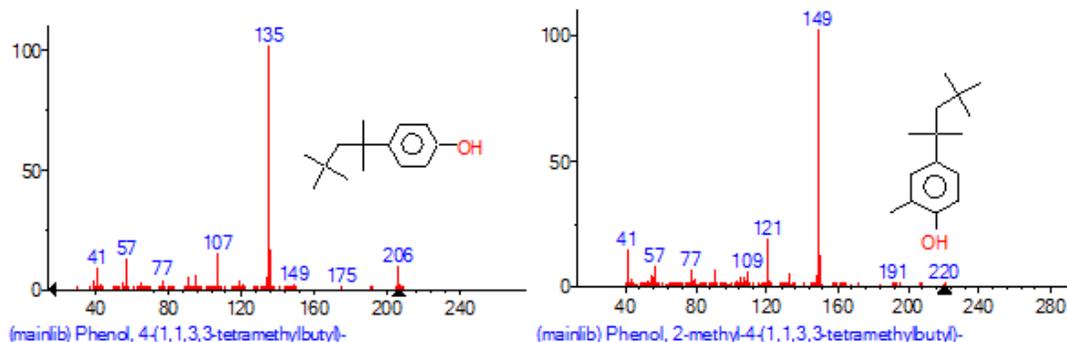


Figura 3. Cromatogramas de los fenoles: Phenol, 4-(1,1,3,3-tetramethylbutyl)-, y Phenol,2-methyl-4-(1,1,3,3-tetramethylbutyl)-.

El Phenol, 4-(1,1,3,3-tetramethylbutyl)-, registra toxicidad acuática aguda y crónica (Categoría 1), puede formarse como un producto de degradación de los tensoactivos de alquilfenol en las aguas residuales, posee baja movilidad en el suelo, y en sedimentos, Dado que su valor del Factor de Bioconcentración – BCF, es estimado en 6000, se espera que este compuesto se bioacumule en los organismos acuáticos. (TOXNET Home-HSDB, November 2012). También es reconocido disruptor endocrino, por lo anterior, puede acelerar la proliferación de células de cáncer en los organismos que entren en contacto con este compuesto.

En el mismo sentido, el Phenol,2-methyl-4-(1,1,3,3-tetramethylbutyl)-. De acuerdo a la ficha de seguridad MSDS de SIGMA-ALDRICH, (2012), presenta toxicidad acuática Crónica – (Categoría 4), Lesiones oculares graves (Categoría 1), Irritación cutáneas (Categoría 2). La base de datos (NCBI PubChem compound, 2005)⁸, no registra información toxicológica de este compuesto.

En la estación 3, se encontraron Butylatedhydroxytoluene- BHT, Salicyl Alcohol, y el Phen-1,4-diol, 2,3-dimethyl-5-trifluoromethyl. Figura 4.

En esta estación reaparece el fenol Butylatedhydroxytoluene- BHT, el cual estaba presente en la estación 1, el Salicyl Alcohol, registra irritaciones cutáneas, y ocular (Categoría 2), Toxicidad específica en determinados órganos - exposición única (Categoría 3), y el Phen-1,4-diol, 2,3-dimethyl-5-trifluoromethyl, no registra información de toxicidad y bioactividad en la base de datos Puchem compound.

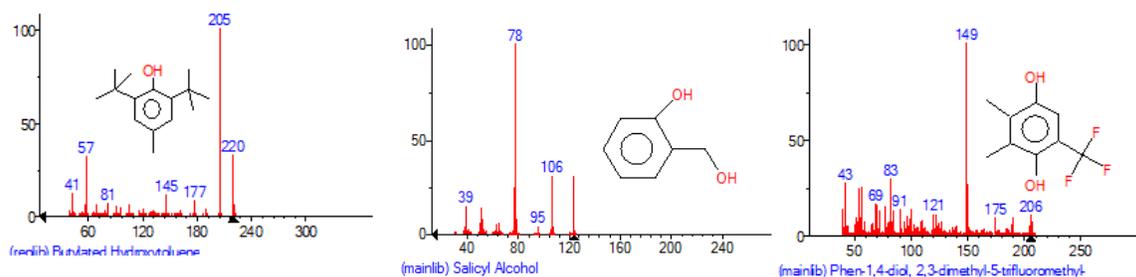


Figura 4. Cromatogramas de los fenoles: Butylatedhydroxytoluene- BHT, Salicyl Alcohol, y el Phen-1,4-diol, 2,3-dimethyl-5-trifluoromethyl.

La estación 4, no registro presencia de fenoles. Contrariamente en la estación 5 se registraron los siguientes fenoles: Salicyl Alcohol, el cual se identificó en la estación 3, y el Benzenemethanol,4-hydroxy, encontrado en la estación 1.

CONCLUSIONES

Los alquifenoles son reconocidos disruptores endocrinos y promotores de la formación de células cancerígenas. En las cinco estaciones de muestreo se encontraron siete compuestos de esta familia, algunos de ellos se repiten en más de una estación.

Algunos de estos compuestos pueden formarse como un producto de degradación de los tensoactivos de alquifenol en aguas residuales. Debido a sus propiedades como movilidad en el suelo y en sedimentos pueden bioconcentrarse en organismos acuáticos. Lo anterior, evidencia el riesgo ambiental presente en la zona de estudio.

En la estación 4, no se registraron fenoles, mientras que en la estación 3, se identificaron tres de estos compuesto, y en la estación dos se registro el más tóxico, correspondiente al Phenol, 4-(1,1,3,3-tetramethylbutyl)-, compuesto que registra toxicidad acuática aguda y crónica (Categoría 1).

BIBLIOGRAFÍA

Chihoung Chen, A.M. Pearson, J.I. Gray. (1992) Effects of synthetic antioxidants (BHA, BHT and PG) on the mutagenicity of IQ-like compounds. Food Chemistry. Volume 43, Issue 3, P 177–183
<http://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/summary/summary.cgi?cid=75206#itabs-2d>

Kouki-Inai, T., Kobuke, S., Nambu, T., Takemoto, E., Kou, H., Nishina, M.F., Shoji, Y., Shin-ichi, S., Takafumi, T., Kenji, H. & Shoji, T. (1988). Hepatocellular Tumorigenicity of Butylated Hydroxytoluene Administered Orally to B6C3F₁ Mice. Cancer Science. Volume 79, Issue 1, pages 49–58.

Larmat F.E., Soto-Duque, A. & Bravo, E. (2009). Evaluación de la actividad mutagénica del río Cauca en el área urbana de la ciudad de Cali - Colombia, por medio del test de Ames. Informe a COLCIENCIAS / Universidad del Valle / Universidad Autónoma de Occidente. Cali (Valle), 174 p.

NCBI. PubChem Compounds (2005, Marzo). Phenol,2-methyl-4-(1,1,3,3-tetramethylbutyl)- Compound Summary (CID 75206). National Center for Biotechnology Information, U.S. National Library of Medicine 8600 Rockville Pike, Bethesda MD, 20894 USA. Recuperado el 31 de Agosto de 2013 en:
SIGMA-ALDRICH (2012), Material Safety Data Sheet. Product name: 4-(1,1,3,3-Tetrametilbutil)-o-cresol. Version 5.0. 8p.

SIGMA-ALDRICH. (2012). Material Safety Data Sheet. Product name: 2,6-Di-*tert*-butyl-4-methylphenol. Version 5.0.Revision 7 p.

SIGMA-ALDRICH. (2011). Material Safety Data Sheet.Product name: 4-Hydroxybenzyl alcohol. Version 3.2. 6 p.

SIGMA-ALDRICH. (2013). Ficha de datos de seguridad. Nombre del producto: Alcohol 2-hidroxi-bencílico. Versión 5.2

TOXNET Home-HSDB, (November 2012). 4-(1,1,3,3-TETRAMETHYLBUTYL) PHENOL CASRN: 140-66-9 National Center for Biotechnology Information, U.S. National Library of Medicine 8600 Rockville Pike, Bethesda MD, 20894 USA. Recuperado el 24 de Agosto de 2013 en internet: <http://toxnet.nlm.nih.gov/cgi-bin/sis/search/r?dbs+hsdb:@term+@rn+@rel+140-66->