



**Somos calidad,
somos USC**

**Revisión sistemática sobre los contaminantes emergentes en el agua: retos para su
detección y monitoreo desde la perspectiva del análisis ambiental**

Autor

Bryan Alexander Villa Sánchez

**Trabajo de grado presentado como requisito parcial para optar al título de:
Químico**

Director

Sergio David Mosquera González, Qco. MEng

Grupo de Investigación en Electroquímica y Medio Ambiente - GIEMA

Línea de Investigación: Solución a problemas ambientales

**Facultad de Ciencias Básicas
Programa de Química
Universidad Santiago de Cali
Santiago de Cali – Colombia
2026**

**Revisión sistemática sobre los contaminantes emergentes en el agua: retos para su
detección y monitoreo desde la perspectiva del análisis ambiental**

Bryan Alexander Villa Sánchez

**Trabajo de grado presentado como requisito parcial para optar al título de:
Químico**

**Director:
Sergio David Mosquera González, Qco. MEng**

**Grupo de Investigación en Electroquímica y Medio Ambiente - GIEMA
Línea de Investigación: Solución a problemas ambientales**

**ODS: 3. Salud y bienestar, 6. Agua limpia y saneamiento y 12. Producción y consumo
responsable**

**Universidad Santiago de Cali
Facultad de Ciencias Básicas
Programa de Química
Cali, Colombia
2026**

IMPACTOS

IMPACTO	PRODUCTO	BENEFICIARIO(S)
Económico	Aporte bibliográfico y técnico que puede servir como referencia para mejorar estrategias de monitoreo, optimizar la priorización analítica y favorecer el uso eficiente de los recursos en laboratorios y entidades de control ambiental.	Laboratorios de análisis ambiental, entidades de gestión hídrica e instituciones públicas y privadas relacionadas con el monitoreo del agua.
Responsabilidad social	Generación de conciencia sobre la necesidad de vigilar contaminantes emergentes en el agua y su vínculo con la salud pública y la calidad de vida.	Comunidad académica, población usuaria del recurso hídrico, instituciones educativas y autoridades sanitarias.
Científico	Monografía académica, revisión crítica y sistematización de literatura científica actualizada, además de una integración conceptual sobre contaminantes emergentes, técnicas de detección y desafíos de monitoreo.	Estudiantes, docentes, investigadores, semilleros de investigación y comunidad científica.
Indicadores de Gestión	Insumo documental útil para establecer criterios de priorización, seguimiento y evaluación de contaminantes emergentes en programas de monitoreo ambiental.	Autoridades ambientales, empresas de acueducto y saneamiento, gestores de calidad del agua y laboratorios de control.
Tecnológico	Identificación y comparación de tecnologías analíticas modernas, como HRMS, sensores electroquímicos, biosensores, SERS y metodologías de screening sospechoso y no dirigido.	Laboratorios universitarios, centros de investigación, profesionales del análisis instrumental y entidades de innovación tecnológica.
Técnico	Matriz de análisis y síntesis de metodologías de preparación de muestra, detección, identificación y monitoreo de contaminantes emergentes en matrices acuáticas.	Químicos, ingenieros ambientales, analistas de laboratorio, tesis y profesionales del monitoreo ambiental.
Ambiental	Fortalecimiento del conocimiento sobre fuentes, ocurrencia, destino, persistencia y riesgos asociados a contaminantes emergentes en el agua, promoviendo una visión preventiva de la contaminación.	Ecosistemas acuáticos, autoridades ambientales, operadores de plantas de tratamiento, comunidades dependientes de fuentes hídricas.
Social	Apropiación social del conocimiento mediante la difusión de información científica en un lenguaje académico accesible sobre problemáticas que afectan el agua y, potencialmente, la salud humana.	Estudiantes universitarios, docentes, comunidad local y sociedad en general.
Cultural	Promoción de una cultura de cuidado del agua, pensamiento crítico y conciencia ambiental frente al uso de sustancias químicas y su impacto en los recursos hídricos.	Comunidad educativa, ciudadanía, instituciones formativas y actores territoriales.

REVISIÓN SISTÉMICA SOBRE LOS CONTAMINANTES EMERGENTES EN EL AGUA: RETOS PARA SU DETECCIÓN Y MONITOREO DESDE LA PERSPECTIVA DEL ANÁLISIS AMBIENTAL

Bryan Alexander Villa Sanchez¹, Sergio David Mosquera Gonzalez ²

bryan.villa00@usc.edu.co

^{1,2} Grupo de Investigación en Electroquímica y Medio Ambiente (GIEMA)
Programa de Química. Facultad de Ciencias Básicas. Universidad Santiago de Cali.
Campus Pampalinda Calle 5 # 62-00. Santiago de Cali. Colombia

RESUMEN

Los contaminantes emergentes en el agua constituyen uno de los problemas más complejos para la química analítica y el monitoreo ambiental actual. Bajo esta designación se agrupan compuestos como fármacos, productos de cuidado personal, disruptores endocrinos, PFAS, pesticidas, retardantes de llama, microplásticos y otros contaminantes orgánicos persistentes, móviles o tóxicos que, aunque no siempre son “nuevos”, han adquirido relevancia por su creciente detección, su amplia distribución y sus posibles efectos ecológicos y sanitarios. Su análisis representa un reto por la enorme diversidad estructural, la presencia en concentraciones traza o ultra-traza, la complejidad de las matrices acuáticas y la aparición de productos de transformación. En este contexto, la química ambiental ha evolucionado desde enfoques dirigidos tradicionales hacia estrategias más amplias basadas en cromatografía acoplada a espectrometría de masas de alta resolución, análisis sospechoso (análisis dirigido) y no dirigido, sensores electroquímicos, biosensores y bioensayos. La presente monografía examina el problema desde la perspectiva de la química ambiental, centrándose en los principales desafíos para la detección y el monitoreo, así como en las respuestas metodológicas más relevantes. Se concluye que para la realización de un monitoreo eficaz de contaminantes emergentes se exige enfoques integrados que combinen análisis químico avanzado, técnicas y tecnologías emergentes y complementarias, evaluación de mezclas, herramientas de priorización y marcos regulatorios dinámicos, con el fin de pasar de la simple identificación de compuestos a una vigilancia ambiental más preventiva, representativa y orientada al riesgo.

Palabras clave: *Análisis no dirigido, detección rápida, espectrometría de masas de alta resolución, monitoreo ambiental, química ambiental.*

EMERGING CONTAMINANTS IN WATER: CHALLENGES FOR THEIR DETECTION AND MONITORING FROM THE PERSPECTIVE OF ENVIRONMENTAL ANALYSIS

ABSTRACT

Emerging contaminants in water constitute one of the most complex challenges for analytical chemistry and contemporary environmental monitoring. This term encompasses compounds such as pharmaceuticals, personal care products, endocrine disruptors, PFAS, pesticides, flame retardants, microplastics, and other persistent, mobile, or toxic organic contaminants which, although not always “new,” have gained relevance due to their increasing detection, widespread distribution, and potential ecological and health effects. Their analysis represents a challenge because of their enormous structural diversity, their presence at trace or ultra-trace concentrations, the complexity of aquatic matrices, and the formation of transformation products. In this context, environmental chemistry has evolved from traditional targeted approaches toward broader strategies based on chromatography coupled with high-resolution mass spectrometry, suspect screening (targeted analysis) and non-targeted analysis, electrochemical sensors, biosensors, and bioassays. This monograph examines the problem from the perspective of environmental chemistry, focusing on the main challenges for detection and monitoring, as well as the most relevant methodological responses. It concludes that effective monitoring of emerging contaminants requires integrated approaches that combine advanced chemical analysis, emerging and complementary techniques and

technologies, mixture assessment, prioritization tools, and dynamic regulatory frameworks, in order to move from the simple identification of compounds toward more preventive, representative, and risk-oriented environmental surveillance.

Keywords: *Environmental monitoring, environmental chemistry, high-resolution mass spectrometry, non-targeted analysis, rapid detection.*

HIGHLIGHTS

- Los contaminantes emergentes desafían el monitoreo convencional por su diversidad química, movilidad, persistencia y presencia en concentraciones traza.
- La preparación de muestra sigue siendo una etapa crítica para lograr sensibilidad, selectividad y cobertura analítica adecuadas.
- La HRMS, el cribado de sospechosos y el análisis no dirigido han ampliado de forma notable la identificación de compuestos en los cuerpos de aguas naturales y residuales.
- Los bioensayos, biosensores y sensores electroquímicos complementan el análisis instrumental al aportar rapidez y evaluación de efectos biológicos.
- Los monitoreos futuros deben integrar exposición química, toxicidad de mezclas y priorización regulatoria para una gestión más detallada y aterrizada del riesgo.

1. INTRODUCCIÓN

En los últimos años, la preocupación por los contaminantes emergentes (CEs) en el agua viene creciendo debido a los posibles impactos en los ecosistemas, interferencias hormonales en organismos vivos, y riesgos aún no completamente comprendidos para la salud humana que estos podrían causar, a pesar de que muchos de ellos se encuentran en concentraciones muy bajas (Geissen et al., 2015; Sousa et al., 2018; Gavrilescu et al., 2015). Esta problemática ha requerido que se desarrollen técnicas analíticas más sensibles y precisas. En la actualidad, los laboratorios ambientales están más enfocados en el estudio y análisis de parámetros regulados como metales pesados, componentes inorgánicos no metálicos, propiedades físicas, nutrientes, materia orgánica y contaminantes microbiológicos. Aun así, muchos de los contaminantes emergentes que han surgido durante las últimas décadas como productos farmacéuticos, productos de cuidado personal, hormonas, pesticidas, disruptores endocrinos, microplásticos, compuestos perfluorados (PFAS) y otros productos sintéticos no se encuentran regulados ni se les realiza seguimiento frecuentemente (Rasheed et al., 2019; Richardson & Kimura, 2019). A los desafíos para su regulación, monitoreo rutinario y detección desde la perspectiva del análisis ambiental se suma la falta de métodos analíticos estandarizados, la presencia de mezclas complejas, la alta polaridad y movilidad de algunos compuestos, y la ausencia de regulaciones armonizadas a nivel global. También, el precoz uso de nuevos compuestos y la escasa información sobre sus vías de entrada al ambiente, toxicidad y métodos de detección química dificultan más su gestión. Recientemente, la literatura resalta la urgencia de enfoques integrados que armonicen técnicas analíticas avanzadas, bioensayos, y modelos de riesgo ambiental para mejorar la identificación, priorización y control de estos contaminantes.

2. METODOLOGÍA

La presente monografía se realizó mediante la revisión y el análisis de literatura científica publicada en los últimos 10 años (2014–2024), a través de un enfoque cualitativo y descriptivo, con la finalidad de determinar el conocimiento existente sobre los contaminantes emergentes en el agua, sus potenciales efectos en la salud y en el ambiente y los retos asociados a su detección, monitoreo y regulación.

Se realizó una búsqueda exhaustiva en las bases de datos académicas reconocidas como Scopus, ScienceDirect, SpringerLink, PubMed, Web of Science, Scielo y otras. Se identificaron 46 artículos relevantes y de calidad que cumplieron con los criterios de inclusión para esta monografía.

2.1. Criterios de inclusión:

Se exploró artículos científicos, revisiones sistemáticas, reportes técnicos y normativos sobre contaminantes emergentes en el agua, consultando en las bases de datos anteriormente mencionadas sobre los contaminantes emergentes, sus desafíos de detección y monitoreo en el análisis ambiental. Se escogieron los estudios que abordaron al menos uno de los siguientes aspectos:

- Tipos de contaminantes emergentes (como fármacos, productos de cuidado personal, hormonas, pesticidas, disruptores endocrinos, microplásticos, compuestos perfluorados (PFAS)).
- Métodos de detección y cuantificación en agua.
- Efectos químicos y toxicológicos en la salud y los cuerpos de agua.
- Limitaciones y retos para su monitoreo y regulación.

2.2. Estrategia de búsqueda:

Se emplearon palabras clave en inglés y español, tales como, “Emerging contaminants and water”, “pharmaceuticals in water”, “Detección de contaminantes emergentes”, “pesticides and aquatic environment”, etc. Y se filtró para encontrar los estudios más relevantes y de calidad de los últimos 10 años. Se implementaron términos alternativos y/o sinónimos técnicos.

Se buscó información que abarcó conceptos fundamentales como, la definición y clasificación de contaminantes emergentes en el agua, contexto histórico y su evolución. También, se indagó sobre tecnologías de detección de CE y los métodos analíticos para la detección de CE en el agua, incluidas las técnicas tradicionales, avanzadas y basadas en biosensores para la detección de contaminantes.

Se examinó literatura sobre las limitaciones, los desafíos y las críticas de los enfoques actuales de detección y monitoreo. Asimismo, información de riesgo toxicológico y las implicaciones para la salud pública y los ecosistemas acuáticos debido a los contaminantes emergentes en los sistemas hídricos.

2.3 Procedimiento:

- a) Búsqueda en las bases de datos mencionadas.
- b) Selección preliminar de artículos mediante lectura de títulos y resúmenes.
- c) Aplicación de criterios de inclusión para depuración de la muestra documental.
- d) Lectura crítica y análisis de contenido, clasificando la información en categorías temáticas:
 - Tipos de contaminantes emergentes.
 - Monitoreo y Regulaciones.
 - Técnicas de detección y tecnología.
 - Impacto químico y toxicológico.
 - Desafíos y perspectivas.
- e) Redacción de resultados y discusión a partir de la composición y diferencia de la información recopilada.
- f) Organización de la información en fichas bibliográficas siguiendo normas APA.

3. DESARROLLO Y DISCUSIÓN

3.1. Definición, clasificación y fuentes de contaminantes emergentes

Los contaminantes emergentes (CEs) son sustancias químicas que conforman una categoría amplia y heterogénea, son provenientes de compuestos sintéticos y/o naturales no regulados y que no cuentan con monitoreos analíticos rutinarios, pese a que su presencia en el ambiente es frecuente y sus efectos pueden ser significativos (Khan et al., 2021; Li et al., 2024). Dentro de esta categoría se encuentran compuestos de los productos farmacéuticos, productos de cuidado personal, drogas ilícitas, hormonas, metabolitos, disruptores

endocrinos, pesticidas, microplásticos, nanopartículas, compuestos perfluorados (PFAS), compuestos persistentes, bioacumulativos y tóxicos (PBTs), compuestos orgánicos persistentes y móviles (PMOCs), entre otros (Rasheed et al., 2019; Richardson & Kimura, 2019). Los CE tienen la capacidad de ingresar al medioambiente desde múltiples vías y causar efectos adversos en los ecosistemas, y potencialmente una alteración endocrina en los organismos acuáticos como también problemas de salud en los humanos (Geissen et al., 2015; Sousa et al., 2018; Gavrilescu et al., 2015).

Los contaminantes emergentes pueden ingresar o ser liberados al agua desde fuentes puntuales o difusas (Geissen et al., 2015). Donde las fuentes puntuales son descargas identificables, confinadas y localizadas como lo son las plantas de tratamiento de aguas residuales e industriales, también, descargas directas de aguas residuales no tratadas en ríos, lagos o mares. Las fuentes difusas provienen de áreas dispersas, como escorrentías agrícolas, ganaderas o urbanas, erosión o lixiviación desde áreas rurales lo que complica su detección y control. Estas fuentes contribuyen a la presencia de CE en cuerpos de agua afectando la calidad del agua y los ecosistemas acuáticos (Zhong et al., 2021; Castiglioni et al., 2018; McCance et al., 2018). En áreas urbanizadas e industrializadas, los balances de masa muestran que el ciclo del agua se convierte en una red compleja de transferencia, transformación y recirculación de contaminantes, donde las plantas de tratamiento reducen parcialmente las cargas, pero rara vez actúan como barrera absoluta (Castiglioni et al., 2018; Gogoi et al., 2018). Por ello, la presencia de estas sustancias en aguas superficiales y subterráneas se ha convertido también en una herramienta para rastrear impactos antrópicos y aportes de aguas residuales (McCance et al., 2018). La falta de monitoreo rutinario y la diversidad química dificultan su identificación, priorización y aplicación de métodos analíticos existentes, representando un desafío para el monitoreo ambiental y la evaluación de riesgos. (Zhong et al., 2021; Gavrilescu et al., 2015; Puri et al., 2023).

Un aspecto especialmente preocupante es la existencia de compuestos persistentes y móviles (PMOCs), capaces de atravesar suelos, llegar a acuíferos y escapar a los tratamientos convencionales. Las investigaciones señalan que estos compuestos “se escapan” de los sistemas tradicionales de control (Reemtsma et al., 2016), mientras que estudios posteriores confirmaron su ocurrencia en distintas aguas europeas y su creciente relevancia regulatoria (Schulze et al., 2019; Rüdél et al., 2020). Los PFAS representan un caso paradigmático por su elevada persistencia y potencial de exposición a través del agua de consumo (Wee & Aris, 2023; Rehman et al., 2023). A esto se suma la creciente preocupación por los microplásticos, cuya identificación y cuantificación requieren metodologías específicas y todavía en desarrollo (Primpke et al., 2020).

En consecuencia, el problema ya no se reduce solo a saber si un compuesto está presente o ausente, sino que también es necesario comprender su persistencia, movilidad, frecuencia, transformación y posible contribución a la toxicidad total de una mezcla ambiental. Esta perspectiva obliga a superar la visión fragmentada del monitoreo tradicional.

Para ofrecer una visión de conjunto sobre la complejidad de los contaminantes emergentes en el medio hídrico, la Tabla 1 resume sus principales categorías, fuentes de origen, efectos potenciales, técnicas de detección y los retos analíticos que conllevan.

3.2. Retos analíticos y tecnológicos en la detección

Desde el punto de vista de la química analítica, se halla que la primera gran dificultad para la detección de contaminantes emergentes en el agua es la extrema diversidad de propiedades fisicoquímicas de los mismos. En una misma muestra de agua pueden coexistir compuestos muy polares, apolares, iónicos, volátiles, semivolátiles, móviles, termolábiles o macromoleculares, lo cual impide que una sola metodología brinde cobertura universal (García-Córcoles et al., 2018; Richardson & Kimura, 2019; Li et al., 2024). También, a esto se suma que enfrenta retos para su detección debido la baja concentración ambiental, donde su presencia es niveles de traza o ultra-traza, pudiéndose encontrar en concentraciones de $\mu\text{g/L}$, ng/L o incluso inferiores, lo que exige alta sensibilidad instrumental y cuidadoso control de blancos, interferencias y contaminación cruzada.

Categoría de contaminante emergente	Fuentes principales	Ejemplos	Impactos potenciales en el agua y los ecosistemas	Técnicas de detección y monitoreo	Principales retos analíticos
Fármacos y productos de cuidado personal	Aguas residuales domésticas, hospitales, industria farmacéutica, descargas urbanas	Antibióticos, analgésicos, antiinflamatorios, cafeína, filtros UV, fragancias	Toxicidad crónica, alteraciones fisiológicas en organismos acuáticos, generación de resistencia antimicrobiana, contaminación difusa persistente	SPE-UHPLC-MS/MS, LC-HRMS, screening sospechoso y no dirigido	Presencia en concentraciones traza, interferencias de matriz, gran diversidad química y aparición de metabolitos
Disruptores endocrinos	Productos de higiene, plásticos, detergentes, descargas industriales y domésticas	Estradiol, bisfenol A, nonilfenol, paracetamol, hormonas sintéticas	Alteraciones hormonales, efectos reproductivos y de desarrollo	LC-MS/MS, sensores electroquímicos, bioensayos de efecto estrogénico	Alta bioactividad a bajas concentraciones, necesidad de relacionar concentración química con efecto biológico
PFAS y compuestos persistentes, móviles y tóxicos	Espumas contra incendios, textiles, empaques, recubrimientos industriales, vertimientos	PFOA, PFOS, PFHxA y otros PFAS	Persistencia extrema, movilidad en agua subterránea, exposición humana por agua potable, dificultad de remoción	LC-MS/MS, HRMS, métodos específicos para PFAS, monitoreo de agua de consumo	Diversidad de precursores, compuestos ultracortos, falta de estándares para todos los analitos
Pesticidas y compuestos industriales emergentes	Agricultura, industria química, escurritía, infiltración y vertimientos	Pesticidas modernos, retardantes de llama, plastificantes, surfactantes	Toxicidad para biota acuática, bioacumulación, riesgos ecológicos y contaminación de cuerpos superficiales	GC-MS, LC-MS/MS, HRMS, monitoreo multclasificación	Amplia variedad estructural, transformación ambiental, limitaciones de los análisis dirigidos
Microplásticos y partículas asociadas	Degradación de plásticos, aguas urbanas, textiles sintéticos, residuos sólidos	Fragmentos, fibras, partículas secundarias	Transporte de contaminantes, afectación física a organismos, incorporación en cadenas tróficas	Imagen hiperespectral IR, microscopía, espectroscopía vibracional	Dificultad de estandarización, heterogeneidad de tamaños, identificación de partículas complejas
Productos de transformación y mezclas complejas	Degradación química, fotólisis, biotransformación y tratamientos incompletos	Metabolitos, subproductos de oxidación, mezclas desconocidas	Riesgo no detectado por monitoreo convencional, efectos combinados, toxicidad aditiva o sinérgica	HRMS, non-target analysis, suspect screening, bioensayos en batería	Falta de identificación inequívoca, procesamiento masivo de datos, ausencia de patrones analíticos
Patógenos y contaminantes biológicos emergentes	Aguas residuales, escurritía, fuentes urbanas y fallas sanitarias	Bacterias, biomarcadores y contaminantes biológicos trazadores	Riesgo sanitario directo, deterioro de la calidad microbiológica del agua	Biosensores, estrategias point-of-care, métodos rápidos moleculares	Validación en matrices reales, selectividad, escalabilidad para monitoreo rutinario

Tabla 1. Visión global de los contaminantes emergentes en el agua a través de la química y el análisis ambiental.

A continuación, se mencionan los retos más comunes a los que se enfrenta el análisis ambiental para la detección de los CE:

3.2.1. Alta polaridad: Algunos compuestos como los contaminantes orgánicos persistentes y móviles (PMOCs) presentan una naturaleza altamente polar con una débil tendencia a adsorberse en materia orgánica o superficies, lo que complica su extracción en muestras de agua (Schulze et al., 2019). Los métodos convencionales de fase reversa no siempre son adecuados para su retención, lo que ha impulsado el desarrollo de cromatografías de modo mixto y otras configuraciones capaces de mejorar la separación de compuestos problemáticos, como los PMOCs (Montes et al., 2017; Montes et al., 2019).

3.2.2. Limitación en la retención y separación cromatográfica: Los análisis metodológicos que se basan en cromatografía líquida en fase reversa (RPLC) poseen dificultades para detectar compuestos muy polares, debido a que suelen presentar baja retención en columnas tradicionales como C18 (Montes et al., 2017). Esto conlleva a que el aislamiento para su respectiva detección y análisis sea aún más difícil y a que muchos compuestos como los contaminantes orgánicos persistentes y móviles (PMOCs) que poseen una alta polaridad no sean identificados como contaminantes del agua⁰. Los PMOCs al ser altamente móviles, puede repercutir en una elución temprana y picos mal formados, obstaculizando la identificación y cuantificación precisa (Schulze et al., 2019).

En general, los métodos analíticos cromatográficos como la cromatografía de gases (GC) y líquida en fase reversa (RPLC) no son eficaces para la detección de sustancias o compuestos muy polares, ionizables o iónicas, lo que genera una brecha analítica (Rüdel et al., 2020). Por esa razón, se han ido desarrollando alternativas como la cromatografía líquida de interacción hidrofílica (HILIC), la cromatografía de fluidos supercríticos (SFC) y la cromatografía líquida de modo mixto (MMLC), que ofrecen mejores resultados para estos compuestos (Montes et al., 2019).

3.2.3. Métodos de muestreo: La obtención de muestras que sean representativas es fundamental en el análisis y caracterización de CEs. Actualmente, los métodos de muestreo, como el muestreo puntual, tienen ciertas limitaciones al capturar variaciones temporales y espaciales en las concentraciones de CEs. Se recomienda el uso de muestreo compuesto proporcional al flujo o volumen durante períodos prolongados (al menos una semana) para reflejar variaciones diarias y estacionales. También, se debe de añadir que es crucial garantizar la estabilidad de los contaminantes durante el muestreo mediante técnicas de preservación adecuadas, como la acidificación o la adición de conservantes (Petrie et al., 2015).

3.2.4. Desafíos en la recuperación y efectos de matriz: Los efectos de matriz pueden causar supresión o mejora de la señal en la espectrometría de masas o supresión de señales durante la ionización en Cromatografía Líquida-Espectrometría de Masas (LC-MS), dificultando la cuantificación precisa, pues, puede afectar la recuperación y la sensibilidad de los métodos analíticos. Esto hace necesario el uso de métodos de adición estándar para construir curvas de calibración específicas para cada muestra (Montes et al., 2019). Las aguas residuales, por ejemplo, contienen una enorme cantidad de materia orgánica, sales y compuestos coeluyentes que pueden afectar la recuperación de analitos y generar supresión o realce de señal en espectrometría de masas (Petrie et al., 2016; Gago-Ferrero et al., 2019).

3.2.5. Necesidad de métodos analíticos avanzados: Técnicas como la cromatografía líquida de interacción hidrofílica (HILIC), cromatografía líquida de modo mixto (MMLC) y cromatografía de fluidos supercríticos (SFC) han ido evolucionando para ampliar la detección de contaminantes emergentes polares (Rüdel et al., 2020). Sin embargo, aunque métodos analíticos más sensibles para la detección de contaminantes emergentes están siendo desarrollados, la falta de métodos cuantitativos más avanzados y específicos limita la elaboración de estudios más detallados sobre su destino y eliminación en los procesos de tratamiento de aguas (Schulze et al., 2019). Sumado a la carencia de técnicas analíticas capaces de detectar y cuantificar de manera confiable los CEs, especialmente los compuestos polares y tóxicos, surge la necesidad de la actualización de bases de datos que prioricen compuestos con propiedades fisicoquímicas que los hagan móviles y persistentes (Reemtsma et al., 2016). La caracterización de contaminantes emergentes requiere técnicas avanzadas como la espectrometría de masas de alta resolución (HRMS), que permite registrar espectros precisos y realizar análisis post-dirigidos. No obstante, la insuficiencia de datos experimentales, la interpretación de espectros y la comparación con bases de datos comerciales o recursos en línea puede ser un desafío, ya que debido a la escasa información que se puede encontrar dificulta la evaluación adecuada de los contaminantes emergentes. Algunos contaminantes emergentes no tienen estándares disponibles comercialmente, lo que dificulta la elaboración y estandarización de métodos analíticos cuantitativos para la identificación inequívoca y la estimación precisa de sus concentraciones (Montes et al., 2017).

3.2.6. Limitaciones en la preparación de muestras: La química de los contaminantes emergentes desconocidos puede dificultar su recuperación durante la preparación de las muestras o su ionización durante el análisis (Petrie et al., 2015). Debido a la alta polaridad de algunos CEs, estos tienen una alta afinidad por el medio acuoso, lo que dificulta su extracción. Métodos como la evaporación o la liofilización

son lentos y generan extractos complejos con efectos de matriz significativos. En el caso de los PMOCs o PFAs, la extracción en fase sólida (SPE) es popular, pero requiere sorbentes específicos como OASIS WAX y WCX para mejorar la retención de analitos polares y cargados (Montes et al., 2019). Los métodos de extracción en fase sólida (SPE) pueden ser discriminatorios para los analitos polares con diferentes propiedades ácido/base, lo que dificulta la detección de una amplia gama de contaminantes (Montes et al., 2017).

La preparación de muestra es una etapa decisiva, el problema es que no existe un protocolo o metodología única que se pueda aplicar a todos los CEs, por lo que la elección de la estrategia depende del tipo de compuesto y matriz (Dimpe & Nomngongo., (2016). La extracción en fase sólida ha sido ampliamente utilizada por su capacidad de preconcentración y limpieza, pero presenta limitaciones cuando se busca una amplia cobertura de compuestos químicos. En respuesta, han surgido metodologías simplificadas y más sostenibles, orientadas a reducir consumo de disolventes, tiempo de análisis y pérdida de analitos, aunque su validación y robustez todavía deben consolidarse para aplicaciones rutinarias (Pena-Pereira et al., 2020; Hajeb et al., 2022).

3.2.7. Limitaciones en la sensibilidad: Los límites de detección y cuantificación (LODs y LOQs) deben ser suficientemente bajos para detectar concentraciones de PMOCs en niveles relevantes para el medio ambiente y la salud humana. Estos desafíos resaltan la necesidad de desarrollar enfoques analíticos innovadores, como la combinación de extracción en fase sólida de modo mixto (MM-SPE) y cromatografía líquida de modo mixto (MMLC), para mejorar la capacidad de detección y cuantificación de estos contaminantes emergentes (Montes et al., 2019).

3.3. Cromatografía y espectrometría de masas: del análisis dirigido al análisis no dirigido

Las técnicas convencionales como la cromatografía líquida o gas y espectrometría de masas han ido evolucionando hacia métodos de alta resolución, análisis no dirigidos y cribado de sospechosos, permitiendo identificar compuestos previamente no detectados (Rüdel et al., 2020). Sin embargo, persisten numerosas limitaciones en la estandarización, la sensibilidad y la disponibilidad de bases de datos de referencia, como se mencionó con anterioridad, generando un estancamiento para el estudio y seguimiento de los miles de contaminantes emergentes que nos rodean día a día. Así, uno de los principales aprendizajes de la química ambiental reciente es que la detección de CEs depende tanto del instrumento como del diseño inteligente de la preparación de muestra y de la separación cromatográfica.

La cromatografía acoplada a espectrometría de masas sigue siendo la técnica mayormente usada para el análisis de CEs. Los métodos analíticos dirigidos, especialmente LC-MS/MS y UHPLC-MS/MS, han permitido la cuantificación confiable de múltiples residuos en aguas y matrices sólidas, con buena sensibilidad y selectividad (García-Córcoles et al., 2018; Petrie et al., 2016). Sin embargo, su limitación más importante radica en que solo detectan los compuestos previamente incluidos en el método y para los cuales se dispone, idealmente, de estándares analíticos. Debido a esta limitación, la espectrometría de masas de alta resolución (HRMS) ha transformado el campo del monitoreo ambiental. Algunos estudios destacan que esta tecnología complementa el monitoreo tradicional al permitir rastrear tendencias de contaminación y ampliar considerablemente el universo de compuestos observables (Brack et al., 2019). De manera similar, la detección de compuestos sospechosos o “suspect screening” permite buscar sustancias “sospechosas” a partir de listas o bases de datos, mientras que el análisis no dirigido o “non-target análisis” intenta identificar señales desconocidas sin una lista predefinida (Gosetti et al., 2016; Paszkiewicz et al., 2022).

La relevancia de estos planteamientos se ve respaldada por evidencias como las halladas en estudios como el de Gago-Ferrero et al. (2019), quienes aplicaron un screening de amplio alcance para más de 2000 contaminantes emergentes en muestras de aguas residuales mediante Cromatografía líquida de ultra alto rendimiento con espectrometría de masas de tiempo de vuelo con cuadrupolo y alta resolución (UPLC-QToF-HRMS/MS). Del mismo modo, Bade et al. (2015) mostraron que el uso de redes neuronales artificiales para predecir tiempos de retención puede robustecer el análisis de compuestos sospechosos, mejorando la confiabilidad en la asignación de compuestos. Estos avances muestran una transición desde una química analítica de alcance limitado hacia otra basada en información masiva, algoritmos y niveles estructurados de fiabilidad en la identificación. No obstante, el potencial de la HRMS también trae consigo nuevos desafíos como el manejo de grandes volúmenes

de datos, la necesidad de bibliotecas espectrales robustas, criterios armonizados de identificación, disponibilidad limitada de estándares de confirmación y riesgo de falsos positivos o falsos negativos (Brack et al., 2019; Paszkiewicz et al., 2022). En otras palabras, al ampliar el campo de visión de la química analítica no se elimina la incertidumbre, sino que simplemente la desplaza hacia nuevas etapas de procesamiento e interpretación.

En el caso de los PFAS, estos retos son todavía mayores. Su diversidad estructural, la existencia de precursores y la dificultad para determinar ciertos isómeros o compuestos ultracortos hacen que su análisis requiera metodologías especializadas y control estricto de contaminación de fondo, incluso desde el material de laboratorio (Rehman et al., 2023; Wee & Aris, 2023). Por ello, los PFAS ilustran de manera clara cómo la química analítica actual debe adaptarse continuamente a familias de contaminantes especialmente problemáticas.

3.4. Técnicas emergentes y complementarias para detección rápida

Aunque la cromatografía y la espectrometría de masas siguen siendo las técnicas de identificación más potentes, existe la necesidad de análisis rápidos, portátiles y de bajo costo, lo cual ha impulsado el desarrollo de sensores electroquímicos, biosensores, métodos basados en nanomateriales y técnicas de análisis en tiempo real. Dichas tecnologías no sustituyen por completo a los métodos instrumentales de laboratorio, pero sí facilitan y aportan ventajas para el cribado preliminar, el monitoreo in situ y la detección en tiempo real. Entre ellas, los sensores electroquímicos destacan por su sensibilidad, portabilidad y potencial de miniaturización. La modificación de electrodos con nanocompuestos ha mejorado de forma importante el desempeño analítico en el monitoreo de calidad del agua (Hassan et al., 2021; Kanoun et al., 2021). Igualmente, Raymundo-Pereira et al. (2019) reportaron la detección ultrasensible y simultánea de varios compuestos orgánicos relevantes en agua potable como hidroquinona, paracetamol y estradiol empleando un método electroquímico sencillo y de bajo costo utilizando electrodos de carbono impresos en pantalla, mientras que Rebelo et al. (2020) revisaron el uso de polímeros de impronta molecular para aumentar la selectividad en análisis ambientales pudiendo detectar diversos tipos de contaminantes en muestras de agua como fármacos, pesticidas, metales pesados, explosivos industriales (como 2,4,6-trinitrotolueno), subproductos industriales, ingredientes de cosméticos (como triclosán), retardantes de llama bromados (como tetrabromobisfenol A), colorantes industriales (como verde de metilo), compuestos fenólicos (como bisfenol A y 4-nonilfenol), entre otros. Estos sensores destacan por su alta selectividad, bajo costo, robustez, reusabilidad y capacidad para detectar contaminantes en concentraciones muy bajas. Sin embargo, su sensibilidad sigue siendo un desafío en algunos casos.

Los nanomateriales también han ampliado las posibilidades de detección rápida. Algunos estudios destacan su papel en la identificación acelerada de contaminantes acuáticos, siendo utilizados en sensores ópticos, electrónicos y electroquímicos, donde se recomienda su implementación para el monitoreo de la calidad del agua a lo largo de las líneas de distribución de agua. Esto se considera esencial debido a los posibles cambios en la calidad del agua y los riesgos asociados dentro de los sistemas de distribución de agua (Mao et al., 2015). Además, el monitoreo continuo en los sistemas de distribución y tratamiento de agua es clave para garantizar un control constante de la calidad del agua y proporcionar capacidades de alerta temprana para evitar catástrofes de seguridad pública.

Bodelón y Pastorizan-Santos (2020) muestran el progreso de la espectroscopía Raman mejorada en superficie (SERS) para la detección de contaminantes químicos en agua. Dicha técnica ofrece varias ventajas frente a las técnicas tradicionales en el análisis de agua como, alta sensibilidad, pues permite la detección de contaminantes químicos en concentraciones extremadamente bajas, incluso en el rango de nanogramos por litro (ng/L) o picogramos por litro (pg/L); la especificidad, debido a que gracias a su capacidad de reconocimiento de huellas digitales moleculares, SERS puede identificar y diferenciar compuestos químicos específicos en mezclas complejas, otra ventaja son las capacidades de multiplexación que permite la detección simultánea de múltiples contaminantes en una sola muestra, lo que optimiza el tiempo y los recursos. También, la técnica no requiere la destrucción de la muestra, lo que permite realizar análisis repetidos en la misma muestra. Los dispositivos de SERS pueden ser miniaturizados y utilizados para análisis in situ, lo que facilita el monitoreo directo en el campo sin necesidad de transportar muestras al laboratorio. Estas características hacen que SERS sea una herramienta analítica prometedora para el monitoreo rutinario de la calidad del agua y el tratamiento de aguas residuales. Sin embargo, aún existen desafíos para su implementación generalizada, como la optimización de las propiedades de las plataformas SERS y la estandarización de protocolos.

Por otra parte, el desarrollo de biosensores libres de células abre las puertas a posibilidades novedosas para la vigilancia descentralizada. El sistema ROSALIND, por ejemplo, puede detectar una amplia gama de contaminantes en el agua, incluyendo, antibióticos como la tetraciclina, doxiciclina, oxitetraciclina, clortetraciclina, eritromicina, azitromicina, claritromicina y roxitromicina, también, puede detectar moléculas orgánicas como ácido 3-hidroxibenzoico, cloruro de benzalconio, naringenina, ácido úrico y metales como zinc (Zn^{2+}), cobre ($\text{Cu}^{2+}/\text{Cu}^{+}$), plomo (Pb^{2+}) y cadmio (Cd^{2+}). El sistema utiliza sensores basados en la transcripción in vitro regulado por factores de transcripción alostéricos (aTFs) que producen señales fluorescentes en presencia de los contaminantes específicos. Se ha demostrado que estos sistemas pueden utilizarse para la detección rápida de contaminantes del agua, lo que sugiere aplicaciones futuras en contextos de monitoreo comunitario o en zonas con infraestructura analítica restringida (Jung et al., 2020). Bajo esta misma premisa, las estrategias point-of-care para patógenos y contaminantes hídricos muestran una convergencia entre química analítica, biotecnología y diagnóstico ambiental (Kumar et al., 2019).

Estas técnicas emergentes mencionadas son algunas de las que actualmente se vienen desarrollando y son especialmente valiosas cuando se requieren respuestas rápidas o cuando el acceso a equipamiento sofisticado es limitado. Sin embargo, las técnicas emergentes también presentan limitaciones debido a una menor amplitud de cobertura respecto a HRMS, la necesidad de validación frente a matrices reales, dificultades en la selectividad para mezclas complejas y, en algunos casos, la limitada estandarización para uso regulatorio. Por ello, su mayor valor actual es el de complementar, más que reemplazar, a los métodos confirmatorios tradicionales.

3.5. Del monitoreo químico al monitoreo integrado: mezcla, efecto y priorización

Uno de los aportes más importantes de la literatura reciente es la crítica al enfoque clásico basado en la medición aislada de unos pocos compuestos prioritarios. Los futuros monitoreos del agua deben equilibrar mejor la evaluación de exposición con la evaluación de toxicidad de mezclas reales (Altenburger et al., 2019). Esta idea es clave, porque en los ecosistemas acuáticos los organismos no se encuentran expuestos a un solo contaminante a la vez, sino a mezclas complejas de sustancias que, al interactuar, pueden potenciar sus efectos, sumarse entre sí o pasar desapercibidas por el análisis químico convencional. En este contexto, los bioensayos y baterías de ensayos de efecto adquieren relevancia como complemento del monitoreo químico.

Se ha demostrado la utilidad de la batería interlaboratorio de bioensayos para investigar contaminantes emergentes en extractos de agua, por ejemplo, el caso donde mediante un estudio colaborativo en el que participaron 11 laboratorios (Paolo et al., 2016), se evaluaron muestras de agua enriquecidas con cuatro contaminantes emergentes (triclosán, acridina, 17α -etinilestradiol y 3-nitrobenzantrona) como sustancias individuales o mezclas. Los bioensayos incluyeron pruebas en organismos acuáticos de tres niveles tróficos (algas, dafnias y embriones de pez cebra) y ensayos específicos de mecanismos como estrogenicidad (ER-Luc, YES) y mutagenicidad (Ames fluctuation). Los resultados mostraron que los bioensayos tienen sensibilidad y especificidad complementarias para evaluar los efectos de los contaminantes. Por ejemplo, los organismos acuáticos mostraron diferentes niveles de sensibilidad a los contaminantes, lo que confirma la importancia de evaluar múltiples taxones para una evaluación integral de la calidad del agua. Además, los ensayos de estrogenicidad y mutagenicidad identificaron con precisión los efectos específicos de los contaminantes, incluso en presencia de toxicidad no específica en mezclas. El estudio también destacó la necesidad de seguir procedimientos estandarizados y armonizados para garantizar resultados confiables.

Por otro lado, algunos estudios proponen mejorar el monitoreo de la calidad del agua al integrar datos químicos y toxicológicos haciendo uso de herramientas basadas en efectos (EBTs) para complementar el monitoreo químico. Estas herramientas incluyen bioensayos toxicológicos estándar, ensayos de reporteros celulares que miden respuestas específicas no letales o de estrés, y bioindicadores ecológicos, pasando de centrarse en unos pocos contaminantes comunes a abordar mezclas químicas complejas y sus efectos tóxicos. Se subraya que los enfoques actuales tienden a priorizar la detección de exposición química o efectos, pero se propone que los resultados del monitoreo se beneficien significativamente al vincular información sobre la presencia de químicos y sus efectos biológicos adversos (Brack et al., 2015). Además, el objetivo es llevar a la práctica la idea de 'vías de resultado adverso' (AOP). De este modo, se pueden relacionar las primeras alteraciones a nivel molecular con los efectos dañinos que sufren las personas o las poblaciones. La transición desde la etapa de saber que compuestos hay, hacia la etapa de saber qué efectos produce la mezcla, representa una evolución de gran importancia en análisis ambiental. A esto se añade la necesidad de priorizar sustancias.

Debido a la falta de conocimiento sobre el comportamiento y los impactos de los CE en los sistemas hídricos, muchas de estas sustancias no se monitorean de manera rutinaria. Esto se debe a varios inconvenientes, como la falta de datos sobre su ocurrencia y destino ambiental, el gran número de CE potencialmente presentes y el hecho de que muchos de ellos no cuentan con regulación. Por lo tanto, se requiere una priorización para desarrollar programas de monitoreo rentables que se centren en las CE de mayor riesgo y que puedan necesitar regulación en el futuro (Gaston et al., 2019). Dado que no es viable monitorear de manera rutinaria todos los contaminantes existentes en un cuerpo de agua, se han desarrollado criterios de priorización basados en frecuencia de detección, persistencia, movilidad, toxicidad, evidencia de exposición y análisis de incertidumbre (Zhong et al., 2021), demostrando así que la priorización de CE es la vía para integrar la química analítica y la ecotoxicología con la toma de decisiones en política pública.

En Europa, el establecimiento de listas de vigilancia y directrices de monitoreo ha fomentado un control más sistemático de los contaminantes orgánicos en el agua. Al respecto, diversos autores han examinado el seguimiento de los compuestos orgánicos priorizados por las normativas de la Unión Europea y han aplicado este marco de trabajo al estudio de cuencas de ríos específicas (Sousa et al., 2018; Sousa et al., 2019). No obstante, desde una perspectiva global, se ha demostrado que las políticas y regulaciones todavía avanzan a ritmos muy desiguales, lo que evidencia la brecha existente entre la velocidad de la innovación científica y la capacidad de respuesta de los marcos normativos (Puri et al., 2023).

3.6. Perspectivas desde la química ambiental

El panorama actual muestra que el monitoreo de CE está avanzando hacia metodologías integradas, combinadas y dinámicas. No es suficiente solo con mejorar la sensibilidad instrumental, también es muy necesario la ampliación del alcance químico, reducir la incertidumbre en la identificación, armonizar tanto los procedimientos como las regulaciones y conectar los resultados con decisiones de gestión. En este sentido, la química ambiental del futuro se apoyará en la combinación de diferentes capas de datos. Esto incluye el uso de análisis dirigidos para asegurar mediciones robustas, el empleo de HRMS para ampliar la cobertura de sustancias detectadas, sensores rápidos para la vigilancia localizada y la realización de bioensayos para interpretar los efectos biológicos reales (Brack et al., 2019; Li et al., 2024).

Al mismo tiempo, existe un creciente interés por desarrollar metodologías más sostenibles y miniaturizadas, que se alineen con los principios de la química verde para la transformación del análisis ambiental. Como señalan diversos estudios sobre preparación de muestras y métodos a microescala para cribado sospechoso y no dirigido, la innovación actual no solo busca ampliar la capacidad de detección de compuestos, sino también hacerlo reduciendo el consumo de recursos y maximizando la eficiencia analítica (Pena-Pereira et al., 2020; Hajeb et al., 2022). Dicho enfoque resulta especialmente importante para laboratorios con presupuestos limitados o para programas de monitoreo a gran escala.

Por último, otro de los más grandes retos es transformar el progreso analítico en acciones efectivas de gestión ambiental. El simple hecho de identificar un mayor número de compuestos no se traduce automáticamente a una mejor protección del recurso hídrico. Para lograrlo, es imprescindible integrar la ciencia analítica, evaluación de riesgo, regulación adaptativa y monitoreo constante, especialmente frente a familias de alta preocupación como PFAS, compuestos móviles persistentes y mezclas bioactivas presentes en aguas superficiales y subterráneas (Rehman et al., 2023; Wee & Aris, 2023).

4. CONCLUSIONES

Los contaminantes emergentes representan un desafío central para el análisis ambiental porque se encuentran fuera de los esquemas tradicionales de monitoreo del agua. Los CE en el agua requiere superar retos analíticos, regulatorios y de evaluación de riesgos, mediante la integración de tecnologías avanzadas, bases de datos químicas y toxicológicas, armonización de políticas y enfoques multidisciplinarios. Su diversidad química, presencia en niveles traza, transformación continua y comportamiento como mezclas complejas impiden que sean abordados de forma adecuada mediante listas reducidas de compuestos o técnicas analíticas únicas. El futuro del monitoreo no debe limitarse solo a la identificación de sustancias, sino que, es necesaria la convergencia entre la exposición química, priorización, persistencia, movilidad y toxicidad de mezclas reales. También, se debe resaltar

la necesidad de monitoreo integral, desarrollo de métodos sensibles y colaboración internacional para proteger la salud y los ecosistemas. En este sentido, los bioensayos y los enfoques de evaluación de efecto se perfilan como componentes esenciales de una vigilancia más representativa del riesgo ambiental.

Desde la perspectiva de la química, la detección y el monitoreo de estos contaminantes exigen una combinación de estrategias. Como en el caso de los PMOCs donde debido a la diversidad de propiedades químicas, se requieren múltiples métodos analíticos complementarios, como MMLC, HILIC, RPLC y SFC, para cubrir un amplio rango de compuestos. Por otro lado, la preparación de muestra sigue siendo un factor crítico importante a tener en consideración, mientras que la cromatografía acoplada a espectrometría de masas, especialmente HRMS, constituye la herramienta más sólida para ampliar la cobertura de detección. Al mismo tiempo, los sensores electroquímicos, biosensores, técnicas espectroscópicas y métodos miniaturizados aportan soluciones prometedoras para el monitoreo rápido y complementario.

En conclusión, el abordaje de los contaminantes emergentes en el agua demanda una química ambiental más amplia, interdisciplinaria y orientada a la toma de decisiones. El principal reto no es solo detectar más compuestos, sino construir sistemas de monitoreo capaces de transformar esa información en prevención, regulación y protección efectiva de los recursos hídricos.

5. AGRADECIMIENTOS

A Dios, por brindarme la fortaleza, la salud y la perseverancia necesarias para culminar este trabajo.

A mi familia, por su paciencia, comprensión y apoyo incondicional durante todo este proceso académico. Su confianza y esperanza depositadas en mí han sido el motor que me impulsó para alcanzar mis metas, convirtiéndose en una fuente constante de motivación.

Finalmente, a mi director de monografía, Sergio David Mosquera González, por su comprensión, diligencia, orientación, dedicación y valiosos aportes, por lo cual fue parte esencial para el desarrollo de este trabajo.

6. DECLARACION DEL USO DE INTELIGENCIA ARTIFICIAL

El autor declara que no se utilizó inteligencia artificial para la generación de ideas, redacción o análisis de resultados en esta monografía. Únicamente se emplearon recursos digitales convencionales para corrección ortográfica y formato del texto.

7. CONFLICTO DE INTERESES

El autor declara que no existe conflicto de interés alguno en la realización de esta monografía y manifiesta que ninguna institución, organización o entidad financiera influyó en la elaboración del presente trabajo, así como tampoco se obtuvo algún beneficio personal distinto al académico.

8. REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS

Altenburger, R., Brack, W., Burgess, R., Busch, W., Escher, B., Focks, A., Hewitt, L. M., Jacobsen, B., de Alda, M. L., Ait-Aissa, S., Backhaus, T., Ginebreda, A., Hilscherová, K., Hollender, J., Hollert, H., Neale, P., Schulze, T., Schymanski, E. L., Teodorovic, I., Tindall, A., Umbuzeiro, G. A., Vrana, B., Zonja, B., Krauss, M. (2019). Future water quality monitoring: Improving the balance between exposure and toxicity assessments of real-world pollutant mixtures. *Environmental Sciences Europe*, 31, 12. <https://doi.org/10.1186/s12302-019-0193-1>

Bade, R., Bijlsma, L., Miller, T. H., Barron, L., Sancho, J. V., Hernández, F. (2015). Suspect screening of large numbers of emerging contaminants in environmental waters using artificial neural networks for chromatographic retention time prediction and high resolution mass spectrometry data analysis. *Science of the Total Environment*, 538, 934–941. <https://doi.org/10.1016/j.scitotenv.2015.08.078>

Bodelón, G., Pastorizan-Santos, I. (2020). Recent progress in surface-enhanced Raman scattering for the detection of chemical contaminants in water. *Frontiers in Chemistry*, 8, 478. <https://doi.org/10.3389/fchem.2020.00478>

Brack, W., Altenburger, R., Schüürmann, G., Krauss, M., Herráez, D. L., van Gils, J., Slobodnik, J., Munthe, J., Gawlik, B., van Wezel, A., Schriks, M., Hollender, J., Tollefsen, K., Mekenyan, O., Dimitrov, S., Bunke, D., Cousins, I., Posthuma, L., van den Brink, P. J., de Alda, M. L., Barceló, D., Faust, M., Kortenkamp, A., Scrimshaw, M., Ignatova, S., Engelen, G., Massmann, G., Lemkine, G., Teodorovic, I., Walz, K., Dulio, V., Jonker, M., Jäger, F., Chipman, K., Falciani, F., Liška, I., Rooke, D., Zhang, X., Hollert, H., Vrana, B., Hilscherová, K., Kramer, K., Neumann, S., Hammerbacher, R., Backhaus, T., Mack, J., Segner, H., Escher, B., Umbuzeiro, G. A. (2015). The SOLUTIONS project: Challenges and responses for present and future emerging pollutants in land and water resources management. *Science of the Total Environment*, 503–504, 22–31. <https://doi.org/10.1016/j.scitotenv.2014.05.143>

Brack, W., Hollender, J., de Alda, M. L., Müller, C., Schulze, T., Schymanski, E. L., Slobodnik, J., Krauss, M. (2019). High-resolution mass spectrometry to complement monitoring and track emerging chemicals and pollution trends in European water resources. *Environmental Sciences Europe*, 31, 84. <https://doi.org/10.1186/s12302-019-0230-0>

Castiglioni, S., Davoli, E., Riva, F., Palmiotto, M., Camporini, P., Manenti, A., Zuccato, E. (2018). Mass balance of emerging contaminants in the water cycle of a highly urbanized and industrialized area of Italy. *Water Research*, 131, 287–297. <https://doi.org/10.1016/j.watres.2017.12.047>

Dimpe, K. M., Nomngongo, P. (2016). Current sample preparation methodologies for analysis of emerging pollutants in different environmental matrices. *Trends in Analytical Chemistry*, 79, 206–226. <https://doi.org/10.1016/j.trac.2016.05.023>

Gago-Ferrero, P., Bletsou, A., Damalas, D., Aalizadeh, R., Alygizakis, N. A., Singer, H., Hollender, J., Thomaidis, N. (2019). Wide-scope target screening of >2000 emerging contaminants in wastewater samples with UPLC-Q-ToF-HRMS/MS. *Journal of Hazardous Materials*, 371, 156–168. <https://doi.org/10.1016/j.jhazmat.2019.121712>

García-Córcoles, M. T., Rodríguez-Gómez, R., Alarcón-Gómez, B. D., Çipa, M., Martín-Pozo, L., Kauffmann, J., Zafra-Gómez, A. (2018). Chromatographic methods for the determination of emerging contaminants in natural water and wastewater samples: A review. *Critical Reviews in Analytical Chemistry*, 49(2), 160–186. <https://doi.org/10.1080/10408347.2018.1496010>

Gaston, L., Lapworth, D., Stuart, M., Arnscheidt, J. (2019). Prioritization approaches for substances of emerging concern in groundwater: A critical review. *Environmental Science & Technology*, 53(11), 6107–6122. <https://doi.org/10.1021/acs.est.8b04490>

Gavrilescu, M., Demnerová, K., Aamand, J., Agathos, S., Fava, F. (2015). Emerging pollutants in the environment: Present and future challenges in biomonitoring, ecological risks and bioremediation. *New Biotechnology*, 32(1), 147–156. <https://doi.org/10.1016/j.nbt.2014.01.001>

Geissen, V., Mol, H., Klumpp, E., Umlauf, G., Nadal, M., van der Ploeg, M., van de Zee, S. E., Ritsema, C. (2015). Emerging pollutants in the environment: A challenge for water resource management. *International Soil and Water Conservation Research*, 3(1), 57–65. <https://doi.org/10.1016/j.iswcr.2015.03.002>

Gogoi, A., Mazumder, P., Tyagi, V. K., Chaminda, G. G. T., An, A. K., Kumar, M. (2018). Occurrence and fate of emerging contaminants in water environment: A review. *Groundwater for Sustainable Development*, 6, 169–180. <https://doi.org/10.1016/j.gsd.2017.12.009>

Gosetti, F., Mazzucco, E., Gennaro, M. C., Marengo, E. (2016). Contaminants in water: Non-target UHPLC/MS analysis. *Environmental Chemistry Letters*, 14, 51–65. <https://doi.org/10.1007/s10311-015-0527-1>

- Hajeb, P., Zhu, L., Bossi, R., Vorkamp, K. (2022). Sample preparation techniques for suspect and non-target screening of emerging contaminants. *Chemosphere*, 287, 132306. <https://doi.org/10.1016/j.chemosphere.2021.132306>
- Hassan, M. H., Khan, R., Andreescu, S. (2021). Advances in electrochemical detection methods for measuring contaminants of emerging concern. *Electrochemical Science Advances*, 1(3), e2100184. <https://doi.org/10.1002/elsa.202100184>
- Jung, J. K., Alam, K. K., Verosloff, M. S., Capdevila, D. A., Desmau, M., Clauer, P. R., Lee, J. W., Nguyen, P. Q., Pastén, P. A., Matiassek, S. J., Gaillard, J.-F., Giedroc, D. P., Collins, J. J., Lucks, J. B. (2020). Cell-free biosensors for rapid detection of water contaminants. *Nature Biotechnology*, 38(12), 1451–1459. <https://doi.org/10.1038/s41587-020-0571-7>
- Kanoun, O., Lazarević-Pašti, T., Pašti, I., Nasraoui, S., Talbi, M., Brahem, A., Adiraju, A., Sheremet, E., Rodriguez, R. D., Ali, M., Al-Hamry, A. (2021). A review of nanocomposite-modified electrochemical sensors for water quality monitoring. *Sensors*, 21(12), 4131. <https://doi.org/10.3390/s21124131>
- Khan, S., Naushad, M., Govarthan, M., Iqbal, J., Alfadul, S. M. (2021). Emerging contaminants of high concern for the environment: Current trends and future research. *Environmental Research*, 192, 110312. <https://doi.org/10.1016/j.envres.2021.112609>
- Kumar, S., Nehra, M., Mehta, J., Dilbaghi, N., Marrazza, G., Kaushik, A. (2019). Point-of-care strategies for detection of waterborne pathogens. *Sensors*, 19(20), 4476. <https://doi.org/10.3390/s19204476>
- Li, X., Shen, X., Jiang, W., Xi, Y., Li, S. (2024). Comprehensive review of emerging contaminants: Detection technologies, environmental impact, and management strategies. *Ecotoxicology and Environmental Safety*, 267, 116420. <https://doi.org/10.1016/j.ecoenv.2024.116420>
- Mao, S., Chang, J., Zhou, G., Chen, J. (2015). Nanomaterial-enabled rapid detection of water contaminants. *Small*, 11(38), 5336–5359. <https://doi.org/10.1002/smll.201500831>
- Martín-Pozo, L., Alarcón-Gómez, B. D., Rodríguez-Gómez, R., García-Córcoles, M. T., Çipa, M., Zafra-Gómez, A. (2019). Analytical methods for the determination of emerging contaminants in sewage sludge samples: A review. *Talanta*, 192, 508–533. <https://doi.org/10.1016/j.talanta.2018.09.056>
- McCance, W., Jones, O. A. H., Edwards, M., Surapaneni, A., Chadalavada, S., Currell, M. (2018). Contaminants of emerging concern as novel groundwater tracers for delineating wastewater impacts in urban and peri-urban areas. *Water Research*, 146, 118–133. <https://doi.org/10.1016/j.watres.2018.09.013>
- Montes, R., Aguirre, J., Vidal, X., Rodil, R., Cela, R., Quintana, J. B. (2017). Screening for polar chemicals in water by trifunctional mixed-mode liquid chromatography–high resolution mass spectrometry. *Environmental Science & Technology*, 51(11), 6250–6259. <https://doi.org/10.1021/acs.est.6b05135>
- Montes, R., Rodil, R., Cela, R., Quintana, J. B. (2019). Determination of persistent and mobile organic contaminants (PMOCs) in water by mixed-mode liquid chromatography–tandem mass spectrometry. *Analytical Chemistry*, 91(6), 3787–3795. <https://doi.org/10.1021/acs.analchem.8b05792>
- Noguera-Oviedo, K., Aga, D. S. (2016). Lessons learned from more than two decades of research on emerging contaminants in the environment. *Journal of Hazardous Materials*, 316, 242–251. <https://doi.org/10.1016/j.jhazmat.2016.04.058>
- Paolo, C. D., Ottermanns, R., Keiter, S., Ait-Aissa, S., Bluhm, K., Brack, W., Breitholtz, M., Buchinger, S., Carere, M., Chalon, C., Cousin, X., Dulio, V., Escher, B. I., Hamers, T., Hilscherová, K., Jarque, S., Jonáš, A., Maillot-Maréchal, E., Marneffe, Y., Nguyen, M. T., Pandard, P., Schifferli, A., Schulze, T., Seidensticker, S., Seiler, T.-B., Tang, J., van der Oost, R., Vermeirssen, E., Zounková, R., Zwart, N., Hollert, H. (2016). Bioassay battery

interlaboratory investigation of emerging contaminants in spiked water extracts. *Water Research*, 101, 616–630. <https://doi.org/10.1016/j.watres.2016.08.018>

Paszkiewicz, M., Godlewska, K., Lis, H., Caban, M., Białk-Bielińska, A., Stepnowski, P. (2022). Advances in suspect screening and non-target analysis of polar emerging contaminants in environmental monitoring. *Trends in Analytical Chemistry*, 150, 116671. <https://doi.org/10.1016/j.trac.2022.116671>

Pena-Pereira, F., Bendicho, C., Pavlović, D., Martín-Esteban, A., Díaz-Álvarez, M., Pan, Y., Cooper, J., Yang, Z., Šafařík, I., Pospíšková, K., Segundo, M. A., Psillakis, E. (2020). Miniaturized analytical methods for determination of environmental contaminants of emerging concern: A review. *Analytica Chimica Acta*, 1128, 1–27. <https://doi.org/10.1016/j.aca.2020.11.040>

Petrie, B., Barden, R., Kasprzyk-Hordern, B. (2015). A review on emerging contaminants in wastewaters and the environment. *Water Research*, 72, 3–27. <https://doi.org/10.1016/j.watres.2014.08.053>

Petrie, B., Youdan, J., Barden, R., Kasprzyk-Hordern, B. (2016). Multi-residue analysis of 90 emerging contaminants in liquid and solid environmental matrices by ultra-high-performance liquid chromatography tandem mass spectrometry. *Journal of Chromatography A*, 1431, 64–78. <https://doi.org/10.1016/j.chroma.2015.12.036>

Primpke, S., Godejohann, M., Gerdt, G. (2020). Rapid identification and quantification of microplastics in the environment by quantum cascade laser-based hyperspectral infrared chemical imaging. *Environmental Science & Technology*, 54(19), 12338–12345. <https://doi.org/10.1021/acs.est.0c05722>

Puri, M., Gandhi, K., Kumar, M. (2023). Emerging environmental contaminants: A global perspective on policies and regulations. *Journal of Environmental Management*, 330, 117344. <https://doi.org/10.1016/j.jenvman.2023.117344>

Rasheed, T., Bilal, M., Nabeel, F., Adeel, M., Iqbal, H. M. N. (2019). Environmentally-related contaminants of high concern. *Environment International*, 122, 52–66. <https://doi.org/10.1016/j.envint.2018.11.038>

Raymundo-Pereira, P. A., Gomes, N. O., Machado, S. A. S., Oliveira, O. N. (2019). Simultaneous, ultrasensitive detection of hydroquinone, paracetamol and estradiol for quality control of tap water. *Journal of Electroanalytical Chemistry*, 848, 113319. <https://doi.org/10.1016/j.jelechem.2019.113319>

Rebelo, P., Costa-Rama, E., Seguro, I., Pacheco, J., Nouws, H., Cordeiro, M., Delerue-Matos, C. (2020). Molecularly imprinted polymer-based electrochemical sensors for environmental analysis. *Biosensors and Bioelectronics*, 172, 112719. <https://doi.org/10.1016/j.bios.2020.112719>

Reemtsma, T., Berger, U., Arp, H. P. H., Gallard, H., Knepper, T. P., Neumann, M., Quintana, J. B., de Voigt, P. (2016). Mind the gap: Persistent and mobile organic compounds—Water contaminants that slip through. *Environmental Science & Technology*, 50(19), 10308–10315. <https://doi.org/10.1021/acs.est.6b03338>

Rehman, A., Crimi, M., Andreescu, S. (2023). Current and emerging analytical techniques for the determination of PFAS in environmental samples. *Trends in Environmental Analytical Chemistry*, 38, e00198. <https://doi.org/10.1016/j.teac.2023.e00198>

Richardson, S. D., Kimura, S. Y. (2019). Water analysis: Emerging contaminants and current issues. *Analytical Chemistry*, 92(1), 473–505. <https://doi.org/10.1021/acs.analchem.9b05269>

Rüdel, H., Körner, W., Letzel, T., Neumann, M., Nödler, K., Reemtsma, T. (2020). Persistent, mobile and toxic substances in the environment: A spotlight on current research and regulatory activities. *Environmental Sciences Europe*, 32, 5. <https://doi.org/10.1186/s12302-019-0286-x>

- Schulze, S., Zahn, D., Montes, R., Rodil, R., Quintana, J. B., Knepper, T. P., Reemtsma, T., Berger, U. (2019). Occurrence of emerging persistent and mobile organic contaminants in European water samples. *Water Research*, 153, 80–90. <https://doi.org/10.1016/j.watres.2019.01.008>
- Sousa, J. C., Ribeiro, A., Barbosa, M. O., Pereira, M. F., Silva, A. M. T. (2018). A review on environmental monitoring of water organic pollutants identified by EU guidelines. *Journal of Hazardous Materials*, 344, 146–162. <https://doi.org/10.1016/j.jhazmat.2017.09.058>
- Sousa, J. C., Ribeiro, A., Barbosa, M. O., Ribeiro, C., Tiritan, M. E., Pereira, M. F., Silva, A. M. T. (2019). Monitoring of the 17 EU Watch List contaminants of emerging concern in the Ave and the Sousa Rivers. *Science of the Total Environment*, 649, 1083–1095. <https://doi.org/10.1016/j.scitotenv.2018.08.309>
- Wee, S. Y., Aris, A. Z. (2023). Revisiting the “forever chemicals”, PFOA and PFOS exposure in drinking water. *npj Clean Water*, 6, 74. <https://doi.org/10.1038/s41545-023-00274-6>
- Zhong, M., Wang, T., Zhao, W., Huang, J., Wang, B., Blaney, L., Bu, Q., Yu, G. (2021). Emerging organic contaminants in Chinese surface water: Identification of priority pollutants. *Engineering*, 7(5), 665–674. <https://doi.org/10.1016/j.eng.2020.12.023>