

IV Congreso SRALA 2018

Ciudad de México, del 29 al 31 de Octubre de 2018



EVALUACIÓN CUALITATIVA-SEMICUANTITATIVA DE CONTAMINANTES ORGÁNICOS EN AGUA DEL ÁREA PROTEGIDA DE XOCHIMILCO

JORGE MEZA-GONZÁLEZ¹; CLAUDIA ALEJANDRA PONCE DE LEÓN-HILL²

1. POSGRADO EN CIENCIAS DEL MAR Y LIMNOLOGÍA, UNAM, CORREO: megj1990@outlook.com.
2. DEPARTAMENTO DE ECOLOGÍA Y RECURSOS NATURALES, UNAM.

Miércoles, 31 de octubre de 2018

CONTENIDO



XOCHIMILCO COMO SITIO DE ESTUDIO
PROBLEMÁTICA
OBJETIVOS
METODOLOGIA
RESULTADOS
CONCLUSIONES

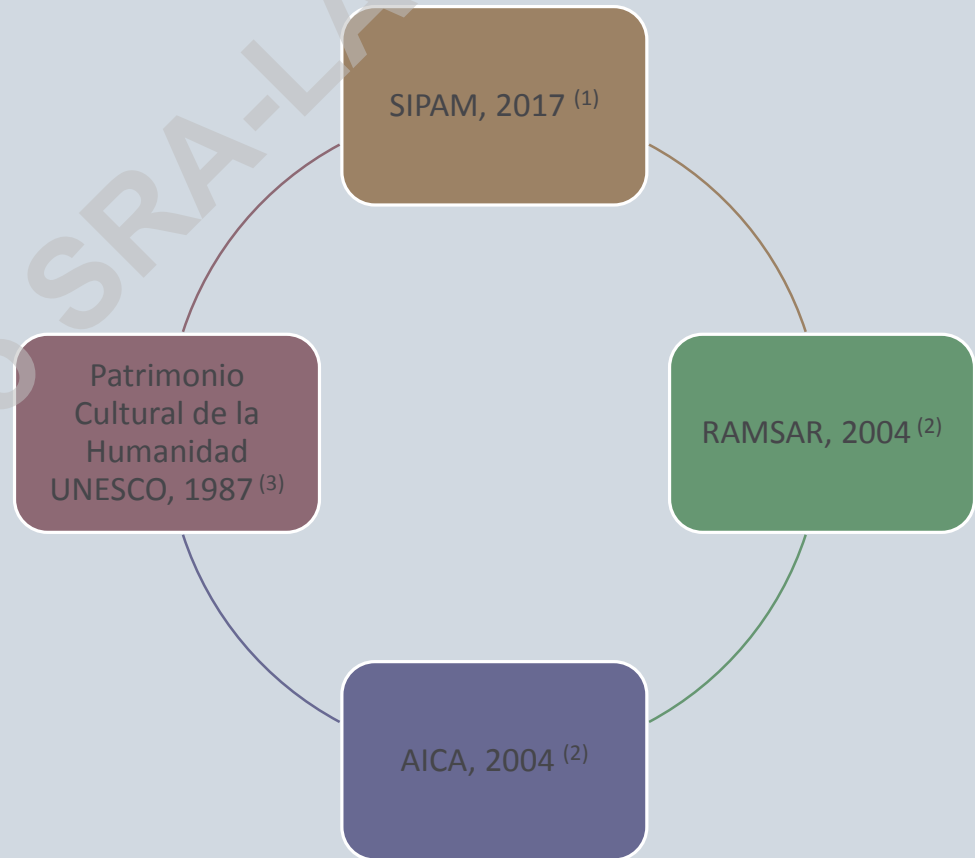
XOCHIMILCO COMO SITIO DE ESTUDIO

Gran Influencia histórica, cultural, económica y social:

- Actividades agrícolas
- Floricultura
- Turística/recreativa-Educativa.

Presenta un ecosistema particularmente importante: Humedal

- Hábitat y resguardo de diversas especies flora y fauna
- Captador de carbono y materia orgánica
- Saturación de suelos con agua
- Consecuentemente una alta productividad ⁽⁴⁾



Esquema 1. Reconocimientos y declaratorias



PROBLEMÁTICA



- Urbanización desmedida.
- Sobreexplotación de sus mantos acuíferos.
- Descarga de aguas tratadas (3500 drenajes domésticos más los tóxicos disueltos en aguas tratadas en las plantas de tratamiento del Cerro de la Estrella en Iztapalapa y San Luis Tlaxialtemalco).
- Gracias a estudios previos, se estima un aproximado de más de 26 plaguicidas de distintas familias químicas (organofosforados, organoclorados, alquilbromuros, ftalimidas, carbamatos, etc) ⁽⁵⁾, así como la presencia de algunos contaminantes emergentes como ibuprofeno, almizcle cetona, β -estradiol y triclosan. Sin embargo, a pesar de estos estudios que se han realizado sobre compuestos orgánicos como plaguicidas o contaminantes emergentes en Xochimilco nunca se ha realizado una evaluación cualitativa o screening de todos los posibles contaminantes orgánicos en el agua de los canales de Xochimilco.

OBJETIVOS

Objetivo General

Identificar en el agua de los canales, los compuestos orgánicos de mayor riesgo potencial para el ecosistema acuático en sitios ambientalmente diferentes en Xochimilco.

Objetivos Particulares

- Implementar y aplicar un método de análisis de residuos múltiples cualitativo con deconvolución y posteriormente semi cuantitativo mediante la técnica de GC-MS.
- Identificar los contaminantes principales en función de su toxicidad y sus concentraciones aproximadas
- Comparar sitios ambientalmente distintos para estudiar la dinámica de los contaminantes en los canales de San Gregorio Atlapulco, Xochimilco.

METODOLOGÍA

Muestreo

- Determinación de parámetros fisicoquímicos *in situ* (pH, temperatura, salinidad, etc)
- Toma de muestras de agua y almacenamiento de las muestras a 4°C

Análisis en CG-EM

- Identificación cualitativa mediante la deconvolución, match score ≥ 70 auxiliándonos del software *Unknown Analysis*.
- Semicuantificación mediante comparación con 13 compuestos modelo.

Tratamiento de las muestras

- Filtración al vacío
- Extracción en fase sólida HLB oasis®

Evaluación de ecotoxicidad

- (LC50 a 48h para *daphnia magna* y log k_{ow} .) mediante el uso de ECOSAR
- Obtener valores de unidades tóxicas UT por sitio

Lista de contaminantes principales

Sitio de muestreo

Se seleccionaron los puntos de muestreo bajo los siguientes criterios:

El impacto agrícola

El impacto urbano

Zona de descarga

Zona ejidal abandonada del área natural protegida



Imagen 1. Mapa del sitio de estudio

Impacto agrícola: Tecalitla, Tlilac, Potrero, La espejera

Impacto urbano: Fábrica, Coapatitla

Zona de descarga: Puente de Urrutia

Zona ejidal abandonada del área natural protegida: El Bordo, San Sebastián

RESULTADOS

De los 9 sitios muestreados, se identificaron 328 contaminantes con un match score ≥ 70 , el cuál es un parámetro que permite establecer la similitud de un espectro de masas experimental con un espectro de masas almacenado en una libreria de compuestos orgánicos.

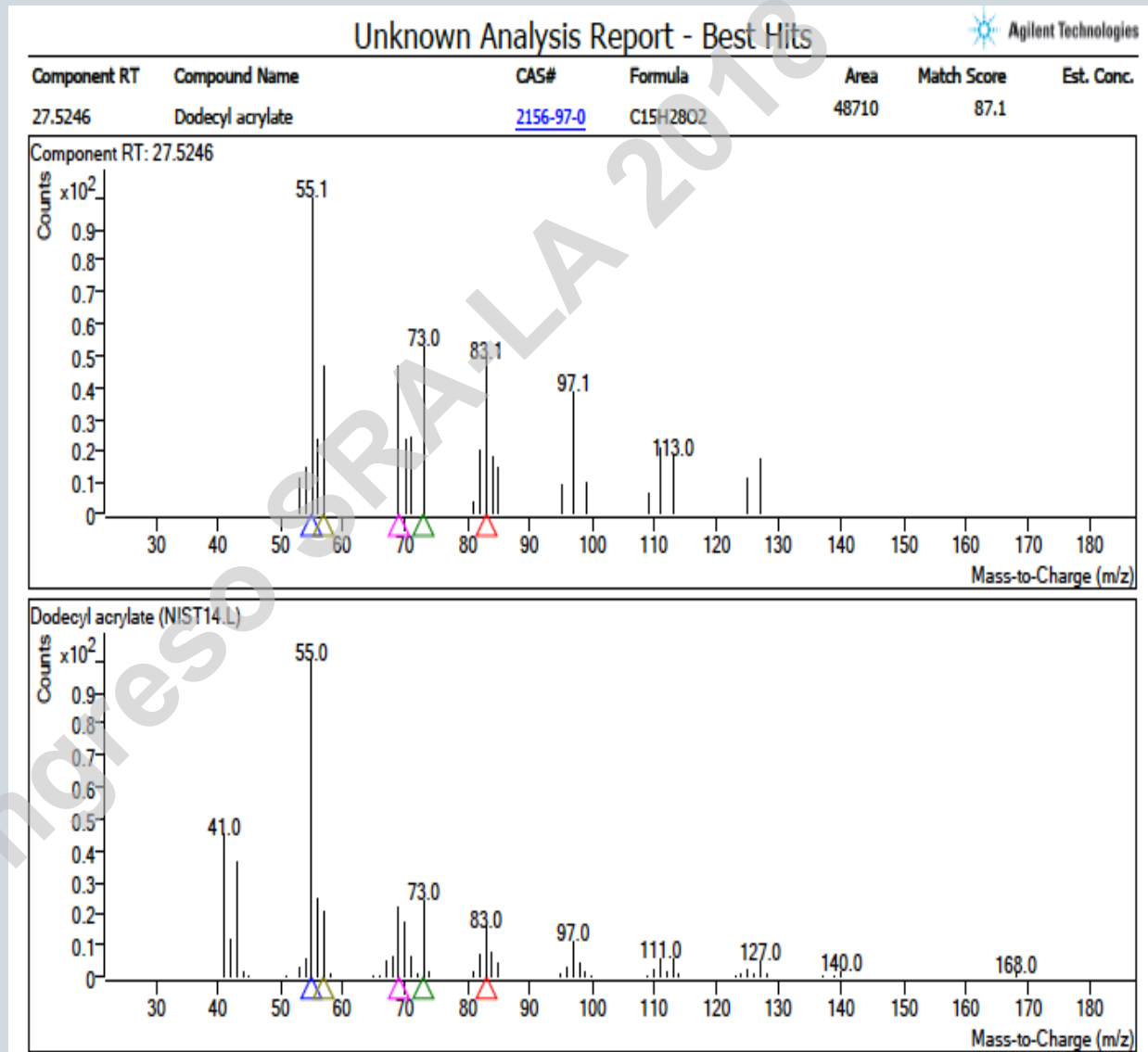


Imagen 2. comparación del espectro de masas experimental y teórico del Acrilato de dodecilo.

Sitio	Tipo de impacto	Número de contaminantes
Tecaltitla	Agrícola	32
Puente de Urrutia	Zona de descarga de aguas tratadas	30
Tlilac	agrícola	22
Potrero	agrícola	40
Fábrica	Urbano	59
La espejera	agrícola	36
Coapatitla	Urbano	46
El bordo	Zona ejidal abandonada	41
San Sebastián	Zona ejidal abandonada	22

Tabla 1. Número de contaminantes orgánicos identificados por sitio

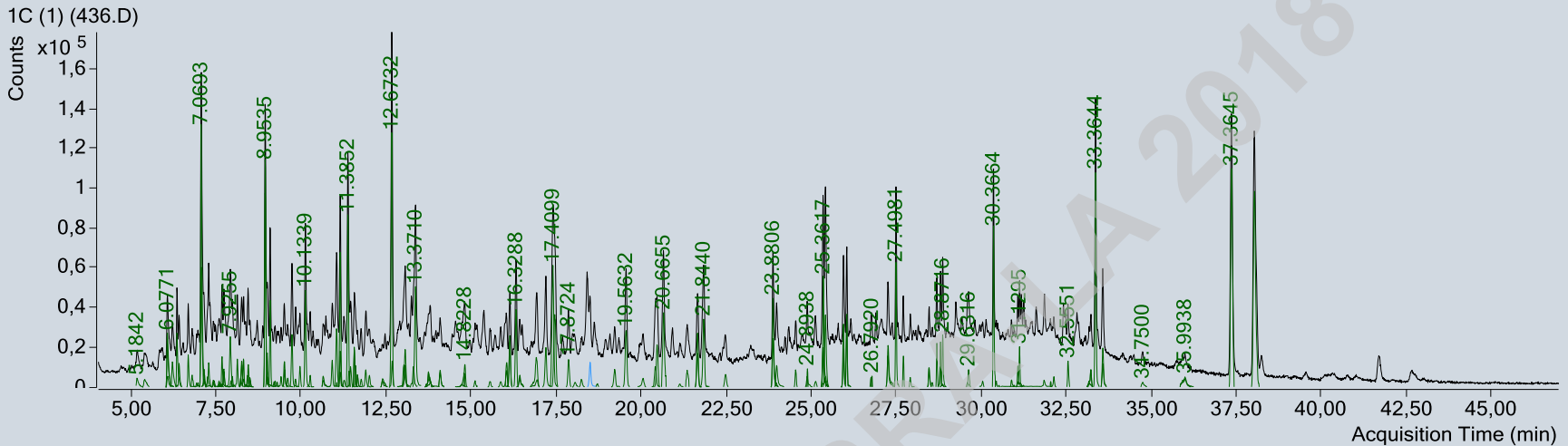
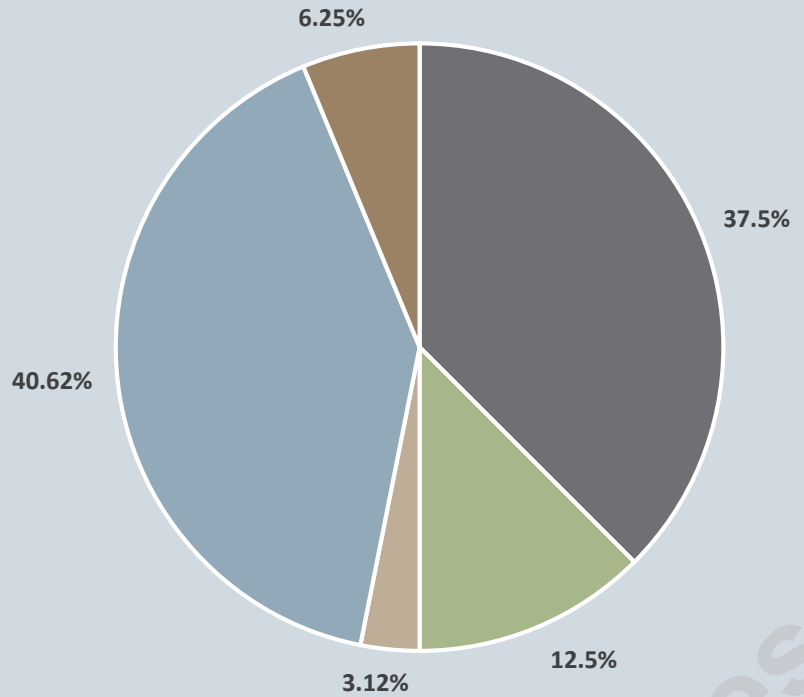


Imagen 3. Cromatograma procesado mediante la técnica de deconvolución de la muestra extraída del sitio “La Fábrica”

Plasticantes, desinfectantes, saborizantes, fármacos, fragancias, subproductos de plaguicidas organofosforados, anticongelante, intermediarios en procesos de síntesis industrial, subproductos del tabaco, entre otros.

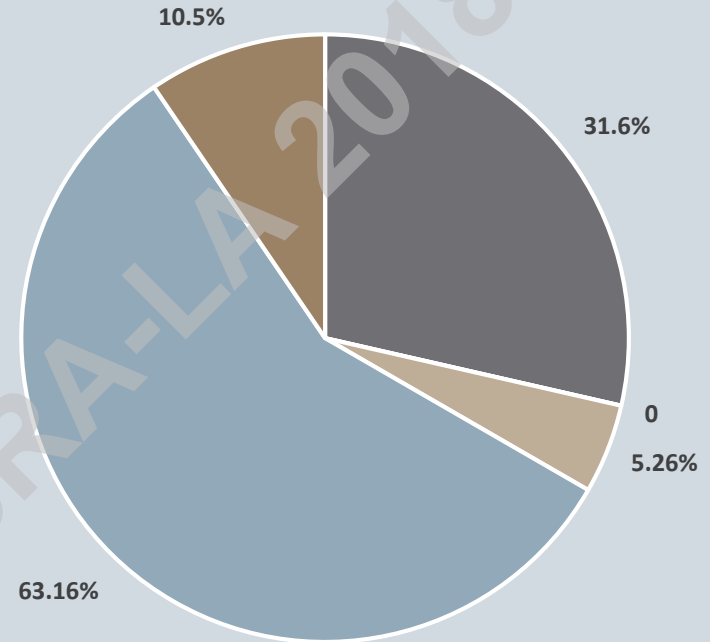
Con base en los compuestos identificados, se asociaron en cinco grupos principales en función de su uso:

- ❖ Doméstico: productos de cuidado personal, cosméticos, alimenticios, fármacos y de la salud.
- ❖ Agroquímicos: plaguicidas, herbicidas, fungicidas.
- ❖ Industrial: petroquímica, química, farmacéutica, disolventes.
- ❖ Degradación: biológica y química.
- ❖ Otros: metabolitos y desconocidos.



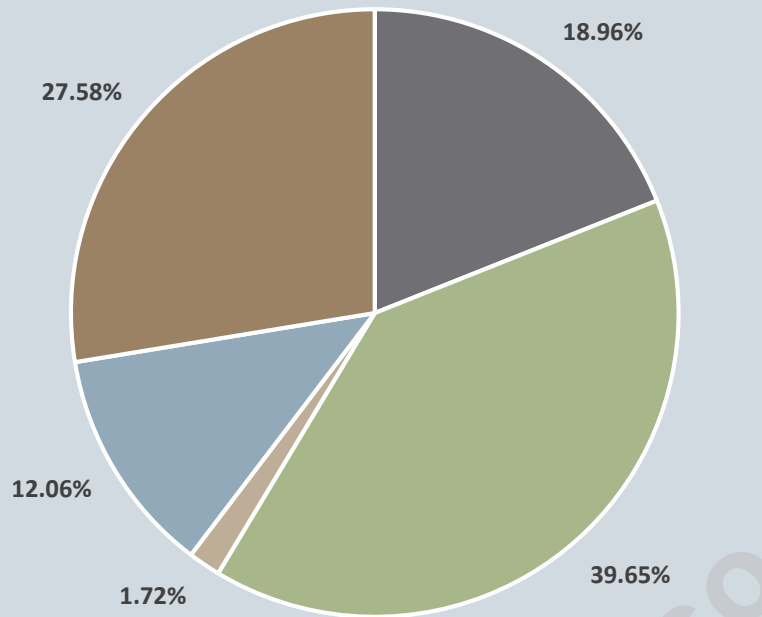
- Uso industrial
- Agroquímicos
- Otros
- Uso doméstico/urbano
- Productos de degradación

Gráfico 1. Contaminantes orgánicos de un sitio con impacto agrícola (Tecalitla)



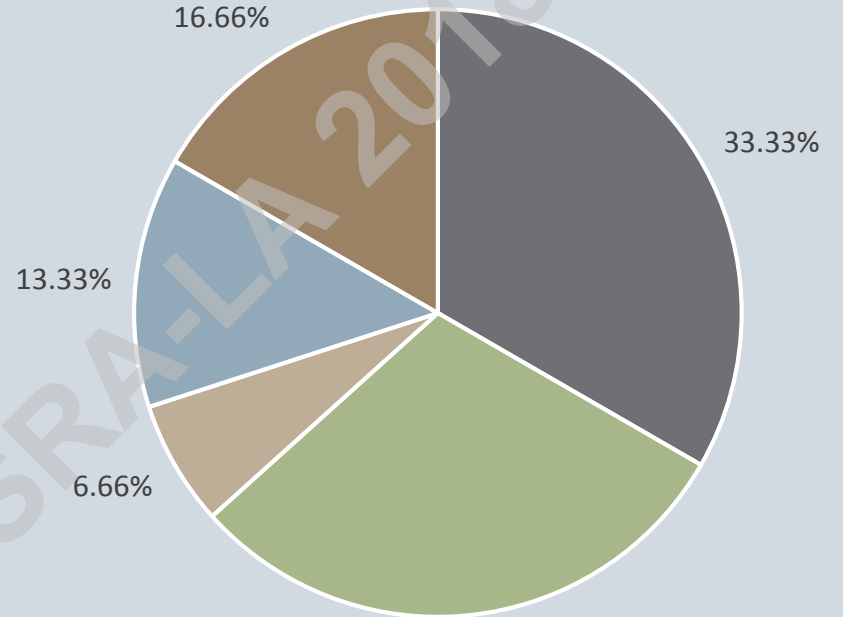
- Uso industrial
- Agroquímicos
- Productos de degradación
- Uso doméstico/urbano
- otros

Gráfico 2. Contaminantes orgánicos de un sitio perteneciente a la zona ejidal abandonada (San Sebastián)



- Uso industrial
- Agroquímicos
- Otros
- Uso doméstico/urbano
- Productos de degradación

Gráfico 3. Contaminantes orgánicos de un sitio con impacto urbano ("La Fábrica")



- Uso industrial
- Agroquímicos
- Otros
- Uso doméstico/urbano
- Productos de degradación

Gráfico 4. Contaminantes orgánicos de un sitio con zona de descarga (puente de Urrutia)

Una vez identificados los contaminantes mediante la técnica de deconvolución, se utilizó el software ECOSAR, programa basado en el modelo QSAR el cual, modelo predictivo para evaluar efectos potencialmente tóxicos en organismos acuáticos (6) La información recabada con el uso de este software fueron los parámetros ecotoxicológicos de LC_{50} para la especie *Daphnia Magna* y $\log K_{ow}$.

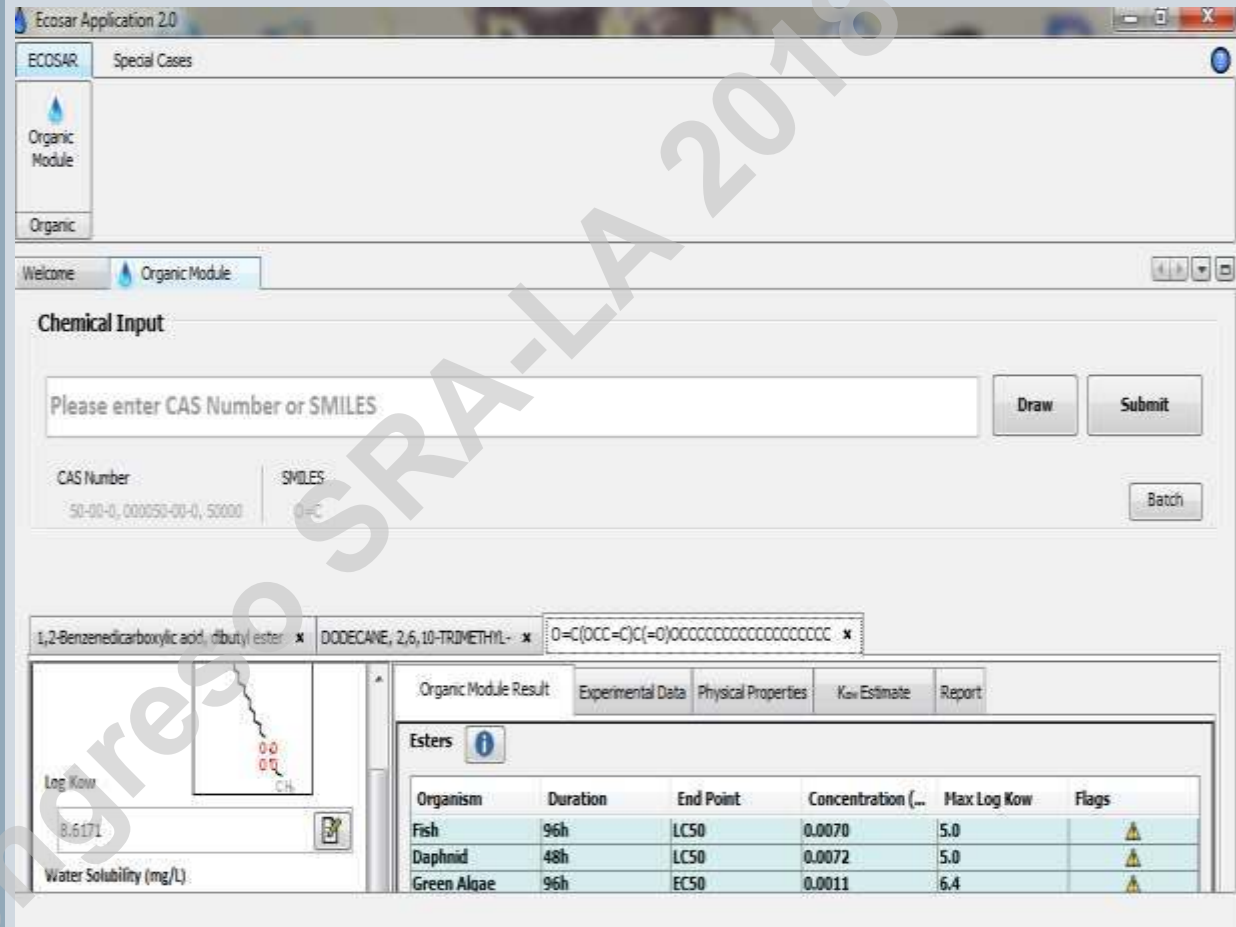


Imagen 4. interfaz del software ECOSAR

RT	Compuesto	CAS	Área	Match	LC50 (mg/L) 48h	log Kow
4.7164	2-Propanol, 1-(2-methoxy-1-methylethoxy)-	20324-32-7	121907.5	88.8	7120	-0.3459
4.9448	1,2-Ethanediol, 1,2-diphenyl-, [R-(R*,R*)]-	52340-78-0	28676	87.5	45	2.069
5.8122	But-1-ene-3-yne, 1-ethoxy-	2806-41-9	10065.5	75.7	163	1.0448
6.4091	Ethanol, 2-phenoxy-	122-99-6	116931.5	93.1	381	1.1002
6.6677	Hexanoic acid	142-62-1	31574	70.2	490	2.0512
7.1478	Formamide, N,N-dibutyl-	761-65-9	44089.5	87.3	41.7	2.0129
7.9827	Propanoic acid, 2-methyl-, butyl ester	97-87-0	19031.5	86.5	13.4	2.7551
8.3192	2,4,7,9-Tetramethyl-5-decyn-4,7-diol	126-86-3	134270	89.5	14.7	3.609
9.102	2,5-cyclohexadien-1-one, 2,6-bis(1,1-dimethylethyl)-4-hydroxy-4-methyl-	1000401-12-0	128344.5	85.8	4.75	3.6007
9.8565	Phenol, 2,6-bis(1,1-dimethylethyl)-4-methyl-, methylcarbamate	1918 11 2	202417.5	88.7	0.000032	5.2801
10.2795	Sulfurous acid, 2-ethylhexyl isoheptyl ester	1000309-19-0	60857	86.7	0.078	5.7566
10.4645	2-Propenoic acid, 2-methyl-, (tetrahydro-2-furanyl)methyl ester	2455-24-5	9192	78.4	64.9	1.797
11.1565	Benzamide, N,N-diethyl-4-methyl-	2728 05 4	79217.5	90.3	31.4	2.2579
11.387	Diethyl Phthalate	84-66-2	91228	91.6	24.2	2.6456
11.4644	2-Norbornen-5-ol, formate	1000142-75-9	13228	72.8	53.6	1.77
12.4051	Benzophenone	119-61-9	11200	80.7	8.81	3.1471
17.8684	1,2-Benzenedicarboxylic acid, bis(2-methylpropyl) ester	84-69-5	126148.5	90.2	2.17	4.463
19.2307	Sulfurous acid, 2-ethylhexyl hexyl ester	1000309-20-2	41511	81.6	0.067	5.8301
19.5634	1,3-Dimethyl-5,7-din-propyladamantane	1000215-00-5	83118	76.7	0.0014	7.7154
20.0652	1-Hexyl-2-nitrocyclohexane	118252-04-3	45143	83.3	0.215	5.1058
20.6794	n-Hexadecanoic acid	57-10-3	156282	85.8	0.066	6.9622
21.667	Oxalic acid, allyl octadecyl ester	1000309-24-5	99405.5	92.2	0.0072	8.6171
21.8415	Hexadecane	544-76-3	132217.5	89.2	0.00051	8.199
26.7871	Butyl citrate	77-94-1	8366	76.7	15.6	3.2805
27.2523	Acetamide, N-antipyrinyl-	83-15-8	27653.5	94	6.91	-0.1303
27.4988	1-Tridecyn-4-ol	74646-37-0	19800.5	73.2	1.47	4.4158
28.149	Carbamazepine	298-46-4	53445	85.9	14.1	2.2484
28.3407	1,2,2-Trimethylpropyl trifluoroacetate	116465-21-5	4549.5	81	11.8	16 3.0597
28.6861	Octadecanoic acid, 2-			75.4		

CONCLUSIONES

1. Se identificaron 328 contaminantes orgánicos distribuidos a lo largo de la red lacustre de San Gregorio Atlapulco.
2. En todos los sitios, la contribución de contaminantes de uso industrial es uno de los principales aportes (13-44%), seguido del aporte doméstico/urbano (0-41%) y el aporte de “otros” (metabolitos vegetales, y compuestos de uso desconocido) (4.5-63%).
3. El aporte de sustancias agroquímica está presente en casi todos los sitios, sin embargo se encuentra en la menor proporción en los sitios de Potrero, San Sebastián, Tlilac, Tecaltitla, “la Fábrica” y Coapatitla, el Bordo y en Puente de Urrutia en un intervalo de 1.7-8.3%.

Perspectivas

1. Establecer la validación analítica del método semi-cuantitativo
2. Para poder realizar la semi-cuantificación de la mayor cantidad de contaminantes, es necesario identificar y utilizar estándares internos que nos permitan agrupar a los contaminantes en función de su estructura química y/o propiedades fisicoquímicas.
3. Parámetros como LC_{50} , $\log K_{ow}$ y las concentraciones calculadas a partir de la semi-cuantificación nos permitirán evaluar el potencial tóxico de la mezcla de contaminantes de cada sitio mediante los valores por unidad tóxica UT por cada contaminante, y calcular así un valor de toxicidad total.

Referencias

1. FAO (2017). Food and Agriculture Organization of the United Nations. Recuperado de <http://www.fao.org/mexico/noticias/detail-events/en/c/992183/>
2. AUTORIDAD DE LA ZONA PATRIMONIO MUNDIAL NATURAL Y CULTURAL DE ÑA HUMANIDAD EN XOCHIMILCO, TLÁHUAC Y MILPA ALTA (2018). Recuperado de <https://www.azp.cdmx.gob.mx/>
3. Institute for Research and Debate on Governance (2010). Recuperado de <http://www.institut-gouvernance.org/en/experienca/fiche-experienca-27.html>
4. Aldana- Gutiérrez, G. 2016. *Influencia de la materia orgánica en la biodisponibilidad de metales en el agua de los canales de Xochimilco*. Tesis de licenciatura, UNAM, MÉXICO D. F.
5. Alcántara-Concepción, V. 2014. *Caracterización y Diagnóstico de la Contaminación por plaguicidas en el lago de Xochimilco*. Tesis de doctorado, UNAM, México D. F.
6. Reuschenbach, P., Silvani, M., Dammann, M., Warnecke, D., Knacker, T. (2008). ECOSAR model performance with a large test set of industrial chemicals, *Chemosphere*, 71, 1986-1995.

IV Congreso SRA-LA 2018

Gracias por su atención