

ARTÍCULO

## CONTAMINANTES EMERGENTES EN EL AGUA

*M. en I. José Elías Becerril Bravo*  
*Académico*  
*Instituto de Ingeniería – UNAM*  
*JBecerrilB@iingen.unam.mx*

## Contaminantes emergentes en el agua

### Resumen en español

Actualmente existe un interés creciente por los “contaminantes emergentes”, entre los que se encuentran los fármacos y los productos de uso personal, surfactantes, retardantes de fuego, aditivos industriales, esteroides y hormonas, así como los subproductos de la desinfección. Se ha demostrado que estos compuestos se encuentran diseminados en el ambiente y se han detectado en fuentes de abastecimiento de agua, aguas subterráneas e incluso en agua potable. Estos contaminantes corresponden, en la mayoría de los casos, a contaminantes no regulados, que pueden ser candidatos a regulación futura, dependiendo de investigaciones sobre sus efectos potenciales en la salud y los datos de monitoreo con respecto a su incidencia

Palabras clave: contaminantes emergentes, disruptores endocrinos, surfactantes, agua, fármacos y productos de uso personal.

### Emerging contaminants agents in the water

#### Abstract

In recent years there has been increasing concern over the so called “emerging contaminants” such as pharmaceuticals and personal care products, surfactants, flame retardants, industrial additives, steroids and hormones and disinfection by-products. These substances have been shown to be released to the environment and in the monitoring studies that have looked for them; they have been detected in fresh water, groundwater and drinking waters. These contaminants correspond in most cases to unregulated contaminants, which may be candidates for future regulation depending on research on their potential health effects and monitoring data regarding their occurrence.

Keywords: emerging contaminants, endocrine disruptors, surfactants, water, pharmaceutical and personal care products (PPCPs).

### Introducción

El avance científico y tecnológico ha propiciado el surgimiento de un universo de compuestos químicos tóxicos potenciales que repercuten en diversos aspectos. Cada uno de estos aspectos exhibe una perspectiva diferente, la conveniencia, el confort, el progreso, la indiferencia, etcétera. Una perspectiva se presenta con los escenarios previamente desconocidos e inesperados de exposición a los mismos productos químicos. La controversia en torno a los agentes contaminantes “emergentes” se presenta debido, entre otros factores, a la inexactitud en la definición (1), que se quiere decir con “emergentes” y (2) la dimensión del universo químico alrededor del cual se enfoca el tema.

Las perspectivas también incluyen características químicas (grupo funcional y estructura química; productos químicos con nuevas estructuras), tipos de uso (nuevos usos en los sectores industriales o de consumo), tipo de efectos (redescubrimientos de efectos o interacciones totalmente nuevas), mecanismos de acción, fuente u origen (nuevos tipos de fuentes o de orígenes previamente desconocidos para los productos químicos existentes); y la ruta de exposición (vías que no habían sido consideradas). Cada perspectiva puede interceptarse con las otras en varios niveles.

Estas perspectivas confieren a menudo confusión en las controversias orientadas a anticipar los riesgos futuros y/o desconocidos. Por ejemplo, las cuestiones con respecto a los compuestos de disrupción endocrina (EDCs por sus siglas en inglés), se comparan a veces con cuestiones referentes a los fármacos y productos de uso personal (PPCPs, por sus siglas en inglés). Pero el primer grupo se define según el tipo de efecto biológico o el mecanismo de acción, mientras que el último es definido por la clase y el tipo de usos químicos; y los dos se entrelazan en el sentido que algunos PPCPs son EDCs y viceversa. Algunas de las publicaciones sobre contaminantes “emergentes” se han centrado alrededor de los PPCPs como agentes contaminadores (Bester, 2007).

Una inmensidad de compuestos químicos están presentes en el agua —sin importar la “pureza del agua”. Esto último es un concepto que confunde, ya que simplemente es una reflexión sobre los tipos y las concentraciones de esos productos químicos (acotados por una normatividad que depende del propio uso del agua). El número de contaminantes químicos a niveles de trazas puede exceder a aquellos presentes en concentraciones altas y que están normados. La química analítica juega un papel preponderante ante los contaminantes, debido al aumento de los tipos de productos químicos que pueden ser detectados, y los límites de detección que son cada vez más bajos. También, gracias a la química analítica es posible ampliar y refinar nuestra perspectiva en relación con la “pureza del agua”.

## Productos químicos antropogénicos

Los productos químicos presentes en el agua abarcan un amplio espectro de productos químicos antropogénicos (aquellos sintetizados o indirectamente producidos por las actividades humanas. Por ejemplo, los subproductos de la desinfección del agua potable), así como “productos naturales” (aquellos creados por procesos fisicoquímicos o biológicos naturales. Un ejemplo es el geosmin, un alcohol bicíclico que confiere un sabor desagradable al agua y que lo producen ciertas algas).

Los contaminantes antropogénicos se han dispersado ampliamente en el ambiente y están “emergiendo” en las aguas superficiales y subterráneas, como resultado de emisiones industriales, la ineficiente disposición de residuos sólidos (por ejemplo la incineración y los tiraderos de basura), los derrames accidentales, la aplicación controlada (pesticidas en la agricultura, recarga artificial del agua subterránea, disposición en el suelo de los lodos de las plantas de tratamiento de aguas residuales) y las actividades de consumo (que incluye la excreción y la disposición natural de una amplia gama de productos químicos, tales como los PPCPs). Todas estas fuentes ~~se ha~~ han sido reconocidas, pero principalmente las últimas, como; rutas potenciales e importantes de eliminación del contaminante. Las actividades de consumo se reconocieron recientemente como una fuente potencialmente importante de contaminación, dispersa no controlada.

Hasta marzo de 2004, casi 23 millones de sustancias orgánicas e inorgánicas (excepto biosecuencias tales como proteínas y nucleótidos) habían sido indexadas en “The American Chemical Society’s Chemical Abstracts Service” en su registro CAS (CAS, 2004). Aproximadamente un tercio de estas sustancias (sobre 7 millones) estaba comercialmente disponible. En contraste, solamente alrededor de un cuarto de millón (230.000) de estos compuestos está inventariado o regulado por algunos países a nivel mundial (Daughton, 2004).

Mientras que el universo “conocido” de productos químicos orgánicos puede parecer grande, el universo de productos químicos orgánicos “potenciales” (aquellos que es posible sintetizar y aquellos que existen pero que no han sido identificados todavía) es inimaginablemente grande. Para tener una idea del número de entidades químicas orgánicas distintas, que se podría hipotéticamente sintetizar e incluir en el universo químico conocido, si se considera el cálculo propuesto por Bohacek *et al.* (1996), estaría sobre  $10^{60}$  estructuras distintas, que son posibles con un total de simplemente 30 átomos de carbono, nitrógeno, oxígeno o azufre, esto sin considerar el espectro posible si incluimos a los halógenos y el fósforo. Claramente se observa que no hay límites para los posibles tipos de productos químicos orgánicos.

El alto potencial en la proliferación continua de fármacos y productos de uso personal, medicamentos veterinarios, y de otros productos químicos antropogénicos, plantea desafíos substanciales y quizá insuperables para su regulación y control, desde el punto de vista de su evolución y del diseño de sistemas viables para su aplicación. Por otra parte, la investigación y el desarrollo de drogas y compuestos bioactivos evoluciona rápidamente y, en muchos casos, los mecanismos de acción son nuevos para los sistemas biológicos, por lo que las consecuencias en el ambiente son inciertas.

Por estos motivos la información disponible sobre los impactos potenciales de muchas de esas sustancias es limitada, aunque hay evidencias de que algunas de ellas causan efectos adversos a en la salud humana y el ambiente. En algunos casos, como los pesticidas y los productos de transformación, son potencialmente más tóxicos que el compuesto original. También; se debe considerar que la exposición prolongada a los antibióticos puede contribuir al desarrollo de resistencia por algunas especies de bacterias.

Si tomamos una muestra desconocida del ambiente (agua, suelo o aire incluso), una porción considerable de sus componentes orgánicos no podrá ser identificada, debido a limitaciones analíticas, ya que en la mayoría de los casos no está disponible el estándar para comparar el compuesto puro con el que se encuentra en la muestra. En este caso la toxicidad se puede asociar con los compuestos que es posible identificar y analizar (analitos), así como con los compuestos que permanecen en la muestra, pero que por limitaciones del análisis químico no es posible identificar.

Caracterizar completamente la composición química de una muestra ambiental es un propósito muy limitado por las exigencias de recursos materiales y tiempo. Otras restricciones en la identificación de compuestos orgánicos son el límite de detección de los instrumentos y la metodología analítica aplicada. Existe una técnica para determinar el carbono orgánico total. En este caso se realiza una cuantificación del carbono contenido en la muestra, sin especificar su procedencia química, es decir, el grupo funcional específico del compuesto orgánico. Pero, incluso, si se realiza un análisis minucioso y se aplica un balance de masa en torno al carbono, siempre se tendrá una porción de carbono orgánico sin identificar su procedencia. Esto es una fracción desconocida de compuestos orgánicos, que generalmente se omiten o no se toman en cuenta para fines prácticos, pero con la incertidumbre del posible riesgo que representan cuando interactúan con otras especies químicas, como es el caso de la desinfección con cloro. En este caso se pueden formar subproductos de la desinfección, cuyos efectos son aún evaluados.

Después de hacer esta reseña de la infinita gama de compuestos orgánicos que pueden estar presentes en las muestras ambientales, y específicamente en el agua, debido a su propiedad de solvente universal, es necesario acotar nuestra exposición a una serie de contaminantes que se denominan emergentes.

## Contaminantes emergentes

Los “contaminantes emergentes” corresponden en la mayoría de los casos a contaminantes no regulados, que pueden ser candidatos a regulación futura, dependiendo de investigaciones sobre sus efectos potenciales en la salud y los datos de monitoreo con respecto a su incidencia. Ejemplos de los compuestos que han emergido recientemente como particularmente relevantes, son los surfactantes, productos farmacéuticos, productos para el cuidado personal, aditivos de las gasolinas, retardantes de fuego, antisépticos, aditivos industriales, esteroides y hormonas y subproductos de la desinfección del agua. La característica de estos grupos de contaminantes es que no necesitan persistir en el ambiente para causar efectos negativos, puesto que sus altas tasas de transformación/remoción se pueden compensar por su introducción continua en el ambiente. Para la mayoría de estos contaminantes emergentes, la incidencia, la contribución de riesgo y los datos ecotoxicológicos, no están disponibles. Así que es difícil predecir qué efectos de salud pueden tener en seres humanos y organismos acuáticos (Barceló, 2003).

## ¿Por qué son importantes los contaminantes emergentes?

Entre los contaminantes emergentes encontramos algunos que pueden presentar alteraciones endocrinas, entre los que se incluyen pesticidas, productos químicos industriales, productos farmacéuticos y fitoquímicos. Estos productos químicos se distribuyen extensamente en el ambiente, y pueden presentar efectos miméticos o antagonicos en las funciones biológicas de las hormonas naturales. Los insecticidas clorados, tales como kepona; p'-p'-DDT; dieldrin y metoxicloro, y los compuestos usados en los plásticos y la industria de los detergentes, tales como alquilfenoles y bisfenol A, tienen actividad estrogénica. El p'-p'-DDE, un metabolito del p'-p'-DDT, el agente antihongos vinclozolin, y los insecticidas clornitrofen, fenitrotrion y el fention, tiene actividad anti-androgénica. Algunos hidroxibifenilos policlorados (hidroxi-PCBs), tales como 4,4'-dihidroxi-3,3',5,5'-tetraclorobifenil, se reportan con actividad hormonal anti-tiroidea, además de actividad estrogénica. Las interacciones de compuestos estrogénicos y anti-androgénicos, con la respectiva hormona receptora, han servido para explicar la mayoría de las acciones de disrupción endocrina. Además, estos productos químicos pueden alterar el desarrollo reproductivo en mamíferos. También, es necesario

considerar la actividad de los metabolitos de estos productos químicos. En el metabolismo de bisfenol A, el metabolito 3-hidroxil (bisfenol A catecol) se formó por los microsomas del hígado del ser humano y de la rata, y exhibió actividad estrogénica. El metabolito glucuronida demostró no tener ninguna actividad estrogénica. Sin embargo, la relación entre la estructura y la actividad de los derivados de bisfenol A, incluidos sus metabolitos, resta por entenderse completamente (Kitamura *et al.* 2005).

Los alquilfenoles etoxilados (APEs, por sus siglas en inglés) son una clase de surfactantes extensamente usados en la actualidad. Estos se usan en detergentes, pesticidas y productos industriales. Los octilfenoles etoxilados y nonilfenol etoxilados, son dos de los surfactantes más vendidos. Los alquilfenoles etoxilados se descargan directamente al ambiente o a través de los sistemas de tratamiento de aguas residuales. La degradación primaria de estos compuestos en las plantas de tratamiento de aguas residuales o en el ambiente, genera cadenas cortas más persistentes de APEs y alquilfenoles, tales como nonilfenoles, octilfenoles y alquilfenoles (Giger *et al.*, 1984).

Estudios han demostrado que los alquilfenoles etoxilados son más tóxicos que las sustancias que les dan origen y poseen la capacidad para imitar las hormonas naturales por interacción con el receptor estrogénico (Jobling y Sumpter, 1993).

Los niveles de estos metabolitos alquilfenoles etoxilados, presentes en el ambiente, pueden estar sobre el umbral necesario para inducir disrupción endócrina en la fauna acuática. Estos resultados han inquietado a la opinión pública sobre los efectos en la salud humana y al medio ambiente. Para determinar los riesgos asociados con estas sustancias, es necesario entender la distribución y el destino de los alquilfenol etoxilados y de sus metabolitos en el ambiente.

Los alquilfenoles etoxilados se manufacturan por la reacción de alquilfenoles con óxido de etileno. Una molécula de alquilfenol etoxilado consiste de dos partes: el alquilfenol y la parte etoxilada. Esta estructura hace al compuesto soluble en agua y ayuda a dispersar la mugre y la grasa de las superficies sucias en agua. También se pueden usar como detergentes, agentes adherentes, dispersantes, emulsificantes, solubilizantes y agentes espumantes. Asimismo, son importantes en aplicaciones industriales, como son: papel y celulosa, textiles, recubrimientos, pesticidas agrícolas, aceites combustibles y lubricantes, metales y plásticos. Las aplicaciones industriales comprenden el 55 % del mercado internacional. Los usos restantes incluyen productos de limpieza institucional e industrial (30%), productos de limpieza domésticos (15%) y usos misceláneos (<1%). Los alquilfenoles, además de su papel como materia prima para los alquilfenol etoxilados, se usan en la fabricación de resinas fenólicas, polímeros, estabilizantes de fuego, antioxidantes y agentes de curtiduría.

Comercialmente los más significativos son los octilfenol etoxilados y los nonilfenol etoxilados que representan el 80 % del uso de alquilfenol etoxilados. Aproximadamente se producen 500,000 toneladas anualmente en el mundo y el 60 % se descargan al ambiente acuático (Sole *et al.* 2000).

Los alquilfenol etoxilados se pueden biodegradar a través de un mecanismo por etapas, que incluye la pérdida de grupos etoxi a la forma reducida de cogeneres etoxilados (homólogos más cortos de alquilfenol etoxilados), productos carboxilados, por ejemplo alquilfenol etoxicarboxilados (APECs por sus siglas en inglés) y alquilfenoles, como nonilfenoles y octilfenoles en el ambiente (Scott y Jones 2000).

Los nonilfenoles y octilfenoles son más tóxicos que su precursor etoxilado. Además presentan un efecto que imita las hormonas estrogénicas. La ruta de exposición en humanos y la fauna para estos químicos, es principalmente a través del agua, aunque también hay una cierta exposición a través del suelo.

## Conclusiones

Actualmente existe un interés creciente por las repercusiones que tendrán los compuestos orgánicos de origen antropogénico en el ambiente. El agua es una fuente importante de estos compuestos para los seres vivos. La regulación de estos contaminantes es escasa, debido al desconocimiento de sus efectos, además de que no se tiene un inventario de "todas" las especies químicas presentes en una muestra ambiental, por limitaciones analíticas. Los contaminantes emergentes presentan altas tasas de transformación/remoción, que pueden compensar su introducción continua en el ambiente. Algunos ejemplos de estos contaminantes son los alquilfenoles etoxilados (APEs por sus siglas en inglés), que son una clase de surfactantes extensamente usados en la actualidad y que han

demostrado que pueden interferir en los mecanismos de actuación del sistema endocrino. Es necesario incrementar el conocimiento sobre el origen, la transformación y los efectos de esta nueva generación de contaminantes, para proponer los mecanismos de tratamiento del agua, con el fin de garantizar una calidad idónea y sin efectos para la salud humana y los organismos acuáticos.

## Bibliografía

Bester K. (2007) *Personal care Compounds in the Environment*. Ed. Wiley VCH, Alemania.

Bohacek, R.S., McMartin, C. and Guida, W.C., (1996), The art and practice of structure-based drug design: a molecular modeling perspective. *Medicinal Research Reviews* **16** 1, pp. 3–50.

CAS, American Chemical Society, Disponible en: <http://www.cas.org/index.html> (consultado el 26 de junio de 2009)

Damià Barceló (2003), Emerging pollutants in water analysis *TrAC Trends in Analytical Chemistry, Volume 22, Pages xiv-xvi*.

Daughton C.G., (2001), Emerging pollutants, and communicating the science of environmental chemistry and mass spectrometry: pharmaceuticals in the environment. *Journal of the American Society of Mass Spectrometry* **12**, 10, pp. 1067–1076.

Daughton Christian G. (2004), Non-regulated water contaminants: emerging research *Environmental Impact Assessment Review, Volume 24, pp 711-732*.

Giger, W., Brunner, P.H. and Schaffner, C., (1984), *4-Nonylphenol in sewage sludge: accumulation of toxic metabolites from non-ionic surfactants*. *Science* **225**, pp. 623–625.

Jobling, S.J. and Sumpter, J.P., 1993. *Detergent components in sewage effluent are weakly oestrogenic to fish: an in vitro study using rainbow trout hepatocytes*. *Aquat Toxicol* **27**, pp. 361–372.

Kitamura S., Suzuki T., Sanoh S., Kohta R., Jinno N., Sugihara K., Yoshihara S., Fujimoto N.,

Watanabe H., y Ohta S. (2005) Comparative Study of the Endocrine-Disrupting Activity of Bisphenol A and 19 Related Compounds *Toxicol. Sci.*, **84**(2): 249 - 259.

Scott, M.J. and Jones, M.N., 2000. *The biodegradation of surfactants in the environment*. *Biochim Biophys Acta* **1508**, pp. 235–251.

Sole, M., Lopez de Alda, M.J., Castillo, M., Porte, C., Ladegaard-Pedersen, K. and Barcelo, D., (2000), *Estrogenicity determination in sewage treatment plants and surface waters from the Catalanian area (NE Spain)*. *Environ Sci Technol* **34**, pp. 5076–5083.

