

S14 – TOXICOLOGÍA Y MEDIO AMBIENTE / TOXICOLOGY AND NATURAL ENVIRONMENT
2^{do} SIMPOSIO INTERNACIONAL DE TOXICOLOGÍA Y MEDIO AMBIENTE / 2^{do} SIMPOSIO
INTERNACIONAL DE TOXICOLOGÍA AMBIENTAL Y REGULATORIA
2nd INTERNATIONAL SYMPOSIUM OF TOXICOLOGY AND ENVIRONMENT / 2nd
INTERNATIONAL SYMPOSIUM OF ENVIRONMENTAL AND REGULATORY TOXICOLOGY

COORDINADORES / COORDINATORS:

Yoagne Trapero, PhD, Instituto de Farmacia y Alimentos de la Universidad de La Habana (IFAL-UH),
La Habana, Cuba /

Braulio D. Jiménez Vélez PhD, Universidad de Puerto Rico, Puerto Rico

Contenido

PO-85: ESTUDIO DEL TRAUMA ASOCIADO AL USO DE DROGAS EN PUERTO RICO / STUDYING TRAUMA ASSOCIATED WITH DRUG USE IN PUERTO RICO	263
PO-86: LAS RADIACIONES IONIZANTES Y NO IONIZANTES EN LA DEGRADACIÓN DE AGUAS CONTAMINADAS CON FÁRMACOS / THE IONIZING AND NON-IONIZING RADIATIONS IN THE WATER DEGRADATION CONTAMINATED WITH DRUGS	264
PO-87: BIOTRANSFORMACIÓN DE 17 β -ESTRADIOL PRESENTE EN AGUA MEDIANTE DESNITRIFICACIÓN / BIOTRANSFORMATION OF 17 β -ESTRADIOL PRESENT IN WATER BY MEANS OF DESNITRIFICATION.....	265
PO-88: EFECTOS EN LA SALUD POR LA CONTAMINACIÓN DEL AIRE EN LA HABANA, CUBA / HEALTH EFFECTS FROM AIR POLLUTION IN HAVANA, CUBA.....	266
P-210: DEGRADACIÓN DEL DIAZEPAM, MIDAZOLAM Y FLUMAZENILO POR RADIACIÓN GAMMA EN MATRICES DE AGUAS SUCIAS / DEGRADATION OF DIAZEPAM, MIDAZOLAM AND FLUMAZENIL BY GAMMA RADIATION IN WASTE WATER MATRICES.....	267
P-211: EL CAMBIO CLIMÁTICO: POSIBLE IMPACTO SOBRE EL ALMACENAMIENTO DE LOS MEDICAMENTOS EN CUBA. 2016-2018 / CLIMATE CHANGE: POSSIBLE IMPACT ON THE STORAGE OF MEDICINES IN CUBA. 2016-2018	268
P-212: EL MEDIO AMBIENTE Y EL IMPACTO DE LOS DESECHOS FARMACÉUTICOS PELIGROSOS / THE ENVIRONMENT AND THE IMPACT OF THE DANGEROUS PHARMACEUTICAL RESIDUES.....	269
P-213: CAPACIDAD BIODEGRADATIVA DE LAS ENZIMAS LIGNINOLÍTICAS: SU APLICACIÓN PARA LA REMEDIACIÓN DE ECOSISTEMAS CONTAMINADOS / BIODEGRADATIVE CAPACITY OF LIGNINOLYTIC ENZYMES: ITS APPLICATION FOR THE REMEDY OF CONTAMINATED ECOSYSTEMS	270

P-214: PAPEL DE LOS GRUPOS DE AMINA DE SUPERFICIE EN LA ADSORCIÓN DE CLORDECONA Y β -HEXAFLOROCICLOHEXANO POR EL CARBÓN ACTIVADO: ESTUDIO TEÓRICO / ROLE OF AMINE SURFACE GROUPS IN CHLORDECONE AND β -HEXACHLOROCYCLOHEXANE ADSORPTION BY ACTIVATED CARBON: THEORETICAL STUDY	271
P-215: VALIDACIÓN DE INDICADORES DE CALIDAD ESPECÍFICOS PARA LA MEDICIÓN DE LA CALIDAD ASISTENCIAL EN INTOXICADOS AGUDOS / VALIDATION OF SPECIFIC QUALITY INDICATORS FOR THE MEASUREMENT OF THE WELFARE QUALITY IN ACUTE INTOXICATED	272
P-216: INTOXICACIONES AGUDAS POR PSICOFÁRMACOS ATENDIDAS EN EL CENTRO NACIONAL DE TOXICOLOGÍA ENTRE 2001 Y 2016 / ACUTE POISONINGS BY PSYCODRUGS SEEN IN THE NATIONAL CENTER OF TOXICOLOGY BETWEEN 2001 AND 2016	273
P-217: NECESIDAD DE MODIFICAR POLÍTICA DE ANTÍDOTOS EN CUBA / NECESSITY OF MODIFYING THE ANTIDOTES POLICY IN CUBA	274
P-218: INTOXICACIÓN MEDICAMENTOSA POR EL USO DE LA LAMOTRIGINA EN PACIENTES EPILÉPTICOS / MEDICAL POISONING BY LAMOTRYGIN USE IN EPILEPTIC PATIENTS.....	275



**PO-85: ESTUDIO DEL TRAUMA ASOCIADO AL USO DE DROGAS EN PUERTO RICO /
STUDYING TRAUMA ASSOCIATED WITH DRUG USE IN PUERTO RICO**

Braulio Jiménez-Vélez

University of Puerto Rico, School of Medicine, Medical Sciences Campus, Biochemistry Dept,
Center for Environmental and Toxicological Research. E-mail: braulio.jimenez@upr.edu

Introduction: Studies on illicit drug use is associated with traffic accidents and estimates indicate that some type of illicit substances is involved in at least 77.9% of the cases including all age groups. In this study, we are correlating the incidence of severe trauma related to the use of drugs and other substances in Puerto Rico. **Materials and Methods:** Blood and urine toxicology assays were ran in these patients once they arrived at the trauma center and analyzed for type of drug, trauma class, age, and gender. Trauma data collected from 2006 until 2013, were used to evaluate the prevalence of drugs in trauma patients. **Results:** Blood and urine toxicology in trauma patients showed that the most prevalent single drug use in the Puerto Rican population are benzodiazepines. This drug was present in 19.8% of drug related trauma, followed by ethanol (18.5%) and marijuana (12.2%). Approximately 77.9% of the patients admitted reflected the presence of one illicit drug. This has great implications since it shows that the use of illicit drugs highly increases the risk of traffic accidents, leading to trauma. In most trauma cases, at there are more drivers under the influence of drugs than passengers, there being 1814 cases for drivers and 275 cases for passengers. The most prevalent drugs used by drivers and passengers are benzodiazepines (20.0% and 18.5%), ethanol (19.1% and 18.5%), respectively. Benzodiazepines, ethanol and THC are the most prevalent drugs used by drivers and are strongly associated with the age group 18-29 years old. **Conclusion:** We will show the relationships of drug use and age for the different types of trauma in Puerto Rico.



PO-86: LAS RADIACIONES IONIZANTES Y NO IONIZANTES EN LA DEGRADACIÓN DE AGUAS CONTAMINADAS CON FÁRMACOS / THE IONIZING AND NON-IONIZING RADIATIONS IN THE WATER DEGRADATION CONTAMINATED WITH DRUGS

Ulises Jáuregui Haza¹, Katia González-Labrada², Michel Manduca Artilles¹

¹Instituto Superior de Tecnologías y Ciencias Aplicadas (InSTEC). Universidad de La Habana, Cuba. E-mail: ulises@instec.cu . ²Universidad Tecnológica de la Habana, Cuba

Introducción: El efecto acumulativo de fármacos como contaminantes de aguas es un problema de atención prioritaria a nivel mundial. La causa del problema: el incremento del uso de medicamentos y la no disponibilidad de tecnologías en las plantas de tratamiento de residuales para la degradación de los mismos. Por ello, la búsqueda e implementación de procesos avanzados de oxidación (PAO) como alternativa a resolver este problema es una urgencia. Este trabajo presenta las experiencias de nuestro grupo en el empleo de los PAO para la degradación de medicamentos en aguas. **Materiales y Métodos:** Como procedimientos hemos abordado las radiaciones ionizantes (gamma) y no ionizantes (ultrasónica y ultravioleta), por sí solas o intensificadas con el uso de oxidantes y catalizadores (peróxido de hidrógeno y reactivo de Fenton; dióxido de titanio). **Resultados:** La radiación gamma garantiza la degradación total de los contaminantes y una adecuada mineralización en menos tiempo. Sin embargo, la radiación ultravioleta, con fuente artificial o natural, garantiza igual excelentes resultados con la ventaja de ser más factible técnico-económicamente, demostrado en experiencias exitosas a escala de banco. El empleo combinado de los PAO con oxidantes y catalizadores acelera la descontaminación de las aguas. Por último, si bien el ultrasonido pudiera ser una alternativa futura, los aún largos tiempo de sonicación elevan los costos energéticos de su aplicación. Como aspecto interesante se presentan resultados con mezclas de contaminantes en muestras reales de aguas residuales. **Conclusiones:** Ahora hay que avanzar en la introducción de los PAO en la industria de tratamiento y descontaminación de aguas.

PO-87: BIOTRANSFORMACIÓN DE 17 β -ESTRADIOL PRESENTE EN AGUA MEDIANTE DESNITRIFICACIÓN / BIOTRANSFORMATION OF 17 β -ESTRADIOL PRESENT IN WATER BY MEANS OF DESNITRIFICATION

Camacho-López C¹, Romo-Gómez C¹, Marmolejo-Santillán Y¹, Otazo-Sánchez EM¹, García-Nieto E², Juárez-Santacruz L²

¹Universidad Autónoma del Estado de Hidalgo, Área Académica de Química, Carretera Pachuca-Tulancingo Km 4.5, Mineral de la Reforma, Hidalgo C.P. 42184, México. ²Universidad Autónoma de Tlaxcala, Centro de Investigación en Genética y Ambiente, Autopista San Martín-Tlaxcala Km. 10.5, CP 90120, Tlaxcala, México. E-mail: claudiar@uaeh.edu.mx

Introducción: El 17 β -estradiol (E2) es uno de los fármacos hormonales utilizado eficazmente para el tratamiento de ciertas enfermedades, como anticonceptivo y en la ganadería. Al ser desechado el E2 a través de la orina ocasiona alteraciones endocrinas en ambientes acuáticos. La desnitrificación ha demostrado tener la capacidad para mineralizar compuestos recalcitrantes e incluso antibióticos y transformarlos hasta N₂ y HCO₃⁻ que son compuestos inocuos en el medio ambiente. El objetivo del trabajo fue evaluar la capacidad de un lodo desnitrificante para la eliminación de E2 contenido en agua. **Materiales y Métodos:** Se realizaron ensayos en lote con 30 mg C-E2/L a una C/N 1.8, en botellas serológicas (60 mL), inoculadas con 0.5 g/L de lodo desnitrificante (SSV) previamente estabilizado, pH 7, atmósfera anóxica e incubadas a 33 °C y 200 rpm. Se realizaron ensayos control para evaluar pérdidas por adsorción, reacción química y volatilización. Se determinaron las concentraciones de sustratos y productos mediante cromatografía de gases (GC) y líquidos (HPLC) para calcular eficiencias de consumo (E) y rendimiento de producción (Y) del proceso. **Resultados:** Los ensayos control indicaron que no hubo pérdida de E2 por adsorción, reacción química o volatilización. Los ensayos desnitrificantes con 30 mg C-E2/L demostraron que después de 10 h de reacción la eficiencia de consumo fue 78,54 \pm 3,12% de C-E2, y rendimientos de HCO₃⁻, CO₂ y N₂ de 0,9708 \pm 0,115, 0,029 \pm 0,0011 y 1,17 \pm 0,0141, respectivamente. **Conclusiones:** El lodo desnitrificante tuvo la capacidad de biodegradar hasta 23,4 mg C-E2/L y 16,66 mg N-NO₃⁻/L, sin la generación de intermediarios.

**PO-88: EFECTOS EN LA SALUD POR LA CONTAMINACIÓN DEL AIRE EN LA HABANA, CUBA /
HEALTH EFFECTS FROM AIR POLLUTION IN HAVANA, CUBA**

Yoagne Trapero-Quintana¹, Braulio Jiménez-Vélez², Michel Manduca³

¹Instituto de Farmacia y Alimentos, Universidad de La Habana, Cuba. ²Centro para las Investigaciones Toxicológicas y Ambientales, Departamento de Bioquímica, Facultad de Medicina, Campus de Ciencias Médicas, Universidad de Puerto Rico, Puerto Rico. ³Instituto Superior de Tecnologías y Ciencias Aplicadas (InSTEC). Universidad de La Habana, Cuba. E-mail: yoagnetq@ifal.uh.cu

Introducción: La contaminación del aire es importante en la determinación de la calidad de vida de niños, ancianos y en pacientes con enfermedades respiratorias y cardiovasculares. Se determinó la relación existente entre la aparición de enfermedades respiratorias, registradas en una zona urbana de la Habana y las concentraciones de material particulado (MP) descrito en esas zonas en un año. **Materiales y Métodos:** Para estimar el riesgo que significa la presencia de un tóxico en un sitio determinado es necesario conocer su toxicidad, la cantidad de tóxico que entra en contacto con el organismo o población en estudio y las condiciones en las que se da este contacto. Se comparan los datos de concentraciones de MP10 (metales) y la aparición de enfermedades. La concentración MP10 es importante para evaluar el riesgo en la salud; sin embargo, es importante la composición química de tales partículas. **Resultados:** La concentración media de todos los metales analizados, demuestra que, en este estudio, el MP10 en las muestras de aire analizadas, los metales pesados encontrados fueron: Zn, Ni, Pb, Cd, Co, Cu y Hg, observándose los niveles más altos para el Zn, Cu y Pb. En Cuba en el año del estudio la tasa de incidencia de enfermedades respiratorias agudas fue de 6 145 621. En este mismo año se encuentran las enfermedades del corazón y la neumonía como dos de las cinco primeras causas de muerte en el país, aunque existen muchas posibles otras causas. **Conclusiones:** La contaminación del MP por los metales pesados pueden haber influido en estos resultados.

P-210: DEGRADACIÓN DEL DIAZEPAM, MIDAZOLAM Y FLUMAZENILO POR RADIACIÓN GAMMA EN MATRICES DE AGUAS SUCIAS / DEGRADATION OF DIAZEPAM, MIDAZOLAM AND FLUMAZENIL BY GAMMA RADIATION IN WASTE WATER MATRICES

Michel Manduca Artilles¹, Susana Gómez González², Claudia Marchan Moreno¹, **Mónica Vázquez Rodríguez**¹, Sarra Gaspard³, Ulises Jáuregui-Haza⁴

¹Instituto Superior de Tecnologías y Ciencias Aplicadas (InSTEC), Universidad de La Habana, Cuba. E-mail: mvazquez@instec.cu. ²Laboratorios farmacéuticos AICA⁺, La Habana, Cuba. ³Laboratoire COVACHIM M2E, Université des Antilles, Pointe à Pitre, 97157 Guadeloupe, France. ⁴Instituto Tecnológico de Santo Domingo, Ave. de los Próceres, Santo Domingo, República Dominicana

Introduction: The benzodiazepines are the most prescribed anxiolytics in the world, among the emerging pollutants of interest due to the affectations that cause on aquatic organisms. Its concentration in the water bodies is in the order of hundreds of micrograms/liter, with values of removal of less than 10% in waste treatment plants. The inability of conventional biological systems to eliminate toxic substances such as benzodiazepines imposes the implementation of new technologies including advanced oxidation processes. **Materials and Methods:** In the present work, we studied, for the first time, the degradation of diazepam, midazolam and flumazenil in synthetic aqueous solutions and in real wastewater by using gamma radiation and its intensification with hydrogen peroxide and Fenton reagent. **Results:** The removal efficiency of the drugs increased with dose increasing during the irradiation process. The best conditions for total radiolytic degradation were obtained at pH 3 and an absorbed dose of 2500 Gy for diazepam and midazolam and 1000 Gy for flumazenil. Gamma-degradation of the three drugs followed a first order kinetic. Coupling gamma radiation with Fenton reagent in synthetic matrices showed a positive synergy with 100% of degradation and low values of energetic consume in five minutes of irradiation, for all the drugs. The gamma-Fenton processes evaluated in wastewater guarantees 95.7%, 95.8% and 89.6% for diazepam, midazolam and flumazenil respectively, in just five minutes of irradiation. **Conclusion:** Based on the overall analysis, the combined gamma irradiation and Fenton reagent treatment process can be an alternative for removing the persistent pollutants such as benzodiazepines and flumazenil from wastewaters.

P-211: EL CAMBIO CLIMÁTICO: POSIBLE IMPACTO SOBRE EL ALMACENAMIENTO DE LOS MEDICAMENTOS EN CUBA. 2016-2018 / CLIMATE CHANGE: POSSIBLE IMPACT ON THE STORAGE OF MEDICINES IN CUBA. 2016-2018

Diana Pereda Rodríguez¹, MSc. Grethel Ortega Larrea¹, MSc. Mayra González Rodríguez² y MSc. Diana García García²

¹Centro para el Control Estatal de Medicamentos, Equipos y Dispositivos Médicos, La Habana, Cuba. E-mail: dianapr@cecmecmed.cu. ²Empresa Comercializadora y Distribuidora de Medicamentos, Dirección de Calidad, La Habana, Cuba.

Introducción: La Sección de Vigilancia de Productos Sanitarios durante el desarrollo de peritajes farmacéuticos ha identificado que las temperaturas durante el almacenamiento mayorista pueden sobrepasar los 30 °C, en algunas regiones del país. El cambio climático se evidencia en el ascenso de la temperatura del aire, las alteraciones en el régimen de precipitaciones, de lo cual nuestro país no está excluido. Por lo que las implicaciones del cambio climático sobre el almacenamiento y la vida útil de muchos medicamentos son claramente considerables y en aquellas instalaciones donde las condiciones no sean las adecuadas el efecto de este fenómeno puede tener mayor incidencia sobre la calidad de los productos. **Objetivo:** Describir el posible impacto del cambio climático en el almacenamiento mayorista de los medicamentos en Cuba. **Materiales y métodos:** Se consultaron los registros de temperaturas de las droguerías del país de los meses enero-diciembre de 2018, así como los históricos de los años 2016 y 2017. **Resultados:** Las temperaturas registradas por las droguerías en el 2016 arrojó que los promedios más altos se alcanzaron en la región oriental y correspondieron a los meses de junio a septiembre, sobrepasando todos los 30°C. En el 2017 se encontró similar comportamiento. Los datos del 2018 mostraron que los promedios de temperaturas sobrepasaron los 30°C en 13 droguerías de las 23 estudiadas. **Conclusiones:** Los resultados obtenidos constituyen un punto de atención que debemos abordar desde todas las aristas regulatorias para adoptar acciones que minimicen su impacto.

P-212: EL MEDIO AMBIENTE Y EL IMPACTO DE LOS DESECHOS FARMACÉUTICOS PELIGROSOS / THE ENVIRONMENT AND THE IMPACT OF THE DANGEROUS PHARMACEUTICAL RESIDUES

Tania López Alfonso¹, Daniel A. García Corté²

¹Unidad Empresarial de Base Plataforma Logística (EMCOMED), Cuba. E-mail: tania.lopez@cdsj.emcomed.cu. ²Instituto Superior de Tecnologías y Ciencias Aplicadas (InSTEC), Universidad de La Habana, Cuba.

Introducción: Los desechos peligrosos y su impacto en el medio ambiente constituyen una problemática ambiental en la Industrias Farmacéutica y Biotecnológica en los tiempos actuales. Estos desechos constituyen una amenaza para la salud humana y el medio ambiente por su alta peligrosidad y la imposibilidad de degradarse de forma espontánea. Resulta necesario la identificación, clasificación, segregación, minimización, recolección, transportación, tratamiento que se pueda dimensionar el sistema e identificar los insumos y cantidades requeridas para poder llevar a cabo un adecuado plan de manejo. En Cuba es obligatorio el cumplimiento de las leyes y normas contra la contaminación ambiental y la protección de la salud humana. El objetivo del presente trabajo ha sido establecer una gestión integrada en el tratamiento de los desechos peligrosos teniendo en cuenta el impacto al medio ambiente. **Materiales y Métodos:** El método de investigación empleado fue la matriz de marco lógico y los instrumentos utilizados la matriz de Conessa, técnicas estadísticas, PERT, correlación, pruebas paramétricas, tablas de contingencia, distribución de frecuencias, bases de datos, observación, encuesta, entrevistas, Matriz DAFO, confección de fichas de costo, cálculo de probabilidades dándole validez, relevancia de los métodos y procedimiento empleados. **Resultados:** Los resultados obtenidos corroboraron que la gestión integrada en el tratamiento de los desechos peligrosos, asegura la disminución del impacto de los mismos y sus contaminantes al medio ambiente y la minimización de los riesgos a la salud humana. **Conclusiones:** Además, se determinaron los métodos de tratamiento de los desechos peligrosos menos costosos a partir de las características de cada desecho para su manejo.

P-213: CAPACIDAD BIODEGRADATIVA DE LAS ENZIMAS LIGNINOLÍTICAS: SU APLICACIÓN PARA LA REMEDIACIÓN DE ECOSISTEMAS CONTAMINADOS / BIODEGRADATIVE CAPACITY OF LIGNINOLYTIC ENZYMES: ITS APPLICATION FOR THE REMEDY OF CONTAMINATED ECOSYSTEMS

Lucía Laura Ledo Alonso, Giselle Torres Farradá

Laboratorio de Biotecnología, Departamento de Microbiología y Virología, Facultad de Biología, Universidad de La Habana, Cuba. E-mail: gisellelf@fbio.uh.cu

Introducción: La contaminación ambiental es uno de los principales problemas de la actualidad. El desarrollo industrial ha propiciado la liberación al ambiente de grandes cantidades de compuestos químicos altamente tóxicos y difíciles de degradar. El empleo de métodos enzimáticos para la biorremediación de áreas contaminadas es una estrategia económica y promisoría. Los Hongos de la Podredumbre Blanca son los principales productores de enzimas oxidativas extracelulares con capacidad de transformar contaminantes complejos. En este sentido el potencial biotecnológico de las cepas del género *Ganoderma* permanece inexplorada. Torres-Farradá et al., (2017) determinó la diversidad de genes que codifican enzimas ligninolíticas en cepas nativas del género *Ganoderma* aisladas en Cuba. De cualquier forma, para una futura aplicación biotecnológica es indispensable determinar la estabilidad de las mismas frente un amplio rango de factores abióticos. El objetivo de este trabajo fue caracterizar el extracto crudo enzimático producido por tres cepas *Ganoderma* capaces de degradar compuestos xenobióticos. **Materiales y Métodos:** Las cepas fueron sembradas en medio SB y los extractos enzimáticos fueron obtenidos a los cuatro días de incubación. La estabilidad de la enzima lacasa se determinó bajo varias condiciones de temperatura, pH y salinidad. **Resultados:** Los resultados mostraron que las enzimas lacasa producidas por las tres cepas resultaron estables por una semana a pH básico y ligeramente ácido, temperatura de 35 °C y un amplio rango de concentraciones de diversas sales. **Conclusiones:** Esto hace posible el tratamiento enzimático de efluentes industriales o la biorremediación de ecosistemas con estas características.

P-214: PAPEL DE LOS GRUPOS DE AMINA DE SUPERFICIE EN LA ADSORCIÓN DE CLORDECONA Y β -HEXAFLOROCICLOHEXANO POR EL CARBÓN ACTIVADO: ESTUDIO TEÓRICO / ROLE OF AMINE SURFACE GROUPS IN CHLORDECONE AND β -HEXACHLOROCYCLOHEXANE ADSORPTION BY ACTIVATED CARBON: THEORETICAL STUDY

Chayan Carmenate-Rodríguez¹, Kenia Melchor-Rodríguez¹, Juan J. Gamboa Carballo¹, Naddy Passe-Coutrin², Sarra Gaspard², Ulises J. Jáuregui-Haza^{1,3}

¹Instituto Superior de Tecnologías y Ciencias Aplicadas, Universidad de La Habana, Cuba. E-mail: ccarmenate@instec.cu. ²Laboratoire COVACHIM M2E, EA 3592, Université des Antilles, Pointe à Pitre Cedex, Guadeloupe. ³Instituto Tecnológico de Santo Domingo, Santo Domingo, República Dominicana.

Introduction: Chlordecone (CLD) and hexachlorocyclohexane (HCH) are synthetic organochlorine compounds classified as persistent organic pollutants by the Stockholm Convention. When the technical HCH is used, β -hexachlorocyclohexane (β -HCH) is the most persistent isomer. Due to the persistence of these pollutants in the environment, the drinking water production plants have been equipped with filters of activated carbon (AC). In the present work, a theoretical study to evaluate the interaction between CLD and β -HCH with basic surface groups (SG) of AC, considering pH and hydration effect, was done, in order to better understand the adsorption process. **Materials and Methods:** Coronene was selected as AC model for the simulation of pesticides interaction with basic functional groups (primary, secondary and tertiary amine) attached to the edge of the coronene. Energetic and geometrical aspects of the interactions between CLD and β -HCH with SG on AC are analyzed by Multiple Minima Hypersurface methodology (MMH) using the semi-empirical Hamiltonian PM7. Furthermore, 16 distinctive structures obtained by MMH were re-optimized by Density Functional Theory, using the functional M06-2X and more rigorous characterization was made by Quantum Theory of Atoms in Molecules. **Results:** As results, a greater association of both pesticides with the primary amine in comparison with the others, in the absence and presence of water molecules, was observed. Moreover, it was observed a weak association of the pollutants with the basic SGs. **Conclusion:** The interactions have dispersive nature between the chlorine atoms of the pesticides and the π -cloud of the functionalized coronene, evidencing a mechanism of physisorption of both pollutants in the basic ACs.

