

**Estudio quimiotopológico de 25 herbicidas químicos regulados por el Instituto Colombiano
Agropecuario**

Brayan Armando Rodríguez Blanco

**Trabajo de grado para obtener el título de
Magister en Ciencias y Tecnologías Ambientales**

Directores del Proyecto:

Mario Barón Rodríguez, Qco. - Doctor en Química

Emilbus Azelleb Uribe Guerrero, Qca. – Doctora en Química

**Universidad Santo Tomás, Bucaramanga
División de Ingenierías y Arquitectura
Maestría en Ciencias y Tecnologías Ambientales
Bucaramanga
2021**

Dedicatoria.

Esta ardua investigación la dedico a Dios y al Señor Jesucristo Rey de universo en primer lugar, por darme la oportunidad de estudiar, las fuerzas y la sabiduría para poder completar este proyecto; aun en momentos en los cuales tuve tropiezos y caídas con proyectos anteriores, pero su mano salvadora siempre estuvo allí apoyándome con milagros constantes, en medio de varias dificultades, hasta lograr este objetivo. También quería dedicarle este proyecto a mi madre Alcira Blanco Páez. Por su gran sacrificio económico y su gran corazón lleno de amor hacia mí, que la llevo a poder regalarme esta oportunidad de estudiar esta maestría en Ciencias y tecnologías ambientales y brindarme la oportunidad de poder crecer profesionalmente, y darme su apoyo moral en todo momento. A mi padre Armando Rodríguez Barrios por todo su apoyo constante e incondicional, su colaboración, motivación y que siempre me dio ánimo para creer en mí. A mi abuela Beatriz Barrios porque con su cariño, amor y atenciones hicieron más fáciles mis viajes a estudiar. A mi Hermana Dayanna Carolina Rodríguez Blanco, que siempre se ha sentido orgullosa de mí. Finalmente le dedico esta investigación a mi esposa Jackeline Lizarazo Navarro que siempre estuvo a mi lado apoyándome emocionalmente, aun cuando tuve deseos de retirarme o renunciar, por las dificultades que pasé durante mi tiempo de estudio. Pero con todo su amor, colaboración, logística en el hogar y su gran psicología empírica, contribuyo en gran manera a poder completar esta investigación.

Agradecimientos.

Quisiera agradecer con el mayor cariño PhD en Química Mario Barón Rodríguez, porque más que mi profesor o director de tesis, fue mi padre académico y nunca me desechó o me dejó tirado a pesar de fracasar en 2 proyectos anteriores. Me busco una nueva investigación a la medida de una persona que se encontraba lejos de la ciudad o capital, en territorios rurales con dificultades de electricidad, conectividad y sin ningún laboratorio cercano para hacer pruebas. Pero este gran director, padre académico y profesor, siempre me tuvo presente como un hijo y nunca me abandonó. Me sentí orgulloso de ser su estudiante y de que él fuese mi guía. Esta investigación no habría sido posible sin su apoyo incondicional y su paciencia, y le deseo las mayores bendiciones a él y su familia.

También quisiera agradecer a mi madre científica PhD en Química científica Emilbuz Azelleb Uribe Guerrero, que me enseñó el mundo de la quimiología. Una ciencia mixta nueva para mí y quizás para muchos que no lo han escuchado nombrar. Gracias por su paciencia, por sus correcciones, por su dureza cuando tuvo que imponerse para buscar lo mejor de mí, gracias por el apoyo incondicional y por sacrificar hasta sus horarios de descanso. Siempre me sentí orgulloso de trabajar con una experta científica como usted y le agradezco la oportunidad que me brindó y la confianza que depositó en mí para sacar esta investigación adelante. Dios la bendiga siempre.

Finalmente le agradezco mis primas Leidy Blanco Zúñiga, Lilian Villamizar Blanco y Andrea Villamizar Blanco, quienes durante la época de clases de Maestría me brindaron posada en sus hogares, para poder continuar con mis estudios. Dios les bendiga todo su apoyo y su hospitalidad.

Contenido

	Pág.
Introducción.....	18
1. Objetivos.....	21
1.1 Objetivo General.....	21
1.2 Objetivos Específicos.....	21
2. Marco referencial.....	22
2.1 Marco Teórico.....	22
2.1.1 Herbicidas.....	22
2.1.2 Quimiotopología.....	29
2.2 Marco de Antecedentes.....	42
2.2.1 La conjetura de Villaveces.....	42
2.2.2 Correlaciones geométricas y electrónicas de estructura / función en enzimas de hierro.....	42
2.2.3 Clasificación numérica de los elementos químicos y su relación con el sistema periódico.....	43
2.2.4 Estudio topológico del sistema periódico (Quimiotopología)	43
2.2.5 Un nuevo método para estudiar el sistema periódico basado en la red neuronal de Kohonen.....	44
2.2.6 Quimiotopología de las interacciones entre elementos del cuarto período y el hidrógeno, estructura y enlace químico.....	45
2.2.7. Un estudio en red de elementos químicos: de compuestos binarios a tendencias químicas.....	46
2.2.8 Un estudio quimiotopológico DFT sobre los óxidos de metales de transición 3d y los complejos de oxígeno.....	46
2.2.9 Estudio teórico y quimiotopológico de sustancias químicas TMO _n (TM= Sc-Zn y n= 1-4).....	47

3.Método.....	48
3.1 Selección de los objetos (sustancias químicas) de estudio.....	48
3.2 Definición de cada una de las sustancias químicas (herbicidas) por sus propiedades, que para este caso fueron 24 propiedades entre teóricas y experimentales.....	49
3.3 Normalización de la matriz de datos 25 x 24.....	50
3.4 Análisis de agrupamiento con la matriz de datos normalizada.....	50
3.5 Extracción de agrupamientos del dendrograma (base topológica), selección de subconjuntos y determinación de las propiedades clausura, frontera e interior de los subconjuntos.....	51
4.Alcance.....	53
5. Resultados.....	53
5.1 Análisis de las propiedades topológicas del subconjunto A.....	54
5.2 Análisis de las propiedades topológicas del subconjunto B.....	55
5.3 Análisis de las propiedades topológicas del subconjunto C.....	56
6.Conclusiones.....	57
Referencias Bibliográficas.....	58
Apéndices.....	70

Lista de tablas

	Pág.
Tabla 1. <i>Número de herbicidas por grupos que han surgido de los toxóforo</i>	22
Tabla 2. <i>Categoría toxicológica de los herbicidas</i>	23
Tabla 3. <i>Propiedades fisicoquímicas y ambientales de los herbicidas</i>	28
Tabla 4. <i>Algunas metodologías de agrupamiento</i>	34
Tabla 5. <i>Conjunto de herbicidas seleccionado para el estudio quimiotopológico</i>	48
Tabla 6. <i>Propiedades fisicoquímicas y toxicológicas de los 25 herbicidas seleccionados</i>	49
Tabla 7. <i>Principales funciones de similitud y métodos de agrupamiento, utilizados en análisis de conglomerados</i>	51

Lista de figuras

	Pág.
Figura 1. <i>Tipos de herbicidas selectivos</i>	23
Figura 2. <i>Tipos de herbicidas no selectivos</i>	24
Figura 3. <i>Tipos de herbicidas por época de aplicación</i>	24
Figura 4. <i>Tipos de herbicidas por grupos químicos</i>	25
Figura 5. <i>Tipos de herbicidas por sitio o modo de acción</i>	25
Figura 6. <i>Grupos de clasificación de herbicidas según HRAC 2020</i>	26
Figura 7. <i>Subconjunto de herbicidas que intervienen en el metabolismo celular de malezas</i>	27
Figura 8. <i>Dos métricas de Minkowski: a) Hamming y b) euclidiana</i>	31
Figura 9. <i>Matriz de distancias</i>	33
Figura 10. <i>Árbol de clasificación o Dendrograma</i>	35
Figura 11. <i>a) Árbol consensual y b) dendrograma en los que se indica los tipos de vértices</i>	36
Figura 12. <i>a) Árbol acíclicos y b) grafo inconexo c) grafo cíclico</i>	36
Figura 13. <i>Determinación del conjunto clausura (b), frontera (c) e interior (d) de un subconjunto del conjunto total de los objetos</i>	41
Figura 14. <i>Conjunto Q y subconjuntos A, B, C</i>	52
Figura 15. <i>Base topológica obtenida con obtenida con la función de similitud euclidiana y la metodología de agrupamiento Ward</i>	53

Lista de ecuaciones

	Pág.
Ecuación 1. <i>Homogeneización de propiedades</i>	30
Ecuación 2. <i>Métrica de Minkowski</i>	31
Ecuación 3. <i>Función coseno (medida de similitud)</i>	32
Ecuación 4. <i>Fórmula Lance Williams</i>	34
Ecuación 5. <i>Número de selección</i>	38

Lista de apéndices

	Pág.
Apéndice 1. <i>Grupos químicos de herbicidas y sus puntos de acción.....</i>	70
Apéndice 2. <i>Familia química de herbicidas.</i>	71
Apéndice 3. <i>Dendrograma con Medida de similitud Euclidiana y Método de agrupamiento Centroide.....</i>	72
Apéndice 4. <i>Cortes en dendrograma con Medida de similitud Euclidiana y Método de agrupamiento Centroide.....</i>	73
Apéndice 5. <i>Determinación del número de selección S en dendrograma con Medida de similitud Euclidiana y Método de agrupamiento Centroide.....</i>	74
Apéndice 6. <i>Dendrograma con Medida de similitud Euclidiana y Método de agrupamiento Mediana.....</i>	75
Apéndice 7. <i>Cortes en dendrograma con Medida de similitud Euclidiana y Método de agrupamiento Mediana.....</i>	76
Apéndice 8. <i>Determinación del número de selección S en dendrograma con Medida de similitud Euclidiana y Método de agrupamiento Mediana.....</i>	77
Apéndice 9. <i>Dendrograma con Medida de similitud Euclidiana y Método de agrupamiento Ward.....</i>	78
Apéndice 10. <i>Cortes en dendrograma con Medida de similitud Euclidiana y Método de agrupamiento Ward.....</i>	79
Apéndice 11. <i>Determinación del número de selección S en dendrograma con Medida de similitud Euclidiana y Método de agrupamiento Ward.....</i>	80
Apéndice 12. <i>Dendrograma con Medida de similitud Euclidiana y Método de agrupamiento Vecino más lejano.....</i>	81
Apéndice 13. <i>Cortes en dendrograma con Medida de similitud Euclidiana y Método de agrupamiento Vecino más lejano.....</i>	82
Apéndice 14. <i>Determinación del número de selección S en dendrograma con Medida de similitud Euclidiana y Método de agrupamiento Vecino más lejano.....</i>	83
Apéndice 15. <i>Dendrograma con Medida de similitud Minkowski y Método de agrupamiento Centroide.....</i>	84

Apéndice 16. Cortes en dendrograma con Medida de similitud Minkowski y Método de agrupamiento Centroide.....	85
Apéndice 17. Determinación del número de selección S en dendrograma con Medida de similitud Minkowski y Método de agrupamiento Centroide.....	86
Apéndice 18. Dendrograma con Medida de similitud Minkowski y Método de agrupamiento Mediana.....	87
Apéndice 19. Cortes en dendrograma con Medida de similitud Minkowski y Método de agrupamiento Mediana.....	88
Apéndice 20. Determinación del número de selección S en dendrograma con Medida de similitud Minkowski y Método de agrupamiento Mediana.....	89
Apéndice 21. Dendrograma con Medida de similitud Minkowski y Método de agrupamiento Ward.....	90
Apéndice 22. Cortes en dendrograma con Medida de similitud Minkowski y Método de agrupamiento Ward.....	91
Apéndice 23. Determinación del número de selección S en dendrograma con Medida de similitud Minkowski y Método de agrupamiento Ward.....	92
Apéndice 24. Dendrograma con Medida de similitud Minkowski y Método de agrupamiento Vecino más lejano.....	93
Apéndice 25. Cortes en dendrograma con Medida de similitud Minkowski y Método de agrupamiento Vecino más lejano.....	94
Apéndice 26. Determinación del número de selección S en dendrograma con Medida de similitud Minkowski y Método de agrupamiento Vecino más lejano.....	95
Apéndice 27. Dendrograma con Medida de similitud Coseno y Método de agrupamiento Centroide.....	96
Apéndice 28. Cortes en dendrograma con Medida de similitud Coseno y Método de agrupamiento Centroide.....	97
Apéndice 29. Determinación del número de selección S en dendrograma con Medida de similitud Coseno y Método de agrupamiento Centroide.....	98
Apéndice 30. Dendrograma con Medida de similitud Coseno y Método de agrupamiento Mediana.....	99

Apéndice 31. <i>Cortes en dendrograma con Medida de similitud Coseno y Método de agrupamiento Mediana.....</i>	100
Apéndice 32. <i>Determinación del número de selección S en dendrograma con Medida de similitud Coseno y Método de agrupamiento Mediana.....</i>	101
Apéndice 33. <i>Dendrograma con Medida de similitud Coseno y Método de agrupamiento Ward.....</i>	102
Apéndice 34. <i>Cortes en dendrograma con Medida de similitud Coseno y Método de agrupamiento Ward.....</i>	103
Apéndice 35. <i>Determinación del número de selección S en dendrograma con Medida de similitud Coseno y Método de agrupamiento Ward.....</i>	104
Apéndice 36. <i>Dendrograma con Medida de similitud Coseno y Método de agrupamiento Vecino más lejano.....</i>	105
Apéndice 37. <i>Cortes en dendrograma con Medida de similitud Coseno y Método de agrupamiento Vecino más lejano.....</i>	106
Apéndice 38. <i>Determinación del número de selección S en dendrograma con Medida de similitud Coseno y Método de agrupamiento Vecino más lejano.....</i>	107
Apéndice 39. <i>Matriz de datos de propiedades fisicoquímicas de herbicidas seleccionados</i>	108
Apéndice 40. <i>Matriz de datos de propiedades fisicoquímicas normalizadas de herbicidas seleccionados.....</i>	152
Apéndice 41. <i>Referencias bibliográficas de la matriz de datos de propiedades fisicoquímicas de herbicidas seleccionados.....</i>	170

Resumen

Se encontraron relaciones de similitud entre herbicidas utilizados por los agricultores colombianos que son regulados por el Instituto Colombiano Agropecuario – ICA. Se seleccionaron 25 herbicidas definidos cada uno por 24 propiedades fisicoquímicas. Se realizaron 12 análisis de agrupamientos basados en un tratamiento de datos normalizados, que utilizó cuatro (4) metodologías de agrupamiento (Centroide, Mediana, Ward y Vecino más lejano) y 3 funciones de similitud (Euclidiana, Minkowski y Coseno). Se seleccionó un dendrograma, de los 12 obtenidos, y se tuvo en cuenta, que los resultados obtenidos en todos los dendrogramas son similares. Específicamente se seleccionó el obtenido con la función de similitud Euclidiana y metodología de agrupamiento Ward. Se estudiaron los conjuntos clausura, frontera e interior de diferentes subconjuntos seleccionados, y se tuvo en cuenta las clasificaciones previas obtenidas de la literatura para estos herbicidas. Como resultado se corroboraron relaciones de similitud reportadas previamente en estudios experimentales y también se encontró relación entre el glifosato y el glufosinato. Es importante destacar que este es un estudio teórico que reproduce resultados experimentales previos.

Palabras clave: Quimiotopología, Química matemática, Química ambiental, Herbicidas, Analisis de agrupamientos

Abstract

Similarity relationships were found between herbicides used by Colombian farmers that are regulated by the Instituto Colombiano Agropecuario - ICA. 25 herbicides were selected each defined by 24 physicochemical properties. Twelve cluster analyzes were performed based on a normalized data treatment, which used four (4) clustering methodologies (Centroid, Median, Ward, and Farthest Neighbor) and 3 similarity functions (Euclidean, Minkowski, and Cosine). One dendrogram was selected from the 12 obtained, and it was taken into account that the results obtained in all the dendrograms are similar. Specifically, the one obtained with the Euclidean similarity function and Ward grouping methodology was selected. The closure, border and interior sets of different selected subsets were studied, and the previous classifications obtained from the literature for these herbicides were taken into account. As a result, similarity relationships previously reported in experimental studies were corroborated, and a relationship was also found between glyphosate and glufosinate. It is important to note that this is a theoretical study that reproduces previous experimental results.

Keywords: Chemotopology, Mathematical chemistry, Enviromental chemistry, Herbicides, Cluster analysis

Siglas, Símbolos, Acrónimos y Abreviaturas

°C:	Grado Celsius
atm*m³/mol:	Atmósfera por metro cúbico sobre mol
BCF:	Factor de bioconcentración
C*m²/V:	Coulomb por metro cuadrado sobre voltio
Debye:	Unidad CGS del momento dipolar eléctrico
DL₅₀:	Dosis letal media
g/ml:	Gramos por mililitro
g/mol:	Gramos por mol
ha:	Hectárea
K:	Kelvin
kcal/mol:	Kilocaloría por mol
kcal/mol-K:	Kilocaloría por mol Kelvin
kg:	Kilogramo
KOA:	Coefficiente de partición octanol aire

L:	Litro
Log KOC:	Coefficiente de Adsorción de carbono orgánico
Log KOW:	Coefficiente de partición de octanol agua
mg/kg:	Miligramo por kilogramo
n:	Índice de refracción
Pa*m³/mol:	Pascal por metro cúbico sobre mol
Pa:	Pascal
pKa:	Constante de disociación
α:	Polaridad alfa

Glosario.

Análisis agrupamientos: Conjunto de técnicas cuyo objetivo es la búsqueda de grupos lo más homogéneos posible, formados por individuos con características o por variables comunes (S. M. Fernández, 2001).

Conjunto: Colección de elementos perfectamente definidos, que pueden tener una o más características en común, y sobre la cual puede establecerse con certeza lo que pertenece a él y lo que no (Arellano y Monroy, 2006). Para el caso de este trabajo de investigación los elementos son las sustancias químicas o herbicidas.

Dendrograma: Tipo de representación gráfica o diagrama de datos en forma de árbol, que organiza los datos en subcategorías, que luego se dividen en otras hasta llegar al nivel de detalle deseado. Este tipo de representación permite apreciar claramente las relaciones de agrupación entre los datos e incluso entre grupos de ellos, aunque no permite apreciar las relaciones de similitud o cercanía entre categorías (Galindo-Domínguez, 2020).

Quimiometría: Disciplina metrológica que aplica conocimientos matemáticos, especialmente estadísticos, a procesos y compuestos químicos, para extraer de los datos teórico-experimentales la mayor cantidad posible de información y extender el conocimiento de los sistemas químicos (C. M. Fernández, 2011).

Topología: Rama de las matemáticas que estudia las deformaciones continuas de objetos geométricos. Entre sus propósitos está clasificar los objetos o al menos dar métodos para distinguir entre objetos que son homeomorfos (Objetos que no pueden obtenerse uno del otro a través de una deformación continua) (De Castro, 2018).

Introducción

Los herbicidas son sustancias químicas utilizadas para el control de plantas no deseadas en los cultivos (Anzalone, 2007). Sin embargo, su constante aplicación en la agricultura ha generado diversos impactos ambientales como el deterioro de la calidad del agua, aire y suelo, así mismo, impactos biológicos como las afectaciones a la salud humana y la reducción de especies nativas de fauna y flora (FAO, 2004; Labrada et al., 1996; Nations, 2007). Por consiguiente, es necesario desarrollar estrategias para conocer rápidamente compuestos sustitutos a herbicidas con altos impactos ambientales. Al tener en cuenta esta necesidad, la presente investigación se enfocó en encontrar si existen relaciones de similitud entre diferentes herbicidas utilizados en la agricultura colombiana, regulados por el Instituto Colombiano Agropecuario – ICA, y de esta forma confirmar la presencia o no de grupos robustos de herbicidas. Para este fin, se construyó una matriz de datos de 24 propiedades fisicoquímicas, experimentales y teóricas (la categoría toxicológica, el coeficiente de adsorción de carbono orgánico, la solubilidad en agua, el momento dipolar y la capacidad calorífica, entre otras), para cada uno de los 25 herbicidas seleccionados. Los datos experimentales se extrajeron de diferentes bases de datos (CHEMSPIDER, PUBCHEM, ChEMBL, entre otras). Los datos teóricos se calcularon a partir del diseño de la representación molecular de los herbicidas y su determinación con el grupo de funciones base BPW91/DGDZVP en programa Gaussian 09. Las propiedades se normalizaron, para reducir la influencia de datos atípicos debido a la varianza, y posteriormente se desarrollaron 12 análisis de agrupamiento con la aplicación del software SPSS. Para el tratamiento de los datos se utilizaron cuatro (4) metodologías de agrupamiento (Centroide, Mediana, Ward y Vecino más lejano) y tres (3) funciones de similitud (Euclidiana, Minkowski y Coseno) (Restrepo, 2005, 2013a, 2013b; Uribe

Guerrero, 2011). Se seleccionó uno de los 12 dendrogramas y se tuvo en cuenta que en su gran mayoría los agrupamientos eran los mismos en todos los dendrogramas. Adicionalmente, se seleccionaron 3 subconjuntos y se tuvo en cuenta la clasificación de estos herbicidas en la literatura. Estos subconjuntos fueron etiquetados con las letras A, B y C y con estos, y con la base topológica del dendrograma seleccionado se estudiaron los conjuntos frontera, interior y clausura. Como resultado se encontró que el Glifosato y el Glufosinato solo presentan similitud entre ellos; así este estudio mostró que estos herbicidas discrepan topológicamente respecto a otros contemplados en el conjunto A. Este resultado concuerda con estudios experimentales previos, donde sólo se sugiere el reemplazo del Glufosinato por Glifosato (Cook et al., 2010; Culpepper et al., 2009; Striegel et al., 2020) y apoya los estudios realizados en 2016 por la policía nacional colombiana; donde se sugieren el reemplazo del Glifosato por Glufosinato (Mejía & Agudelo-Londoño, 2019; Méndez, 2018). Adicionalmente, el conjunto B obtenido con el análisis quimiopológico muestra la relación de la Pendimetalina, el Quinclorac y el Propanil, la cual ha sido previamente estudiada de manera experimental y como resultado se propone el reemplazo del Propanil por la Pendimetalina y el Quinclorac que son herbicidas menos tóxicos (Riches et al., 1997). Por último, se encontraron relaciones entre el Diuron, la Atrazina, la Metribuzina y el Norflurazon, que también fueron estudiados experimentalmente y se sugirió el reemplazo del Diuron, la Atrazina o la Metribuzina por el Norflurazon (Giry & Ayele, 1998).

Finalmente, es importante resaltar que este estudio quimiopológico encontró relaciones entre los herbicidas seleccionados de tipo presiembra y postsiembra o los clasificados como sistémicos y de contacto lo que permite inferir que no existe conjuntos robustos de herbicidas, es decir, que no existen conjuntos bien definidos de herbicidas sino que los herbicidas se relacionan

unos con otros. Este resultado es importantísimo desde el punto de vista del análisis de las sustancias químicas como un todo y no de una por una.

1. Objetivos

1.1 Objetivo General

Determinar relaciones de similitud entre herbicidas usados en la agroindustria colombiana; mediante un estudio quimiotopológico de 24 propiedades fisicoquímicas de 25 herbicidas, regulados por el Instituto Colombiano Agropecuario – ICA.

1.2 Objetivos Específicos

- Determinar teóricamente propiedades moleculares; como momento dipolar (Debye), energía total (kcal/Mol), energía térmica (kcal/mol), capacidad calorífica (kcal/mol-K), entropía (kcal/mol-k), polaridad alfa α ($C \cdot m^2/V$), de 25 herbicidas, regulados por el Instituto Colombiano Agropecuario – ICA, mediante múltiples simulaciones de mecánica cuántica de representaciones de los compuestos evaluados.
- Identificar en artículos científicos, bases de datos y fichas técnicas de fabricantes de insumos agrícolas, propiedades fisicoquímicas y toxicológicas más relevantes de los 25 herbicidas seleccionados.
- Analizar las asociaciones quimiotopológicas obtenidas de los 25 herbicidas investigados con estudios experimentales reportados en la literatura, para proponer este procedimiento como sustituto computacional de obtención de relaciones de similitud entre los compuestos tipo herbicidas.

2. Marco referencial

2.1 Marco Teórico

2.1.1 Herbicidas.

Son sustancias utilizadas principalmente en agricultura para controlar el desarrollo de malezas y evitar incrementos en el costo de producción de los cultivos (Botello, 2005).

2.1.1.2 Clasificación de los herbicidas. Los herbicidas se pueden clasificar así:

2.1.1.2.1 Grupos toxóforos. Parry en 1989 indicó que los herbicidas se pueden clasificar por medio de la sección de la molécula con propiedad tóxica (Tabla 1) (Parry, 1989).

Tabla 1. Número de herbicidas por grupo toxóforo

Descubrimiento del primer herbicida del grupo	Grupo de herbicidas	Número de herbicidas del grupo
1945	fenoxiacéticos	17
1954	carbamatos	16
1956	triazinas	29
1965	dinitroanilinas	22
1970	difeniléteres	29
1980	sulfonilureas	16

2.1.1.2.2 Categoría toxicológica. Esta caracterización propone que los herbicidas se pueden clasificar por medio de su nivel de toxicidad DL₅₀ en mamíferos; como las ratas de forma oral, dérmica o por inhalación (Correa, 2011; Labrada et al., 1996; Worthing & Hance, 1991), así (Tabla 2):

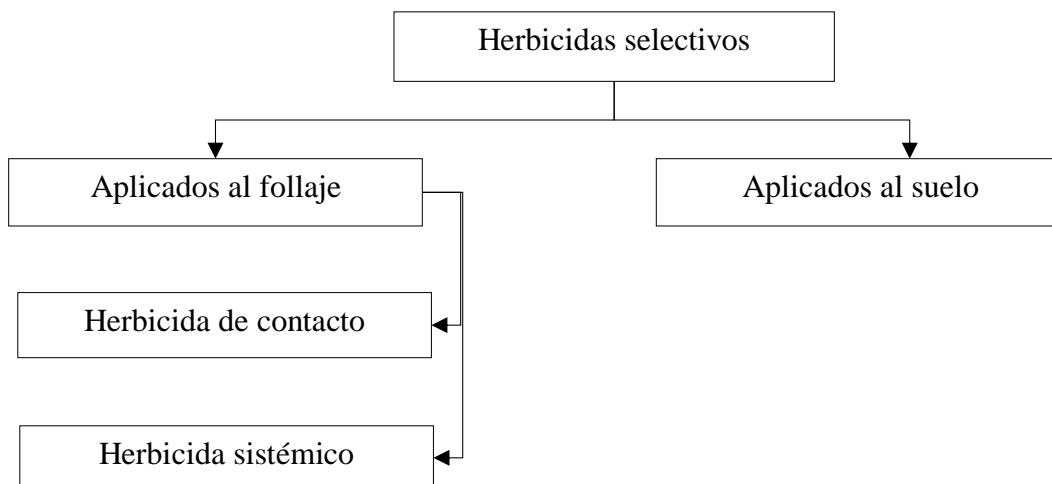
Tabla 2. Categoría toxicológica de los herbicidas

Categoría	DL ₅₀ en ratas		
	Oral (mg/kg)	Dérmica (mg/kg)	Inhalación (mg/l)
I - Altamente tóxico	< 50	< 200	0,05
II - Moderadamente tóxico	50 - 500	200 - 2000	0,05 - < 0,5
III - Ligeramente tóxico	500 - 5000	2000 - 5000	0,5 - 2
IV - Prácticamente no tóxico	> 5000	> 5000	> 2

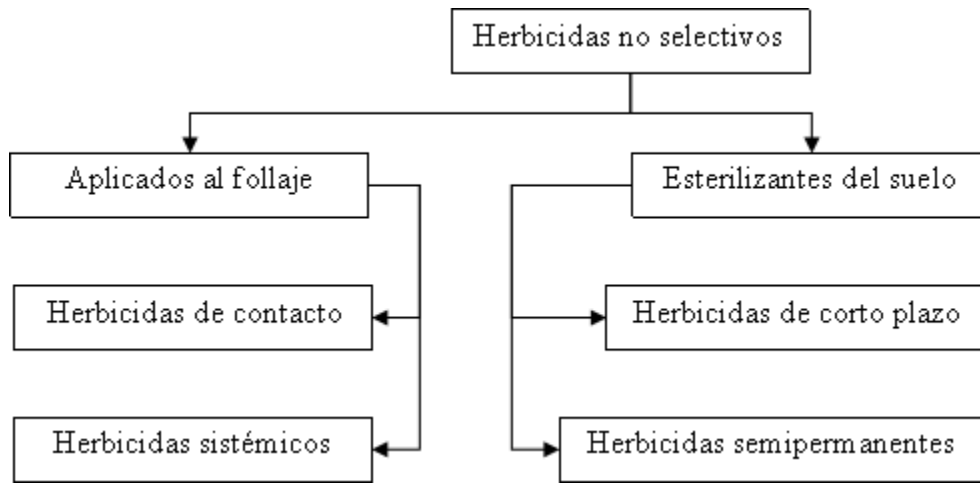
2.1.1.2.3 Selectividad y modo de acción. Los herbicidas son clasificados en selectivos y no selectivos (J. Cárdenas et al., 1975).

- Herbicidas selectivos. Son aquellos que a ciertas dosis y formas de aplicación eliminan o inhiben el crecimiento de algunas plantas y no causan daño a otras especies vegetales (Figura 1) (J. Cárdenas et al., 1975).

- Herbicidas no selectivos. Ejercen toda su toxicidad con toda clase de vegetación con la que tienen contacto (Figura 2) (J. Cárdenas et al., 1975).

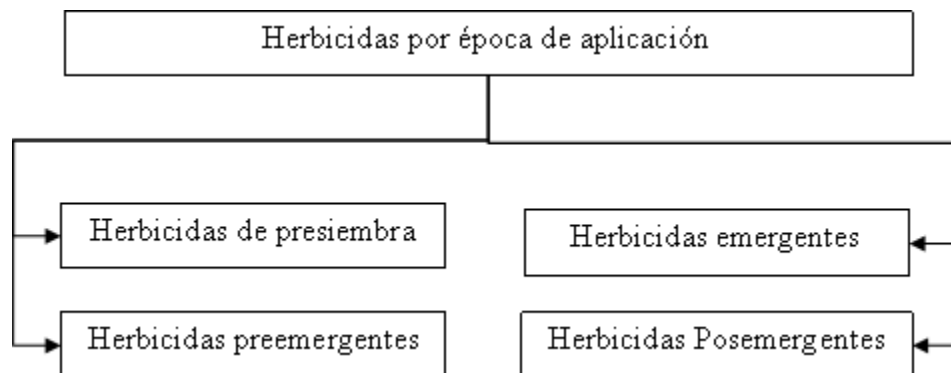
Figura 1. Tipos de herbicidas selectivos.

Adaptado de Clasificación de herbicidas (Cárdenas J, 1975).

Figura 2. *Tipos de herbicidas no selectivos.*

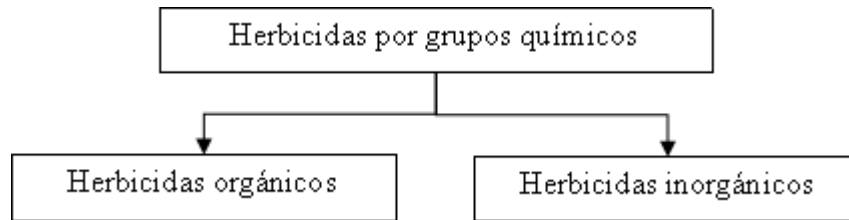
Adaptado de Clasificación de herbicidas (Cárdenas J, 1975).

2.1.1.2.4 Época de aplicación. Esta caracterización se basa en función del estado de crecimiento de las malezas y el cultivo (Figura 3) (J. Cárdenas et al., 1975).

Figura 3. *Tipos de herbicidas por época de aplicación.*

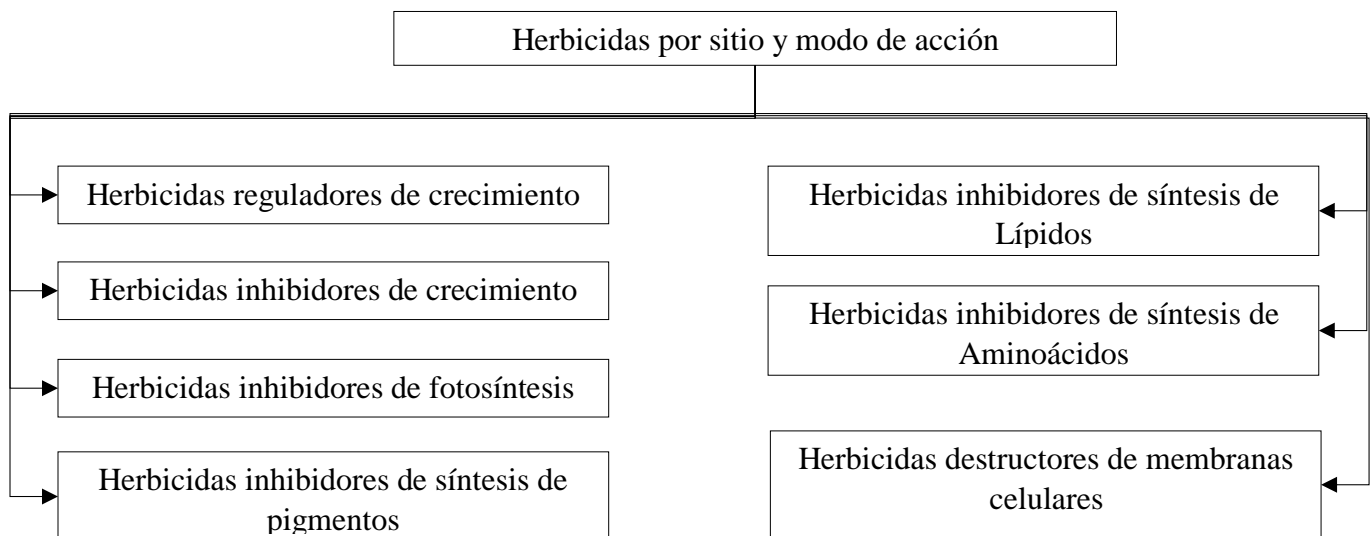
Adaptado de Clasificación de herbicidas (Cárdenas J, 1975).

2.1.1.2.5 Grupos químicos. De acuerdo a su composición química, principalmente se tiene en cuenta su grupo funcional y las variaciones que tiene su estructura química (Figura 4) (J. Cárdenas et al., 1975).

Figura 4. *Tipos de herbicidas por grupos químicos.*

Adaptado de Clasificación de herbicidas (Cárdenas J, 1975).

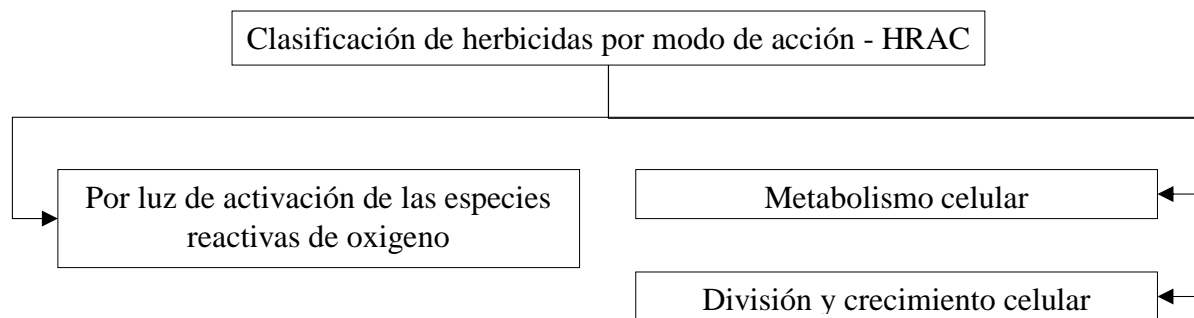
2.1.1.2.6 Sitio o modo de acción. Esta clasificación es propuesta por la Sociedad Americana de la Ciencia de la Maleza (WSSA - Weed Science Society of America) y algunos autores la catalogan como la clasificación de herbicidas más útil (Duke y Dayan, 2001; Mallory-Smith y Retzinger, 2003; Robles y de la Cruz, 2006; Schmidt, 2005) (Figura 5).

Figura 5. *Tipos de herbicidas por sitio o modo de acción.*

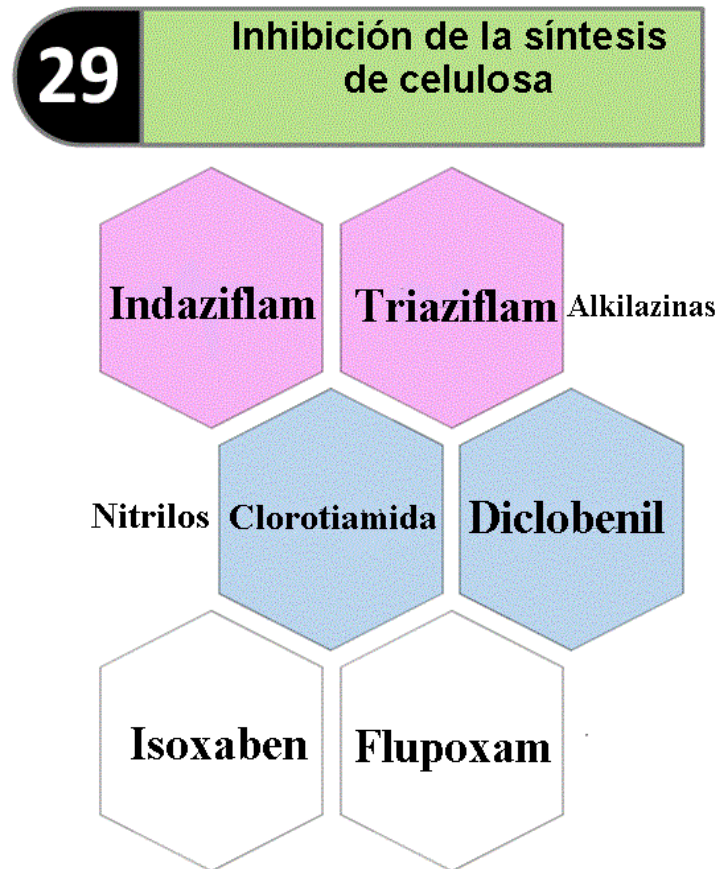
Adaptado de Clasificación de herbicidas por sitio de acción para estrategias de manejo de resistencia de malezas (Retzinger J, 1997).

2.1.1.2.7 Modo de acción HRAC. Esta caracterización (Figuras 6 y 7) es propuesta por el Comité de Acción de Resistencia a los Herbicidas (HRAC - Herbicide Resistance Action Committee). La cual propone que los herbicidas pueden ser clasificados de acuerdo a los puntos o modos de acción que tienen sobre determinada especie vegetal con la que entran en contacto; como el caso de los herbicidas inhibidores del metabolismo celular (Enrique y Ricardo, 2006; HRAC, 2020; Schmidt, 2005, 1997).

Figura 6. Grupos de clasificación de herbicidas según HRAC 2020.



Adaptado de Clasificación por modo de acción 2020 (HRAC, 2020).

Figura 7. Subconjunto de herbicidas que intervienen en el metabolismo celular de malezas.

Adaptado de Clasificación por modo de acción 2020 (HRAC, 2020).

2.1.1.3 Relaciones entre diferentes tipos de herbicidas. Existe la clasificación de herbicidas por su época de aplicación, clasificación toxicológica y por grupos toxóforos. Debido a que la dosis de herbicida se ajusta de acuerdo al tipo de suelo y la cantidad de materia orgánica presente en el área de aplicación, razón por la cual se requiere una mayor dosis en suelos arcillosos y con alto contenido de materia orgánica (Anderson, 1977).

Otra relación es la que hay entre las sustancias con la misma familia o grupo químico tienen propiedades similares y generalmente tienen el mismo modo de acción (Burnside, 1991; Mallory-Smith & Retzinger, 2003).

También, se presentan relaciones entre la clasificación de herbicidas por sitio y la caracterización por selectividad, debido a que ambos poseen modos de acción similares y producen síntomas parecidos en las plantas con las que tienen contacto (Gunsolus & Curran, 1999).

Finalmente, y producto de la revisión de la literatura es posible deducir que exista relación entre la clasificación de herbicidas por modo de acción, según HRAC, y familia química; debido a que estas sustancias intervienen en el metabolismo de las malezas y alteran su crecimiento (HRAC, 2020; Robles y de la Cruz, 2006). Sin embargo, es importante resaltar que, aunque en la literatura científica fue posible extraer algunas relaciones, no se encuentran claramente definidas.

2.1.1.4 Propiedades fisicoquímicas de los herbicidas. Las propiedades fisicoquímicas de los herbicidas más sobresalientes y que influyen en su comportamiento en el campo y su potencial de contaminación (Alfaro, 2013; ICA, 1973), se presentan a continuación en la tabla 3.

Tabla 3. *Propiedades fisicoquímicas y ambientales de los herbicidas*

Momento dipolar (Debye)	Solubilidad en agua (mg/L a 25°C)
Energía total (kcal/mol)	Presión de vapor (Pa a 25°C)
Energía térmica (kcal/mol)	coeficiente de partición de octanol agua (Log KOW)
Capacidad calorífica (kcal/mol-K)	Ley de Henry (Pa·m ³ /mol at 25°C)
Entropía (kcal/mol-K)	Factor de bioconcentración (BCF)
Polaridad α (C·m ² /V)	Vida media (Días)
Peso molecular (g/mol)	Índice de Refracción
Temperatura de fusión (K)	coeficiente de partición octanol aire (KOA)
Punto de ebullición normal (K)	Volatilización desde agua (atm·m ³ /mol)
Densidad a 298,15 K - (g/ml)	Toxicología DL ₅₀ (mg/kg) Oral - ratas - bibliografía
Constante de disociación pKa	Categoría toxicológica DL ₅₀ (mg/Kg) (según resolución 10834 de 1992)
Coeficiente de Adsorción de carbono orgánico (Log KOC)	Categoría toxicológica mayor DL ₅₀ (mg/kg) Oral Ratas - Presentación comercial - (según registro del ICA)

2.1.2 Quimiotopología.

Herramienta quimiomatemática; fusión entre quimiometría (C. M. Fernández, 2011; Sharaf et al., 1986) y topología (De Castro, 2018; Muñoz Quevedo, 2003), originada de las investigaciones químicas, que tiene aplicación en biología, taxonomía y ecotoxicología (Restrepo, 2005).

En general, es útil para agrupar los objetos de un conjunto con base en sus propiedades, donde es necesario: a) homogeneizar las propiedades, b) obtener un coeficiente de similitud, c) construir una matriz de semejanza, d) utilizar una metodología de agrupamiento, e) representar gráficamente las semejanzas entre los objetos mediante un árbol de clasificación (dendrograma) (Uribe Guerrero, 2011).

2.1.2.1 Metodología del análisis de agrupamientos.

2.1.2.1.1 Homogeneización de las propiedades. El análisis de agrupamiento hace parte de las metodologías no supervisadas de reconocimiento de patrones (Otto, 2016). Es decir, hace parte de las metodologías que no suponen relaciones a priori entre los objetos, sino que permite que los grupos se formen de acuerdo con criterios de similitud que en la mayoría de los casos son funciones de distancia (Sharaf et al., 1986; Willett et al., 1998). Por tal razón y puesto que los valores de las propiedades con las que se describen a los objetos pueden presentar diferente escala o magnitud es necesario transformar cada una de las propiedades al mismo intervalo numérico. Con este fin, se restringen los valores de las diferentes propiedades al intervalo $[0,1] \subset \mathbb{R}$ mediante la ecuación 1 (Uribe Guerrero, 2011).

Ecuación 1. *Homogeneización de propiedades.*

$$|X_{ij}| = \frac{X_{ij} - X_{imin}}{X_{imax} - X_{imin}}$$

Donde:

$|X_{ij}|$ = Valor homogeneizado

X_{ij} = Valor de la propiedad i para objetos j

X_{imin} = valor mínimo de la propiedad i

X_{imax} = Valor máximo de la propiedad i

Adaptado de Quimiotopología de las interacciones entre elementos del cuarto período y el hidrógeno. Estructura y enlace químico (Uribe Guerrero E, 2011).

2.1.2.1.2 Obtención del coeficiente de similitud. Medida de la semejanza entre los objetos y se cuantifica a través de una métrica o de funciones no métricas (Otto, 2016).

- **Métrica.** Función que define la distancia entre los objetos de un sistema. Dado un conjunto determinado, si x, y , son objetos de ese conjunto, a cada pareja (x, y) se le asigna un número real $d(x, y)$. El número $d(x, y)$ se denomina "distancia entre x e y " y cumple con las siguientes propiedades (Mendelson, 1990; Munkres, 2002).

1) $d(x, y) \geq 0$ para todos $x, y \in X$; la igualdad se da si, y sólo si, $x = y$

2) $d(x, y) = 0 \leftrightarrow x = y$

3) $d(x, y) = d(y, x)$ para todos $x, y \in X$

4) $d(x, y) + d(y, z) \geq d(x, z)$ para todos $x, y, z \in X$

Una familia de métricas en el espacio vectorial \mathfrak{R}^n , depende de un parámetro $p \in \mathfrak{R}$ es la de Minkowski, presentada en la Ecuación 2.

Ecuación 2. Métrica de Minkowski.

$$d_p(A,B) = \left[\sum_{i=1}^n |X_{iA} - X_{iB}|^p \right]^{1/p}, \text{ con } p \geq 1$$

Donde:

$d_p(A, B)$: Distancia d_p entre los objetos A y B

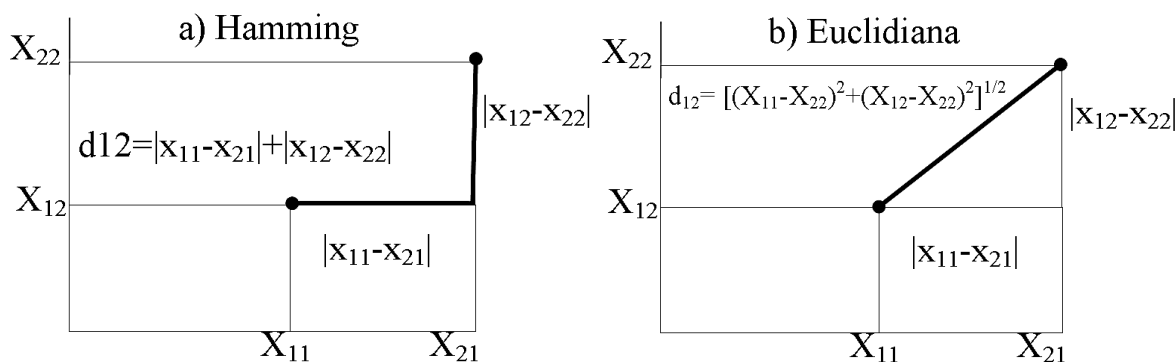
X_{iA} : la propiedad de i del objeto A

X_{iB} : la propiedad i del objeto B

Adaptado de Quimiotopología de las interacciones entre elementos del cuarto período y el hidrógeno. Estructura y enlace químico (Uribe Guerrero E, 2011).

Las métricas de Minkowski más conocidas son la distancia de Hamming, cuando p es igual a 1, y la distancia euclidiana, cuando p es igual a 2 (Otto, 2016). En la figura 8 se muestra una representación gráfica de estas métricas en un espacio bidimensional (Uribe Guerrero, 2011).

Figura 8. Dos métricas de Minkowski: a) Hamming y b) euclidiana.



Adaptado de Quimiotopología de las interacciones entre elementos del cuarto período y el hidrógeno. Estructura y enlace químico (Uribe Guerrero E, 2011).

- Funciones no métricas. Estas funciones establecen similitudes entre los elementos de un conjunto por diferentes medidas de sus propiedades. Si se considera \mathfrak{R}^n como el espacio vectorial de propiedades, entonces dos elementos serán más similares en tanto más lo sean sus

radio-vectores. De esta forma, dos elementos con radio-vector paralelo serán muy similares. El valor de la proyección de uno de los vectores sobre el otro, o el "coseno" del ángulo formado por los dos radio-vectores, será una medida de similitud conocida como función coseno (Ecuación 3) (Uribe Guerrero, 2011).

Ecuación 3. *Función coseno (medida de similitud).*

$$S(A, B) = \frac{\sum_{i=1}^n X_{iA} Y_{iB}}{\sqrt{\sum_{i=1}^n X_{iA}^2 \sum_{i=1}^n Y_{iB}^2}}$$

Adaptado de Quimiología de las interacciones entre elementos del cuarto período y el hidrógeno. Estructura y enlace químico (Uribe Guerrero E, 2011).

2.1.2.1.3 Construcción de una matriz de semejanza. Una matriz de semejanza f es un arreglo cuadrado de los valores de semejanza entre los objetos del conjunto. La dimensión $n \times n$ de la matriz está determinada por los números de objetos n . Puesto que todas las funciones de similitud empleadas son simétricas, $f(Y_1; Y_2) = f(Y_2; Y_1)$, esta matriz es simétrica, por lo que se muestra solo la información de uno de sus triángulos (Figura 9) (Uribe Guerrero, 2011).

Figura 9. *Matriz de distancias.*

	Y_1	Y_2	Y_3	Y_4	...	Y_n
Y_1	$d(Y_1, Y_1)$					
Y_2	$d(Y_2, Y_1)$	$d(Y_2, Y_2)$				
Y_3	$d(Y_3, Y_1)$	$d(Y_3, Y_2)$	$d(Y_3, Y_3)$			
Y_4	$d(Y_4, Y_1)$	$d(Y_4, Y_2)$	$d(Y_4, Y_3)$	$d(Y_4, Y_4)$		
\vdots	\vdots	\vdots	\vdots	\vdots	\ddots	
Y_n	$d(Y_n, Y_1)$	$d(Y_n, Y_2)$	$d(Y_n, Y_3)$	$d(Y_n, Y_4)$...	$d(Y_n, Y_n)$

Adaptado de Quimiología de las interacciones entre elementos del cuarto período y el hidrógeno. Estructura y enlace químico (Uribe Guerrero E, 2011).

2.1.2.1.4 Formación de agrupamientos. La matriz de similitud muestra relaciones entre parejas de objetos. Sin embargo, el interés está en ir más allá y estudiar agrupamientos de objetos (herbicidas), relaciones de similitud entre varios de ellos al mismo tiempo y formación (si es que la hay) de grupos, familias, etc. Para lograr esto es necesario usar criterios de similitud entre más de dos objetos a la vez. Para ello se han desarrollado varias metodologías de agrupamientos como: unión promedio no ponderada, unión sencilla, unión completa, unión promedio ponderada y unión centroide (Tabla 4), entre otras, las cuales se resumen en la fórmula de Lance Williams (Ecuación 4) (Otto, 2016; Uribe Guerrero, 2011).

Ecuación 4. *Fórmula Lance Williams.*

$$s(k, i) = \alpha A_s(A, i) + \alpha B_s(B, i) + \beta s(A, B) + \gamma |s(A, i) - s(B, i)|$$

Donde:

A, B e i son objetos para agrupar

K es la reunión de A y B

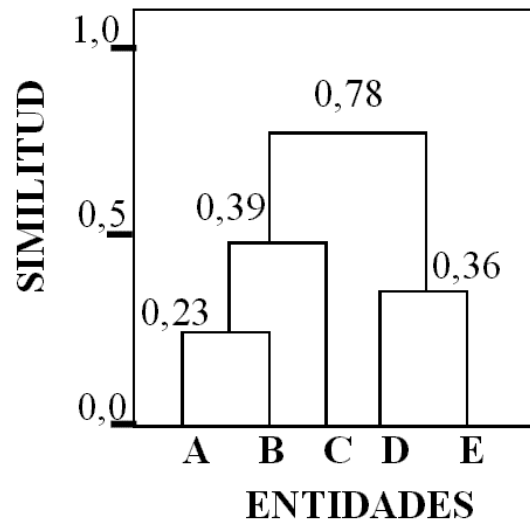
S(A, i), s(B, i) y s(A, B) son las similitudes entre A e i, B e i y A y B, respectivamente

Adaptado de Quimiología de las interacciones entre elementos del cuarto período y el hidrógeno. Estructura y enlace químico (Uribe Guerrero E, 2011).

Tabla 4. *Algunas metodologías de agrupamiento*

Metodología	α_A	α_B	β	γ
Unión promedio no ponderada	$n_A/(n_A+n_B)$	$n_B/(n_A+n_B)$	0	0
Unión sencilla	0.5	0.5	0	-0.5
Unión completa	0.5	0.5	0	0.5
Unión promedio ponderada	0.5	0.5	0	0
unión centroide	$n_A/(n_A+n_B)$	$n_B/(n_A+n_B)$	$-n_A n_B/(n_A+n_B)$	0

2.1.2.1.5 Construcción de árbol de clasificación. Una representación gráfica comúnmente utilizada para mostrar los agrupamientos de los objetos de un conjunto es la llamada árbol de clasificación. Esta representación independientemente del número de propiedades, es siempre bidimensional (Figura 10) (Leal et al., 2012; Moreno, 2000; Uribe Guerrero, 2011).

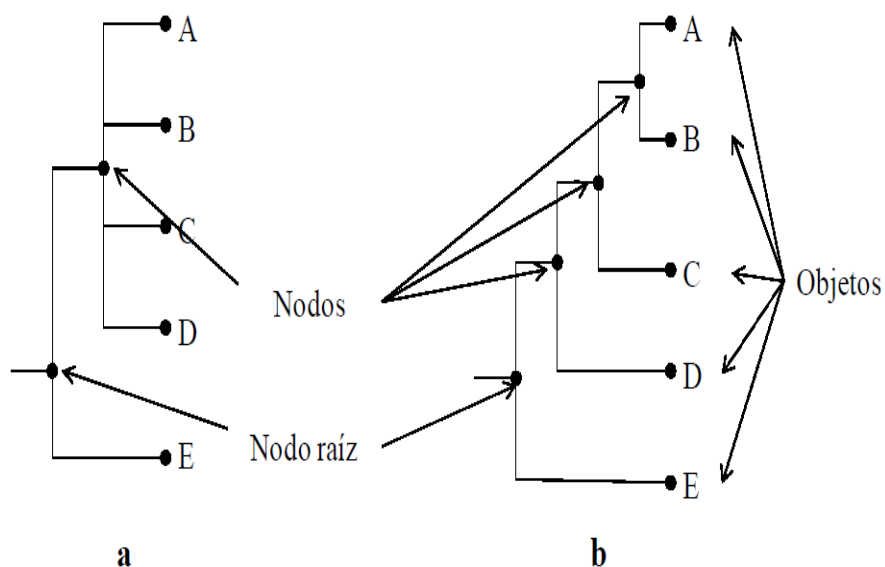
Figura 10. *Árbol de clasificación o Dendrograma.*

Adaptado de La clasificación numérica y su aplicación en la ecología (Moreno A, 2000).

En general, los árboles de clasificación pueden ser interpretados como grafos donde los puntos negros que aparecen en la figura 11 corresponden a los vértices y las líneas a las aristas. Estos grafos son conexos y acíclicos (Figura 12). una definición formal de árbol es planteada en la siguiente definición (Uribe Guerrero, 2011):

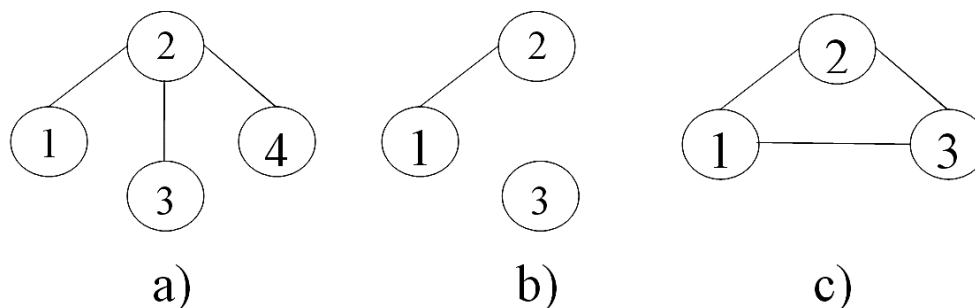
Definición 1. un árbol de clasificación es un grafo (Trudeau & Trudeau, 1993) conexo y acíclico (Freiberger, 1960) que representa las semejanzas entre un conjunto de objetos y contiene las siguientes clases de vértices (Uribe Guerrero, 2011):

1. De grado d 1 que corresponden a los objetos
2. Un único vértice de grado 2, llamado nodo raíz
3. De grado mayor o igual que 3, llamados nodos.

Figura 11. a) *Árbol consensual* y b) *dendrograma* en los que se indica los tipos de vértices.

Adaptado de Quimiotopología de las interacciones entre elementos del cuarto período y el hidrógeno. Estructura y enlace químico (Uribe Guerrero E, 2011).

Por otra parte, hay un tipo de árboles de clasificación que se conocen como dendrogramas. Un dendrograma es un árbol con vértices de grado menor a 4. De esta forma se hace evidente que todo el dendrograma es un árbol (Penny y Hendy, 1985), pero no lo contrario (Figura 12) (Uribe Guerrero, 2011).

Figura 12. a) *Árbol acíclicos* y b) *grafo inconexo* c) *grafo cíclico*.

Adaptado de Quimiotopología de las interacciones entre elementos del cuarto período y el hidrógeno. Estructura y enlace químico (Uribe Guerrero E, 2011).

2.1.2.2 Topología. Es el estudio de las relaciones matemáticas que existen entre puntos u objetos de un espacio n-dimensional (Arnold, 2011; Bonchev & Rouvray, 1999). Esta rama de las matemáticas ha sido aplicada por varios investigadores; para estudiar las relaciones de similitud entre elementos y compuesto químicos para determinar su relación jerárquica a partir de diversas propiedades fisicoquímicas, por medio del análisis de agrupamiento (Restrepo, 2005; Uribe Guerrero, 2011). Esta metodología presenta las siguientes definiciones (Restrepo, 2005):

- **Definición 1.** Un subgrafo G de un árbol D se llama subárbol sí:

1. G no contienen el nodo raíz
2. Existe un vértice p en D de mayor que 1 tal que G corresponde a uno de los grafos conexos obtenidos al retirar p de D.

- **Definición 2.** Se llama n-subárbol a un subárbol de cardinalidad menor o igual a n.

● **Definición 3.** Se llama n-subárbol maximal a todo n-subárbol para el que no es posible encontrar otro n-subárbol que lo contenga.

● **Definición 4.** Sea X un conjunto no vacío; una topología de X es una colección τ de subconjuntos de X (a los que llamaremos abiertos) que satisfacen las siguientes condiciones:

1. Toda unión de conjuntos de τ es un conjunto de τ
2. La intersección de cualquier colección finita de conjuntos de τ , es un conjunto de τ
3. El conjunto vacío y el mismo conjunto X pertenecen a τ .

Una pareja (X, τ) constituida por un conjunto X y una topología τ de X, se llama un espacio topológico. También se dice que X está dotado o provisto de topología τ (Muñoz Quevedo, 2003).

Ahora tomemos a X como el conjunto Q de los herbicidas.

- **Definición 5.** Sea B una colección de subconjuntos de Q, tales que:

1. $Q = \cup_{B \in B} B$

2. Si $B_1, B_2 \in B$, entonces $B_1 \cap B_2$ es la unión de objetos de B .

Entonces B es la base de la topología τ , donde $\tau = \{\cup_{B \in \mathfrak{B}} B \mid \mathfrak{B} \subseteq B\}$

- **Teorema 1.** Sean $B_n = \{B \subseteq Q \mid B \text{ está conformada por los objetos de algún } n\text{-subárbol maximal}\}$ entonces B_n es base para una topología sobre Q (Restrepo, 2005; Restrepo et al., 2006; Uribe Guerrero, 2011).

2.1.2.2.1 Número de selección. De acuerdo al teorema 1, la selección de diferentes valores de n para los n -subárboles maximales generan diferentes topologías, por tanto, diferentes topologías para el conjunto Q . Por ejemplo, si se elige $n=1$ se obtienen agrupamientos poco poblados (de un solo objeto) y, si se elige $n=|Q|$ se obtiene un solo agrupamiento (formado por todos los objetos del conjunto Q) que indica que todos los objetos tienen propiedades similares. Por tal razón, y puesto que estamos interesados en la formación de agrupamientos, necesitamos generar una base cuyo cardinal y el cardinal de sus subconjuntos sea alto y para esto seleccionamos el mejor valor de n comprendido en el intervalo $1 < n < |Q|$. para seleccionar el valor de n calculamos el número de selección denotado por S (Ecuación 5) (Restrepo, 2005, 2013a, 2013b; Uribe Guerrero, 2011).

Ecuación 5. *Número de selección.*

$$S = C \prod_i |C_i|$$

Donde:

C : número de agrupamientos para n datos

$\prod_i |C_i|$ Es el producto de cardinales o “poblaciones” de los agrupamientos generados

Adaptado de Quimiotopología de las interacciones entre elementos del cuarto período y el hidrógeno. Estructura y enlace químico (Uribe Guerrero E, 2011).

Finalmente, el valor de S aumenta a medida que se incrementa el número de agrupamientos y su población. así el mejor valor para n es el que maximiza el valor de S . Una vez seleccionado el valor de n construimos la base topológica B_n para el conjunto Q que satisface las condiciones del Teorema 1. Una vez descrito el procedimiento para dotar al conjunto Q de una topología a partir de un árbol, podemos estudiar propiedades topológicas como: clausura, frontera, interior y conjunto derivado para determinar las relaciones de vecindad entre los objetos de un conjunto (Uribe Guerrero, 2011).

2.1.2.2 Propiedades topológicas (Uribe Guerrero, 2011).

- Definición 1. Sean $A \subset Q$ y $X \in Q$; se dice que x es un punto de adherencia de A , si y sólo si para todo $O \in \tau$, tal que $X \in O$, se tiene que $O \cap A \neq \emptyset$.
- Definición 2. Sea $A \subset Q$; se define la adherencia o clausura de A como $\bar{A} = \{x \in Q \mid x \text{ es punto de adherencia de } A\}$.
- Definición 3. Sean $A \subset Q$ y $x \in Q$; se dice que x es un punto de acumulación de A si y sólo si para todo $O \in \tau$, tal que $x \in O$, se tiene que $(O - \{x\}) \cap A \neq \emptyset$.
- Definición 4. Sea $A \subset Q$; se define el conjunto derivado de A como $A' = \{x \in Q \mid x \text{ es un punto de acumulación de } A\}$.
- Definición 5. Sean $A \subset Q$ y $x \in Q$; se dice que x es un punto fronterizo de A si y sólo si para todo $O \in \tau$, tal que $x \in O$, se tiene que $O \cap A \neq \emptyset$ y $O \cap (Q - A) \neq \emptyset$.
- Definición 6. Sea $A \subset Q$; se define la frontera de A como $b(A) = \{x \in Q \mid x \text{ es un punto de frontera de } A\}$.

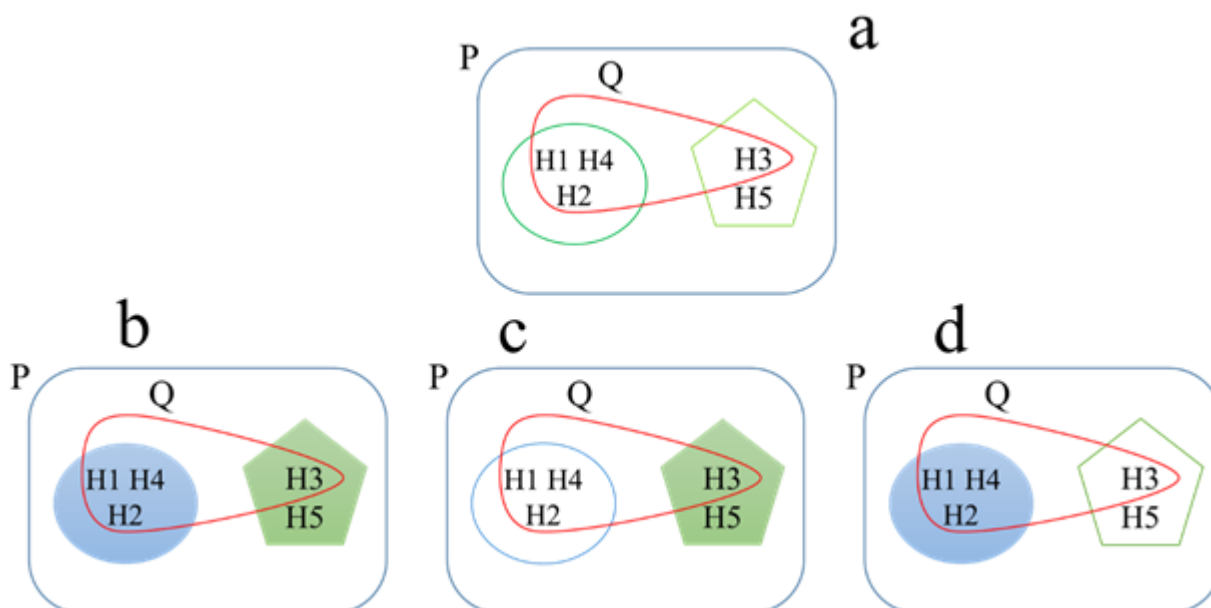
2.1.2.2.3 Determinación del conjunto clausura, frontera e interior de un subconjunto del conjunto total de los objetos (Restrepo, 2005; Restrepo et al., 2006; Uribe Guerrero, 2011). Este proceso se explica por medio del siguiente caso hipotético. Imagínese que se tiene un conjunto de 5 herbicidas, el cual se le llamará P y al subconjunto se la llamará Q, en el cual sus elementos H1, H2, H3, H4, H5; son el herbicida 1, herbicida 2, herbicida 4, herbicida 4 y herbicida 5 respectivamente (Figura 13 - a). Para este subconjunto Q, se determinaron las propiedades Clausura, frontera e interior (De Castro, 2018; Restrepo, 2013b; Restrepo et al., 2006; Uribe Guerrero, 2011).

a) Clausura de Q: En ese conjunto se encuentran todos los objetos del subconjunto Q y los vecinos de estos en su agrupamiento (Ver Figura 13 - b); así $\bar{Q} = \{H1, H2, H3, H4, H5\}$.

b) Frontera de Q: en la frontera de Q ($b(Q)$) se encuentran todos aquellos objetos de Q cuyas vecindades tienen objetos tanto en Q como del complemento de Q, así: $b(Q) = \{H3, H5\}$ (Ver Figura 13 - c).

c) Interior de Q: Este conjunto contiene todos los objetos de P cuyas vecindades contienen sólo objetos de Q. así $Int(Q) = \{H1, H2, H4\}$ (Ver Figura 13 - d).

Figura 13. Determinación del conjunto clausura (b), frontera (c) e interior (d) de un subconjunto del conjunto total de los objetos.



La razón de realizar este proceso topológico, es poder analizar no sólo la afinidad de las propiedades químicas de los herbicidas escogidos (Restrepo, 2005, 2013b; Uribe Guerrero, 2011), sino verificar cuales hacen parte de un conjunto de interés ambiental para reemplazar un compuesto con mayor toxicidad o con riesgo de daño a la salud humana como, por ejemplo, el glifosato (IARC, 2020; Vázquez et al., 2017). Que son herbicidas muy polémicos socialmente (Chamorro, 2017), debido a que han sido declarados algunos países como potencialmente cancerígenos o alteradores de las funciones hormonales del ser humano (IARC, 2020; Neumeister et al., 2014; Vázquez et al., 2017).

2.2 Marco de Antecedentes.

2.2.1 La conjetura de Villaveces.

Para el año 2000, el investigador José Luis Villaveces afirmó que el conjunto de sustancias químicas parece un espacio topológico en el que es más importante la relación de clases, vecindades y jerarquía de clases. Del mismo modo, afirmó que la clase de equivalencias parece que es la estructura matemática de la tabla periódica y explica por qué se hizo posible la predicción de elementos químicos. El anterior planteamiento sobre la estructura hipotética del sistema periódico se conoce como la conjetura de Villaveces (Forero, 2017). En resumen, lo importante para conocer qué relaciones pueden existir entre diferentes objetos (moléculas, elementos, etc.) es analizar el conjunto formado por todos los objetos y uno por uno. Algunos estudios realizados con este propósito son:

2.2.2 Correlaciones geométricas y electrónicas de estructura / función en enzimas de hierro.

En el año 2000, Zhou et al. efectúan la clasificación difusa de 50 elementos químicos al utilizar 7 características como la entalpía, diámetro, densidad, punto de fusión y ebullición, conductividad térmica y electronegatividad. Estudio que concluyó que el hidrógeno no se parece a ningún otro elemento; que el Carbono (C), Boro (B), Flúor (F), Nitrógeno (N) y Oxígeno (O) no son elementos químicos semejantes al resto de su respectivo grupo en la tabla periódica; razón que reafirma el principio de singularidad. No obstante, el oxígeno (O) Flúor (F) y nitrógeno (N) son similares entre sí. Además, dentro de los elementos químicos incluidos en este estudio se

encontraban el Berilio (Be) y Aluminio (Al), los cuales mostraron semejanza entre ellos, y se reafirma la evidencia del efecto diagonal (Solomon et al., 2000).

2.2.3 Clasificación numérica de los elementos químicos y su relación con el sistema periódico.

En el año 2000, Peter Sneath pionero de la taxonomía numérica (Sneath 2005); realizó estudios de semejanza con 69 elementos químicos y 56 propiedades. Este autor caracterizó elementos y compuestos con propiedades físicas y químicas, pero omitió el número de los átomos y peso atómico en este análisis. Para evaluar el comportamiento de un estudio donde se omitieron las variables mencionadas anteriormente. La investigación de Sneath se basó en análisis jerárquico de agrupamientos de los elementos, en el que se escogió como función de semejanza el coeficiente de Gower y su metodología de agrupamiento fue la unión promedio ponderada (Sneath, 2000).

2.2.4 Estudio topológico del sistema periódico (Quimiotopología).

Para el año 2004, Guillermo Restrepo et al. estudió la semejanza de 72 elementos químicos y fueron caracterizados por 31 propiedades físicas y químicas de sustancias simples y compuestos. Al igual que se realiza en trabajos como los de (Solomon et al. 2000) y (Sneath 2000) no se reportaron las sustancias simples ni se tuvo en cuenta el número atómico dentro de las propiedades para analizar. En este estudio se utilizaron 4 funciones de semejanza de las cuales 3 fueron métricas y angular, las cuales caracterizaron a los elementos. El procedimiento a seguir fue el análisis de agrupamientos y esto exigió el uso de 4 metodologías de agrupamientos como la unión promedio no ponderada, del centroide, sencilla y compleja. Al combinar las funciones de semejanza el proceso generó 16 dendrogramas y de esto se concluyó, que del conjunto de elementos analizados

el Bromo (Br), Cloro (Cl) y Yodo (I) aparecen juntos en todos los dendrogramas. Sin embargo, el Cloro (Cl), Flúor (F), Yodo (I) y Bromo aparecen juntos, solo en el 75% de los dendrogramas obtenidos en el estudio. Estos datos fueron interpretados como un indicador de semejanza de clase y el consenso discutido fue el de Adams (Restrepo et al., 2004).

En el año 2006, Guillermo Restrepo et al. escogió los mismos elementos que (Restrepo et al., 2004) y utilizó la metodología de Ward, que posee mucho uso en estudios de semejanza (Everitt et al., 2011). Con los 20 dendrogramas resultantes se construyó el consenso de Adams y seleccionaron agrupamientos de 5 elementos. En conclusión, en este estudio se analizaron los componentes principales y como resultado se identificó que el 90% de la varianza es explicada por los 31 componentes principales de este estudio. Razón que afirma lo expuesto por Peter Sneath sobre la dificultad de encontrar pocos componentes que reúnan gran cantidad de información de elementos químicos. Finalmente, esto hace notable la cuestión sobre el número mínimo de propiedades necesarias para describir los elementos químicos (Restrepo et al., 2007).

2.2.5 Sistema periódico basado en la red neuronal de Kohonen.

Para el año 2010, David Zhekai Chen estudio 54 elementos con 10 propiedades físicas y químicas. Las características empleadas en el estudio fueron, peso atómico, mínimo de estado de oxidación, electronegatividad, estado de la materia, radio atómico y punto de fusión y ebullición, calor de atomización y potencial de ionización. Como metodología se empleó la red de Kohonen para clasificar los elementos. El gestor de esta investigación encontró tres (3) clases principales como los no metales, semimetales y metales (Chen, 2010). Este estudio no indica un criterio claro usado para la selección de clases; se presume que la clasificación está basada en la cercanía de

neuronas que contenían elementos (Forero 2017). El presente estudio permitió encontrar las siguientes clases {Li, Mg}; {Nb, Mn, Tc}; {Fe, Co, Ni}; {He, Ne}; {S, P}; {As, Se} y {O, F}. Pero las clases {Li, Mg} y {Nb, Mo, Tc} no habían sido encontradas en estudios anteriores. Finalmente, se aprecia que la clase {Li, Mg} un caso de relación o efecto diagonal (Chen, 2010).

2.2.6 Quimiología de las interacciones entre elementos del cuarto período y el hidrógeno, estructura y enlace químico.

Hacia el año 2011, Emilbus Azelleb Uribe Guerrero realizó un estudio quimiopológico de 44 compuestos químicos MH_n (donde $M=Sc-Zn$ y $n=1-4$) con 11 propiedades fisicoquímicas. En esta investigación se utilizó el nivel de teoría B3LYP/6-31+G (2d, p) para el cálculo de las propiedades; adicionalmente se usaron tres (3) funciones de similitud y cuatro (4) metodologías de agrupamientos. Posteriormente y a causa del tratamiento estadístico de los datos obtenidos, se originaron 12 dendrogramas que permitieron calcular árboles consensuales. De otro modo, con los agrupamientos obtenidos se definió una base topológica para los complejos MH_n ; luego se analizaron las propiedades topológicas como clausura, conjunto derivado y frontera de subconjuntos de complejos MH_n . El resultado del proceso mencionado anteriormente, fueron cuatro (4) conjuntos topológicamente invariantes como los MH_n tempranos = {ScH_n, TiH_n, VH_n, CrH_n}; complejos MH_n tardíos = {FeH_n, CoH_n, NiH_n, CuH_n}; complejos $MnH_n = \{MnH, MnH_2, MnH_3, MnH_4\}$ y complejos $ZnH_n = \{ZnH, ZnH_2, ZnH_3, ZnH_4\}$. Finalmente, esta investigación determinó que la frontera topológica de los complejos ZnH_n es el complejo CuH₂, mientras que los complejos MH_n tempranos y tardíos están conformada por los complejos MnH_n (Uribe Guerrero, 2011).

2.2.7. Estudio en red de elementos químicos de compuestos binarios a tendencias químicas.

En el año 2012, Guillermo Restrepo et al. Realiza un nuevo estudio de compuestos químicos y tiene en cuenta aspectos de la dependencia de los compuestos, valencias y estequiometrias. Este nuevo estudio lo influencia la idea de que la química tiene su origen en el carácter relacional de las sustancias. En esta investigación se utilizaron 4.700 compuestos binarios relacionados con 94 elementos; por primera vez se incluyen los compuestos lantánidos y actínidos. La metodología de la evaluación de las vecindades fue la diferencia simétrica y la unión promedio; esto género en Dendrograma del cual se extrajeron clases y números de selección. Los resultados de esta investigación arrojaron que no hay semejanzas entre actínidos y lantánidos, aunque sean muy cercanos en la tabla periódica. No obstante, los lantánidos son muy semejantes entre ellos a excepción del Lantano (La) y el Cerio (Ce). Otro dato importante de esta investigación, es que el Lutecio (Lu) no puede ser considera un lantánido sino un metal de transición; ya que los orbitales f los tiene llenos y según este estudio se debe tener en cuenta como un elemento del bloque d en la tabla periódica (Leal et al., 2012).

2.2.8 Estudio quimiopológico DFT sobre los óxidos de metales de transición 3d y los complejos de oxígeno.

Finalmente, en el año 2016 Trujillo-González et al. realizó un estudio quimiopológico en el cual utilizó el método de química cuántica, teoría del funcional de densidad (DFT de sus siglas en inglés) con el nivel de teoría BPW91/6-311+G* sin restricciones, para explorar superficies de energía potencial de complejos MO_n (M= Sc-Zn, n=1-2, O= oxígeno). En esta investigación se seleccionaron nueve (9) propiedades fisicoquímicas para caracterizar cada uno de los complejos

MO_n y poder realizar un estudio quimiotopológico. Los resultados de este análisis mostraron que las relaciones de similitud entre algunos elementos del grupo VIIB (Fe, Co y Ni) de la tabla periódica, se transfieren a sus correspondientes complejos MO_n . Adicionalmente en esta investigación, se introdujo una clasificación de las interacciones M-O en los complejos MO_n basada en la metodología QTAIM (Trujillo-González et al., 2016).

Basándose en la información aportada anteriormente, se puede concluir que los estudios de semejanza entre elementos químicos y moléculas, nos abre una gama de posibilidades, para solucionar diversas problemáticas no solo en el ámbito químico, sino en campos multidisciplinarios como el ambiental. En el que el uso de los principios de semejanzas y tratamientos matemáticos de datos; fundamentan la quimiotopología como una herramienta tecnológica y científica, para aplicarla a la solución de problemas ambientales (Trujillo-González et al., 2016).

2.2.9 Estudio teórico y quimiotopológico de sustancias químicas TMO_n ($TM= Sc-Zn$ y $n= 1-4$).

Finalmente, para el año 2020 Uribe et al. Estudiaron si las relaciones de vecindad que existen entre los elementos de transición del cuarto periodo, se transfieren a un grupo de sus compuestos, el grupo de los TMO_n . Como resultado del estudio quimiotopológico, se encontró que las relaciones de vecindad que existen entre los metales de transición del cuarto período desde Sc hasta Zn si son transferibles a sus compuestos o sustancias químicas, del tipo TMO_n ($n=1-4$). Adicionalmente, esta investigación clasificó las interacciones químicas que existen en los TMO_n ($n = 3$ y 4) como interacciones no covalentes del tipo capa cerrada, y las interacciones O - O como covalentes o del tipo capa compartida (Uribe et al., 2020).

3. Método

La metodología utilizada para el análisis quimiotopológico de los 25 herbicidas seleccionados (Tabla 5), que están regulados por el Instituto Colombiano Agropecuario – ICA (ICA, 2008, 2020), definidos por 24 propiedades fisicoquímicas (Tabla 6) se describe a continuación.

3.1 Selección de los objetos (sustancias químicas) de estudio.

Tabla 5. *Conjunto de herbicidas seleccionados para el estudio quimiotopológico*

2,4 d - (Ácido 2,4-diclorofenoxiacético) - CAS: 94-75-7	Glifosato - CAS: 1071-83-6
Acifluorfen - CAS: 50594-66-6	Glufosinato - CAS: 53369-07-6
Alacloro - CAS: 15972-60-8	Imazetapir - CAS: 81335-77-5
Asulam - CAS: 3337-71-1	Lenacil - CAS: 2164-08-1
Atrazina - CAS: 1912-24-9	Metribuzina - CAS: 21087-64-9
Bromoxinil - CAS: 1689-84-5	Metsulfuron Metil - CAS: 74223-64-6
Dalapón - CAS: 75-99-0	Norflurazon - CAS: 27314-13-2
Dicamba - CAS: 1918-00-9	Paraquat - CAS: 1910-42-5
Diclofop-metil - CAS: 51338-27-3	Pendimetalina - CAS: 40487-42-1
Difenamida - CAS: 957-51-7	Propanil - CAS: 709-98-8
Diflufenican CAS: 83164-33-4	Quinclorac - CAS: 84087-01-4
Diuron - CAS: 330-54-1	Sethoxydim - CAS: 74051-80-2
EPTC (S-etil dipropiltiocarbamato) - CAS: 759-94-4	

3.2 Definición de cada una de las sustancias químicas (herbicidas) por sus propiedades, que para este caso fueron 24 propiedades entre teóricas y experimentales.

Tabla 6. *Propiedades fisicoquímicas y toxicológicas de los 25 herbicidas seleccionados*

Momento dipolar (Debye)	Solubilidad en agua (mg/L a 25°C)
Energía total (kcal/mol)	Presión de vapor (Pa a 25°C)
Energía térmica (kcal/mol)	coeficiente de partición de octanol agua (Log KOW)
Capacidad calorífica (kcal/mol-K)	Ley de Henry (Pa·m ³ /mol at 25°C)
Entropía (kcal/mol-K)	Factor de bioconcentración (BCF)
Polaridad α (C*m ² /V)	Vida media (Días)
Peso molecular (g/mol)	Índice de Refracción
Temperatura de fusión (K)	coeficiente de partición octanol aire (KOA)
Punto de ebullición normal (K)	Volatilización desde agua (atm·m ³ /mol)
Densidad a 298,15 K - (g/ml)	Toxicología DL50 (mg/kg) Oral - ratas - bibliografía
Constante de disociación pKa	Categoría toxicológica DL50 (mg/Kg) (según resolución 10834 de 1992)
Coefficiente de Adsorción de carbono orgánico (Log KOC)	Categoría toxicológica mayor DL50 (mg/kg) Oral Ratas - Presentación comercial - (según registro del ICA)

Nota: En la tabla se muestran las unidades utilizadas de cada propiedad.

Para determinar los valores teóricos de las propiedades moleculares como momento dipolar (Debye), energía total (Kcal/mol), energía térmica (Kcal/mol), capacidad calorífica (Kcal/mol-K), entropía (Kcal/mol-K), polaridad alfa α (C*m²/V) se utilizó el nivel de teoría BPW91/DGDZVP implementado en el programa Gaussian 09 (Borioni et al., 2017; Bort, 2001; Dennington et al., 2009; Escola et al., 2011; A. Frisch et al., 2007; M. J. Frisch et al., 2009; Godbout et al., 1992; Ketkov & Selzle, 2007; Poleshchuk et al., 2009; Riley et al., 2007; Siiskonen & Priimagi, 2017; Uribe Guerrero, 2011). Por último, los valores teóricos de las propiedades moleculares fueron compilados en la matriz de datos que se encuentra como anexo al final de este libro (Apéndice 39).

Los datos de las propiedades experimentales fueron extraídos de bases de datos; entre las cuales se destacan CHEMSPIDER, PUBCHEM y ChEMBL, fichas técnicas de fabricantes, libros y artículos científicos. Finalmente, con el objetivo verificar toda la información aquí recopilada, se adjuntó la respectiva referencia bibliográfica en la matriz de datos (Apéndice 41).

3.3 Normalización de la matriz de datos 25 x 24.

Con los valores de las 24 propiedades fisicoquímicas (Tabla 6) de los 25 herbicidas seleccionados (Tabla 5), se construyó una matriz de datos con dimensión 25 x 24 (Apéndice 39) y posteriormente se normalizaron los datos de la matriz (Apéndice 40) con el objetivo de llevar a cada propiedad al mismo intervalo (entre 0 y 1); para evitar que alguna propiedad tuviese más peso estadístico que otra, debido a su escala o grado de varianza (C. Cárdenas et al., 2002; Trujillo-González et al., 2016; Uribe et al., 2020; Uribe Guerrero, 2011).

3.4 Análisis de agrupamiento con la matriz de datos normalizada.

Se realizaron 12 análisis de agrupamiento (sección 2.1.2.1 Metodología del análisis de agrupamientos) donde se utilizaron 3 funciones de similitud y 4 metodologías de agrupamiento (Tabla 7). Las cuales fueron escogidas de acuerdo a la bibliografía consultada y al uso regular en estudios de análisis de agrupamientos o conglomerados (Chauza-López & Villa-Villada, 2011; De la Fuente Fernández, 2011; Everitt et al., 2011; Heredia et al., 2012; IICA, 2007; López, 2005; Madrid, 2009; Perea, 2006; Uribe Guerrero, 2011). El tratamiento estadístico de los datos de la matriz normalizada se hizo con el software SPSS versión 25 (Hernández-Sampieri & Torres, 2018; IICA, 2007; López, 2005; SPSS, 2017).

Tabla 7. *Principales funciones de similitud y métodos de agrupamiento, utilizados en análisis de conglomerados.*

Funciones de similitud	Métodos de agrupamiento
Euclidiana	Centroide
Minkowski	Mediana
Coseno	Ward
	Vecino más lejano

3.5 Extracción de agrupamientos del dendrograma (base topológica), selección de subconjuntos y determinación de las propiedades clausura, frontera e interior de los subconjuntos.

Para extraer los agrupamientos se seleccionó un número (n) entre 1 y 25. Para cada valor de n , se calculó el número de agrupamientos C y su población $\prod_i |C_i|$. Con la multiplicación de C y $\prod_i |C_i|$. Se determinó el número de selección S . Posteriormente, Se seleccionó el valor n para el cual S es máximo y con dicho valor, se construyó la base topológica B_n para cada uno de los 12 dendrogramas (Uribe Guerrero, 2011). Como resultado de cada uno de los análisis de agrupamientos se obtuvo un dendrograma y para cada uno de ellos se extrajo la base topológica. Adicionalmente, se tuvo en cuenta la metodología descrita por Uribe y Restrepo et al. (Leal et al., 2012; Restrepo, 2005, 2013a, 2013b; Restrepo et al., 2004, 2007; Trujillo-González et al., 2016; Uribe et al., 2020; Uribe Guerrero, 2011). Por último, se seleccionó la base topológica obtenida con la función de similitud euclidiana y la metodología de agrupamiento Ward como representativa de todas las obtenidas, que muestran en la mayoría de los casos, los mismos agrupamientos. Una vez dotado el conjunto Q con una topología se estudiaron propiedades topológicas como clausura, frontera e interior de tres subconjuntos de Q llamados A , B y C . Estos tres (3) subconjuntos fueron seleccionados al tener en cuenta que los herbicidas del grupo A , han sido clasificados como

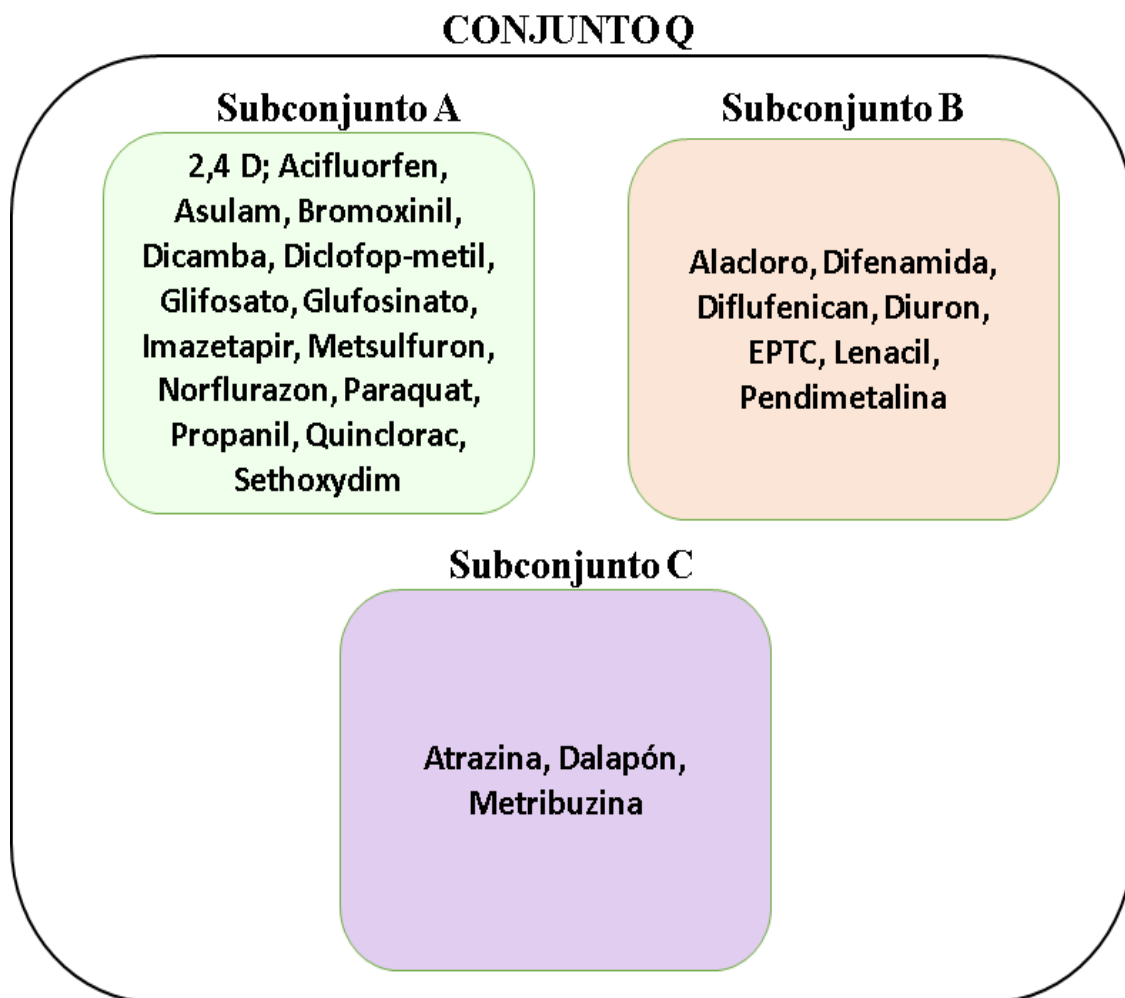
herbicidas postsiembra, los del grupo B como presiembra y los del grupo C como presiembra y postsiembra (Figura 14).

$$A = \left\{ \begin{array}{l} 2,4 D; \text{Acifluorfen, Asulam, Bromoxinil, Dicamba, Diclofop-metil, Glifosato, Glufosinato,} \\ \text{Imazetapir, Metsulfuron, Norflurazon, Paraquat, Propanil, Quinclorac, Sethoxydim} \end{array} \right\}$$

$$B = \{ \text{Alacloro, Difenamida, Diflufenican, Diuron, EPTC, Lenacil, Pendimetalina} \}$$

$$C = \{ \text{Atrazina, Dalapón, Metribuzina} \}.$$

Figura 14. Conjunto Q y subconjuntos A, B, C.



4. Alcance

En esta sección es importante aclarar que este proyecto de investigación es 100% teórico; no involucra ningún tipo de análisis poblacional o análisis del uso racional o irracional de los herbicidas en ningún tipo de cultivo físico. Tampoco se pretende en ningún momento realizar estudios experimentales posteriores o durante la duración de este. Además de los objetivos, los resultados están enmarcados dentro del proyecto FODEIN 2021 titulado “Evaluación de los riesgos toxicológicos a que son sometidos los pequeños agricultores de la vereda Las Amarillas del municipio de Piedecuesta – Santander por el uso de agroquímicos como plaguicidas”.

5. Resultados

La base topológica B_6 contiene máximo 6 moléculas por agrupamiento (Figura 15) y se observan agrupamientos entre moléculas del mismo tipo (postsiembr) o diferente como los constituidos por los herbicidas Atrazina, Diuron, Metribuzina, Asulam, Dicamba, Quinclorac o las constituidos por Imazetapir, Pendimetalina, Difenamida, Alacloro, Diclofop-metil o por Acifluorfen, Sethoxydim, Metsulfuron Metil, Diflufenican, entre otros, donde algunos son herbicidas postsiembr y presiembr

Figura 15. Base topológica obtenida con obtenida con la función de similitud euclidiana y la metodología de agrupamiento Ward.

B6=

$$\left\{ \begin{array}{l} \{Atrazina, Diuron, Metribuzina, Asulam, Dicamba, Quinclorac\}, \{Lenacil, Norflurazon\}, \\ \{Glifosato, Glufosinato\}, \{Dalapón, EPTC\}, \{2,4 D; Propanil, Paraquat, Bromoxinil\}, \\ \{Imazetapir, Pendimetalina, Difenamida, Alacloro, Diclofop-metil\}, \\ \{Acifluorfen, Sethoxydim, Metsulfuron Metil, Diflufenican\} \end{array} \right\}$$

5.1 Análisis de las propiedades topológicas del subconjunto A.

La clausura y la frontera de A sugiere la existencia de relaciones entre herbicidas postsiembra y presiembra, y se observan relaciones entre herbicidas postsiembra y otros que se usan tanto para presiembra como postsiembra como por ejemplo la encontrada entre los herbicidas atrazina, Diuron, Metribuzina, Dicamba, Asulam y la encontrada entre los herbicidas Imazetapir, Pendimetalina, Difenamida, Alacloro, Diclofop-Metil.

Clausura A=

$$\left\{ \begin{array}{l} 2,4D, Propanil, Paraquat, Bromoxinil, Acifluorfen, Sethoxydim, Metsulfuron Metil, \\ \text{Diflufenican, Asulam, Dicamba, Quinclorac, Atrazina, Diuron, Metribuzina,} \\ \text{Imazetapir, Pendimetalina, Difenamida, Alacloro, Diclofop-Metil, Glifosato,} \\ \text{Glufosinato} \end{array} \right\}$$

Frontera A=

$$\left\{ \begin{array}{l} 2,4D, Propanil, Paraquat, Bromoxinil, Acifluorfen, Sethoxydim, Metsulfuron Metil, \\ \text{Diflufenican, Asulam, Dicamba, Quinclorac, Atrazina, Diuron, Metribuzina,} \\ \text{Imazetapir, Pendimetalina, Difenamida, Alacloro, Diclofop-Metil,} \end{array} \right\}$$

Interior A= {Glifosato, Glufosinato}

El conjunto interior de A sugiere que los herbicidas Glifosato y Glufosinato solo se parecen entre ellos y no se parecen a otros elementos del subconjunto A. Es decir que si se pensara en una sustancia reemplazo para el Glifosato debería pensarse en el Glufosinato y no en ningún otro herbicida contemplado en el grupo A. Este resultado, en particular, es interesante porque corrobora estudios experimentales previos donde sólo se sugiere el reemplazo del Glufosinato por Glifosato (Cook et al., 2010; Culpepper et al., 2009; Striegel et al., 2020) y porque apoya los estudios hechos

en 2016 por la Policía Nacional de Colombia donde se sugiere el reemplazo del Glifosato por Glufosinato (Mejía & Agudelo-Londoño, 2019; Méndez, 2018).

Ambos, Glifosato por Glufosinato, son herbicidas no selectivos y controlan una amplia variedad de malezas. Sin embargo, funcionan de formas diferentes; el Glifosato es un herbicida de translocación sistémico que inhibe la vía de la EPSP sintasa y bloquea los aminoácidos esenciales necesarios para el proceso de fotosíntesis. Por otra parte, el Glufosinato es un herbicida de contacto semi - translocante que inhibe la glutamina sintetasa; en otras palabras, inhibe la capacidad de una planta para utilizar nitrógeno. Estas diferencias generan que el Glufosinato funcione más rápido que el Glifosato (Darnell, 2021). Actualmente, se conoce abundante literatura sobre los efectos secundarios del Glifosato en la naturaleza (Caramello et al., 2017; Mateos & Sánchez, 2019; Nivia, 2000). Pero al mismo tiempo, existe evidencia literaria de que el Glufosinato, se puede utilizar como alternativa al Glifosato (Culpepper et al., 2009; Mejía y Agudelo-Londoño, 2019; Méndez, 2018; Striegel et al., 2020). Finalmente, una posible ventaja adicional del Glufosinato, sería que este producto no lleva mucho tiempo en uso para el control de malezas, lo que hace posible que no presente tantos problemas de tolerancia o resistencia al herbicida, como si lo hacen algunas malezas con el Glifosato. Debido al constante proceso de adaptación de las plantas (Gould y Lewontin, 1982; Villalba, 2009).

5.2 Análisis de las propiedades topológicas del subconjunto B.

Clausura B=

{ Alacloro, Difenamida, Diclofop-Metil, Pendimetalina, Imazetapir, Dalapón, EPTC,
 Lenacil, Norflurazón, Atrazina, Diuron, Metribuzina, Asulam, Dicamba,
 Quinclorac, Acifluorfen, Sethoxydim, Metsulfuron Metil, Diflufenican }

Frontera B=

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{Alacloro, Difenamida, Diclofop-Metil, Pendimetalina, Imazetapir, Dalapón, EPTC,} \\ \text{Lenacil, Norflurazón, Atrazina, Diuron, Metribuzina, Asulam, Dicamba,} \\ \text{Quinclorac, Acifluorfen, Sethoxydim, Metsulfuron Metil, Diflufenican} \end{array} \right\}$$
Interior B= \emptyset

La clausura y frontera de los subconjuntos B están constituidas por los mismos elementos, esto mismo ocurre con el subconjunto C. Aquí es posible observar relaciones entre, por ejemplo, la Pendimetalina, Quinclorac y Propanil la cual ha sido estudiada experimentalmente y es propuesta por Riches, C. R.; Knights, J. S.; Chaves, L.; Caseley, J. C.; Valverde, B. E. en el año 1997 donde se propuso que la Pendimetalina y el Quinclorac pueden reemplazar el Propanil (Riches et al., 1997). También se encontró relaciones entre el Diuron, Atrazina, Metribuzina y el Norflurazon que también fueron estudiadas por Giry, G.; Ayele, J. en el año 1998, donde se propuso que el herbicida Norflurazon puede reemplazar a Diuron, Atrazina y Metribuzina (Giry & Ayele, 1998).

5.3 Análisis de las propiedades topológicas del subconjunto C.

Clausura C= {Atrazina, Diuron, Metribuzina, Asulam, Dicamba, Quinclorac, Dalapon EPTC}

Frontera C= {Atrazina, Diuron, Metribuzina, Asulam, Dicamba, Quinclorac, Dalapon EPTC}

Interior C= \emptyset

Finalmente, y en ambos casos, en el interior de los subconjuntos B y C no se presentan elementos, por tal razón no fue posible afirmar una relación en particular y propia entre sustancias químicas que hacen parte de estos dos subconjuntos.

6. Conclusiones

- El estudio de la estructura matemática subyacente al conjunto de las sustancias químicas parece ser más importante que el estudio de las sustancias por separado. Por esta razón y al hacer uso de la quimiotopología, es posible ver que existen relaciones entre herbicidas y que no hacen parte de uno u otro grupo robusto como lo muestra la literatura. Aquí se encontraron relaciones entre herbicidas presiembra y postsiembra, o entre herbicidas que han sido clasificados como sistémicos o de contacto.
- El agrupamiento formado por el Glifosato y el Glufosinato es el único que no muestra ningún tipo de relación con ninguno otro herbicida contemplado en este estudio. Esta relación de similitud es corroborada por estudios experimentales donde se sugiere el uso del Glufosinato en reemplazo del Glifosato.
- La confirmación de resultados experimentales ya predichos y que en este trabajo son obtenidos mediante al análisis quimiotopológico, es una muestra de la importancia de esta técnica y un incentivo para estudiar empíricamente las relaciones de similitud aquí encontradas.

Referencias Bibliográficas

- Alfaro, R. (2013). *Herbicidas asociados a la caña de azúcar y su potencial de contaminación del medio ambiente*. Liga Agrícola Industrial de La Caña de Azúcar (LAICA). Costa Rica.
<https://servicios.laica.co.cr/laica-cv-biblioteca/index.php/Library/download/LBApEJpBqNOsCPeXEpSrxydFmiaJmftI#:~:text=Entre las características físico químicas,y el coeficiente de partición.>
- Anderson, W. P. (1977). *Weed science: principles*. West Publishing Co.
- Anzalone, A. (2007). *Herbicidas: Modos y mecanismos de acción en plantas*. Universidad Centro Occidental" Lisandro Alvarado"(UCLA). Recuperado de https://www.researchgate.net/.../259175751_Herbicidas_Modos_y_Mecanismos_de_A.
- Arellano, V. M. U., & Monroy, V. Q. (2006). *Estadística Aplicada a la Comunicación*. Universidad Nacional Autónoma de México, Facultad de Estudios Superiores Acatlán.
<https://books.google.com.co/books?id=CxqsZ2zxxhAC>
- Arnold, B. H. (2011). *Intuitive concepts in elementary topology*. Courier Corporation.
- Bonchev, D., & Rouvray, D. H. (1999). *Chemical Topology: Introduction and Fundamentals* (Vol. 5). CRC Press.
- Borioni, J. L., Puiatti, M., Vera, D. M. A., & Pierini, A. B. (2017). *In search of the best DFT functional for dealing with organic anionic species*. *Physical Chemistry Chemical Physics*, 19(13), 9189–9198.

- Bort, J. A. (2001). *Química teórica y computacional (Vol. 2)*. Publicacions de la Universitat Jaume I.
- Botello, A. V. (2005). *Golfo de México: contaminación e impacto ambiental: diagnóstico y tendencias*. Universidad Autónoma de Campeche, Centro de Ecología, Pesquerías y Oceanografía del Golfo de México. <https://books.google.com.co/books?id=WwuryOF1jUEC>
- Burnside, O. (1991). *Weed Control Handbook: Principles & RJ Hance and K. Holly (Editors)*. 1990. Blackwell Scientific Publications, Publisher's Business Services, Brookline Village, MA, 582 pp. illus., hardcover, ISBN: 0-632-02459-3, \$94.00. *Weed Technology*, 5(1), 248.
- Caramello, C. S., Jorge, M. J., Jorge, N. L., & Jorge, L. C. (2017). *Evaluation of herbicide glyphosate effects in the fish Prochilodus lineatus using chromosome aberration test*.
- Cárdenas, C., Obregón, M., Llanos, E. J., Machado, E., Bohórquez, H.-J., Villaveces, J.-L., & Patarroyo, M.-E. (2002). *Constructing a useful tool for characterizing amino acid conformers by means of quantum chemical and graph theory indices*. *Computers & Chemistry*, 26(6), 667–682.
- Cárdenas, J., Doll, J. D., & Romero, C. (1975). *Clasificación de herbicidas*. http://ciat-library.ciat.cgiar.org/Articulos_Ciat/Digital/66943_Clasificacion_de_herbicidas.pdf
- Chamorro, C. G. (2017). *Glifosato: el herbicida de la polémica*. *Alimentaria: Revista de Tecnología e Higiene de Los Alimentos*, 487, 6–7.
- Chauza-López, L. J., & Villa-Villada, E. A. (2011). *Análisis de conglomerados comparando el coeficiente de similaridad de Gower y el método análisis factorial múltiple para el*

tratamiento de tablas mixtas. Escuela de Ingeniería Industrial y Estadística. Facultad de Ingeniería. Universidad Del Valle. Santiago de Cali, Colombia.

Chen, D. Z. (2010). *A new method for studying the periodic system based on a Kohonen neural network*. Journal of Chemical Education, 87(4), 433–434.

Cook, S. K., Wynn, S. C., & Clarke, J. H. (2010). *How valuable is glyphosate to UK agriculture and the environment?* Outlooks on Pest Management, 21(6), 280–284.

Correa, A. (2011). *Manual de registro de plaguicidas para Centroamérica*. FAO 2011.
<http://www.plaguicidasdecentroamerica.una.ac.cr/index.php/toxicidad-salud-humana>

Culpepper, A. S., York, A. C., Roberts, P., & Whitaker, J. R. (2009). *Weed control and crop response to glufosinate applied to 'PHY 485 WRF' cotton*. Weed Technology, 23(3), 356–362.

Darnell, C. (2021). *Weed Control "Round Up" – Glyphosate vs Glufosinate (p. 1)*. Weed Removal.
<https://www.naturesmulch.com/weed-control-round-up-glyphosate-vs-glufosinate/>

De Castro, C. P. (2018). *Topología básica*. FCE - Fondo de Cultura Económica.
<https://books.google.com.co/books?id=BH1TDwAAQBAJ>

De la Fuente Fernández, S. (2011). *Análisis conglomerados*. Madrid: Facultad de Ciencias Económicas y Empresariales, Universidad Autónoma de Madrid. Recuperado de:
<Http://Tinyurl.Com/Conglomerados>.

Dennington, R., Keith, T., & Millam, J. (2009). *GaussView, version 5*.

Duke, S. O., & Dayan, F. E. (2001). *Classification and mode of action of herbicides*. Uso de

Herbicidas En La Agricultura Del Siglo XXI:[II Simposium Internacional Uso de Herbicidas En La Agricultura Del Siglo XXI], 31–44.

Enrique, R. R., & Ricardo, S. D. L. C. (2006). *Clasificación y uso de los herbicidas por su modo de acción*.

Escola, N., Bikiel, D. E., Baggio, R., Di Salvo, F., & Doctorovich, F. (2011). *NO+*, *NO*, *NO-*! *Nitrosyl siblings from [IrCl₅(NO)]-*. *Inorganica Chimica Acta*, 374(1), 528–539.

Everitt, B. S., Landau, S., Leese, M., & Stahl, D. (2011). *An introduction to classification and clustering*. *Cluster Analysis*, 5, 1–13.

FAO. (2004). *Los riesgos emergentes relacionados con el medio ambiente y las nuevas tecnologías*.

Fernández, C. M. (2011). *Quimiometría*. Publicacions de la Universitat de València.
<https://books.google.com.co/books?id=3oix-tIRPAUC>

Fernández, S. M. (2001). *Guía Completa de Statgraphics: Desde MS-DOS a Statgraphics Plus*.
Díaz de Santos. <https://books.google.com.co/books?id=gik3nYmbetwC>

Forero, E. (2017). *Un Festschrift para Jos Luis Villaveces*. *Revista de La Academia Colombiana de Ciencias Exactas, Físicas y Naturales*, 41(160), 393–395.

Freiberger, W. F. (1960). *The international dictionary of applied mathematics*. Van Nostrand.

Frisch, A., Dennington II, R. D., Keith, T. D., Millam, J., Nielsen, A. B., Holder, A. J., & Hiscocks, J. (2007). *Gauss view version 4.1 user manual*. Gaussian Inc., Wallingford, CT, USA.

Frisch, M. J., Trucks, G. W., Schlegel, H. B., Scuseria, G. E., Robb, M. A., Cheeseman, J. R., Scalmani, G., Barone, V., Mennucci, B., & Petersson, G. A. (2009). *Gaussian 09*; Gaussian, Inc. Wallingford, CT, 32, 5648–5652.

Galindo-Domínguez, H. (2020). *Estadística para no estadísticos: una guía básica sobre la metodología cuantitativa de trabajos académicos*. 3Ciencias. <https://books.google.com.co/books?id=ehXaDwAAQBAJ>

Giry, G., & Ayele, J. (1998). *Détermination des paramètres de sorption sur sol de trois herbicides: oryzalin, isoxaben et norflurazon*. Journal Européen d'hydrologie, 29(1), 17–32.

Godbout, N., Salahub, D. R., Andzelm, J., & Wimmer, E. (1992). *Optimization of Gaussian-type basis sets for local spin density functional calculations*. Part I. Boron through neon, optimization technique and validation. Canadian Journal of Chemistry, 70(2), 560–571.

Gould, S. J., & Lewontin, R. (1982). *La adaptación biológica*. Paleobiology, 8(4), 214–223.

Gunsolus, J. L., & Curran, W. S. (1999). *Herbicide mode of action and injury symptoms*. Order, 612, 625–8173.

Heredia, L. M. C., Escobar, Y. C., & Díaz, Á. J. Á. (2012). *Análisis clúster como técnica de análisis exploratorio de registros múltiples en datos meteorológicos*. Ingeniería de Recursos Naturales y Del Ambiente, 11, 11–20.

Hernández-Sampieri, R., & Torres, C. P. M. (2018). *Metodología de la investigación (Vol. 4)*. McGraw-Hill Interamericana México D.F.

HRAC, C. de acción de resistencia a los herbicidas. (2020). *Modo de acción de los herbicidas*,

clasificación 2020.

https://hracglobal.com/files/HRAC_Revised_MOA_Classification_Herbicides_Poster.pdf

IARC, I. agency of research on cancer. (2020). *Agentes Clasificados por las Monografías de la IARC*, Volúmenes 1–127. <https://monographs.iarc.fr/agents-classified-by-the-iarc/>

ICA. (1973). *Propiedades físicas y químicas de los herbicidas*. Propiedades físicas y químicas de los herbicidas. https://repository.agrosavia.co/bitstream/handle/20.500.12324/20408/80460_3140.pdf?sequence=1&isAllowed=y

ICA. (2008). *Registros de plaguicidas Registrados* - 05 de Noviembre 2020. <https://www.ica.gov.co/getdoc/94b6784d-231e-42b3-a9df-1e3b671bca26/registros-de-venta--pqa-5-11-08.aspx>

ICA. (2020). *Registros de plaguicidas Registrados* - 16 de Julio 2020. <https://www.ica.gov.co/getdoc/d3612ebf-a5a6-4702-8d4b-8427c1cdaeb1/registrosnacionales-pqua-15-04-09.aspx>

IICA. (2007). *Sistema de Analisis Estadistico con SPSS* (I. Instituto Interamericano Para La Cooperación De La Agricultura (ed.)). IICA Biblioteca Venezuela. <https://books.google.com.co/books?id=sE0qAAAAYAAJ>

Ketkov, S. Y., & Selzle, H. L. (2007). *Vibrational Frequencies and Ionization Energy of Bis (η⁶-Benzene) Chromium as Studied by Density Functional Theory*. *Zeitschrift Für Physikalische Chemie*, 221(5), 597–607.

- Labrada, R., Caseley, J. C., & Parker, C. (1996). *Manejo de malezas para países en desarrollo* (FAO (ed.)). FAO. <https://books.google.com.co/books?id=i7inikglZZEC>
- Leal, W., Restrepo, G., & Bernal, A. (2012). *A network study of chemical elements: from binary compounds to chemical trends*. MATCH Commun Math Comput Chem, 68, 417–442.
- López, C. P. (2005). *Métodos estadísticos avanzados SPSS*. Thomson. <https://books.google.com.co/books?id=aT21YbVLghwC>
- Madrid, U. C. I. d. (2009). *Análisis de Cluster y Árboles de Clasificación*. Universidad Carlos III, Madrid, España.
- Mallory-Smith, C. A., & Retzinger, E. J. (2003). *Revised classification of herbicides by site of action for weed resistance management strategies*. Weed Technology, 17(3), 605–619.
- Mateos, J. S., & Sánchez, J. M. (2019). *Efectos Del Herbicida Glifosato A Bajas Concentraciones: Alteraciones En Oenocitos Y Ovarios De Drosophila Melanogaster*. Consejo Asesor, 22, 27–34.
- Mejía, M. V., & Agudelo-Londoño, S. M. (2019). *El glifosato alza el vuelo. Análisis retórico del discurso en la prensa nacional de Colombia (2018-2019)*. Signo y Pensamiento, 38(75).
- Mendelson, B. (1990). *Introduction to Topology*. Dover Publications. <https://books.google.com.co/books?id=vQPwuxcVABYC>
- Méndez, A. (2018, November 1). *El glufosinato de amonio, ¿la opción para remplazar el glifosato?* Justicia. <https://www.eltiempo.com/justicia/conflicto-y-narcotrafico/esta-seria-la-molecula-que-podria-reemplazar-el-glifosato-288806>

- Moreno, A. H. (2000). *La clasificación numérica y su aplicación en la ecología*. Instituto Tecnológico de Santo Domingo. <https://books.google.com.co/books?id=1aH3-OzrlY0C>
- Munkres, J. R. (2002). *Topología*. Pearson/Prentice-Hall. <https://books.google.com.co/books?id=k5WsQAAACAAJ>
- Muñoz Quevedo, J. M. (2003). *Topología básica*.
- Nations, F. A. O. U. (2007). *Sistema Integrado De Censos Y Encuestas Agropecuarios: Programa Mundial Del Censo Agropecuario 2010 Coleccion Fao: Desarrollo Estadistico N.11*. FAO. https://books.google.com.co/books?id=JIIvEvEL_2YC
- Neumeister, L., publicación conjunta entre Testbiotech, U., GeneWatch, U. K., & Network, P. A. (2014). *Riesgos Del Herbicida 2, 4 - D*. Pesticides Action Network, 1–31.
- Nivia, E. (2000). *Efectos sobre la salud y el ambiente de herbicidas que contienen glifosato*. Recuperado de [Http://Www. Glifocidio. Org/Docs/Impactos% 20generales/Ig1. Pdf](Http://Www.Glifocidio.Org/Docs/Impactos%20generales/Ig1.Pdf).
- Otto, M. (2016). *Chemometrics: Statistics and Computer Application in Analytical Chemistry*. Wiley. <https://books.google.com.co/books?id=0hotDQAAQBAJ>
- Parry, K. P. (1989). *Herbicide use and invention*. *Herbicides and Plant Metabolism*. Cambridge University Press, Cambridge, 1–20.
- Penny, D., & Hendy, M. D. (1985). *The use of tree comparison metrics*. *Systematic Zoology*, 34(1), 75–82.
- Perea, J. (2006). *Análisis clúster*. Curso de postgrado en herramientas estadísticas avanzadas. Universidad de Córdoba, España. Disponible en:

http://www.uco.es/zootecniaygestion/img/pictorex/09_13_25_sesion_8.pdf

- Poleshchuk, O. K., Yureva, A. G., Filimonov, V. D., & Frenking, G. (2009). *Study of a surface of the potential energy for processes of alkanes free-radical iodination by B3LYP/DGDZVP method*. Journal of Molecular Structure: THEOCHEM, 912(1–3), 67–72.
- Restrepo, G. (2005). *From trees (dendrograms and consensus trees) to topology*. Croatica Chemica Acta, 78(2), 275–281.
- Restrepo, G. (2013a). *Los elementos químicos, su matemática y relación con el sistema periódico*. BISTUA Revista De La Facultad De Ciencias Básicas, 2(1).
- Restrepo, G. (2013b). *Química matemática y la Universidad de Pamplona*. BISTUA Revista De La Facultad De Ciencias Básicas, 3(1).
- Restrepo, G., Mesa, H., & Llanos, E. J. (2007). *Three dissimilarity measures to contrast dendrograms*. Journal of Chemical Information and Modeling, 47(3), 761–770.
- Restrepo, G., Mesa, H., Llanos, E. J., & Villaveces, J. L. (2004). *Topological study of the periodic system*. Journal of Chemical Information and Computer Sciences, 44(1), 68–75.
- Restrepo, G., Mesa, H., & Villaveces, J. L. (2006). *On the topological sense of chemical sets*. Journal of Mathematical Chemistry, 39(2), 363–376.
- Riches, C. R., Knights, J. S., Chaves, L., Caseley, J. C., & Valverde, B. E. (1997). *The role of pendimethalin in the integrated management of propanil resistant Echinochloa colona in Central America*. Pesticide Science, 51(3), 341–346.
- Riley, K. E., Op't Holt, B. T., & Merz, K. M. (2007). *Critical assessment of the performance of*

density functional methods for several atomic and molecular properties. Journal of Chemical Theory and Computation, 3(2), 407–433.

Robles, E. R., & de la Cruz, R. S. (2006). *Clasificación y uso de los herbicidas por su modo de acción.* SAGARPA.

https://d1wqtxts1xzle7.cloudfront.net/38373103/Clasificacion_uso_herbicidas_enrique_robles_valentin_esqueda.pdf?1438646376=&response-content-disposition=inline%3B+filename%3DCLASIFICACION_Y_USO_DE_LOS_HERBICIDAS_PO.pdf&Expires=1612341280&Signature=OthlGnB

Schmidt, R. R. (2005). *Clasificación de los herbicidas según su modo de acción.* Comité de Acción Contra La Resistencia a Herbicidas (HRAC).[En Línea];(Www. Plantprotection.Org/HRAC/Spanish_classification. Htm, Documento 11 Febrero 2014).

Schmidt, R. R. (1997). *HRAC classification of herbicides according to mode of action.* 1997 Brighton Crop Protection Conference: Weeds. Proceedings of an International Conference, Brighton, UK, 17-20 November 1997., Volume 3, 1133–1140.

Sharaf, M. A., Illman, D. L., & Kowalski, B. R. (1986). *Chemometrics (Vol. 9).* John Wiley & Sons.

Siiskonen, A., & Priimagi, A. (2017). *Benchmarking DFT methods with small basis sets for the calculation of halogen-bond strengths.* Journal of Molecular Modeling, 23(2), 50.

Sneath, P. H. A. (2000). *Numerical classification of the chemical elements and its relation to the periodic system.* Foundations of Chemistry, 2(3), 237–263.

- Solomon, E. I., Brunold, T. C., Davis, M. I., Kemsley, J. N., Lee, S.-K., Lehnert, N., Neese, F., Skulan, A. J., Yang, Y.-S., & Zhou, J. (2000). *Geometric and electronic structure/function correlations in non-heme iron enzymes*. *Chemical Reviews*, 100(1), 235–350.
- SPSS, I. (2017). *IBM SPSS 25.0 for Windows [Computer software]*. Author Chicago, IL.
- Striegel, A., Lawrence, N. C., Knezevic, S. Z., Krumm, J. T., Hein, G., & Jhala, A. J. (2020). *Control of glyphosate/glufosinate-resistant volunteer corn in corn resistant to aryloxyphenoxypropionates*. *Weed Technology*, 34(3), 309–317.
- Trudeau, R., & Trudeau, R. J. (1993). *Introduction to graph theory, ser.* Dover books on advanced mathematics. New York: Dover Pub.
- Trujillo-González, D. E., Ramírez-Romero, M. C., Rodríguez, J. I., & Uribe, E. A. (2016). *A DFT-chemotopological study on the 3D transition metal oxides and dioxygen complexes*. *Chemical Physics Letters*, 649, 103–110.
- Uribe, E. A., Ramírez-Romero, M. C., & Trujillo-González, D. E. (2020). *Estudio teórico y quimi-topológico de sustancias químicas TMO_n (TM= Sc-Zn y N= 1-4)*.
- Uribe Guerrero, E. A. (2011). *Quimi-topología De Las Interacciones Entre Elementos Del Cuarto Periodo Y El Hidrogeno Estructura Y Enlace Quimico*. Universidad Industrial de Santander, Escuela De Quimica.
- Vázquez, M. A., Maturano, E., Etchegoyen, A., Difilippo, F. S., & Maclean, B. (2017). *Asociación entre cáncer y exposición ambiental a glifosato*. *International Journal of Clinical Medicine*, 8(2), 73–85.

- Villalba, A. (2009). *Resistencia a herbicidas. Glifosato*. Ciencia, Docencia y Tecnología, 20(39), 169–186.
- Willett, P., Barnard, J. M., & Downs, G. M. (1998). *Chemical similarity searching*. Journal of Chemical Information and Computer Sciences, 38(6), 983–996.
- Worthing, C. R., & Hance, R. (1991). *The Pesticide manual*. 9th Ed. A World Compendium. The British Crop Protection Council. Surrey UK, 763–764.

Apéndices

Apéndice 1. Grupos químicos de herbicidas y sus puntos de acción

Grupos	Ejemplos	Acción Principal Probable	Función Afectada
Bipiridilos	paraquat	Transporte fotosintético de electrones desviado en el fotosistema I	Fotosíntesis
Anilidas	propamil	Transporte fotosintético de electrones inhibido en el fotosistema II	Fotosíntesis
Nitrilos	bromoxinil	Transporte fotosintético de electrones inhibido en el fotosistema II	Fotosíntesis
Triazinas	atrazina	Transporte fotosintético de electrones inhibido en el fotosistema II	Fotosíntesis
Triazinonas	metribuzin	Transporte fotosintético de electrones inhibido en el fotosistema II	Fotosíntesis
Ureas	diuron	Transporte fotosintético de electrones inhibido en el fotosistema II	Fotosíntesis
Uracilos	lenacil	Transporte fotosintético de electrones inhibido en el fotosistema II	Fotosíntesis
Difeniléteres	acifluorfen	Inhibida la síntesis de clorofila	Fotosíntesis
Anilidas	diflufenican	Bloqueada la síntesis de carotenoides	Fotosíntesis
Piridazinonas	norflurazon	Bloqueada la síntesis de carotenoides	Fotosíntesis
Ésteres de ácidos ariloxi-fenoxi-alcanoicos	dichlofop-metil	Inhibida la biosíntesis de lípidos	Crecimiento
Ácidos haloalifáticos	dalapon	Inhibida la biosíntesis de lípidos	Crecimiento
Oximas	Sethoxudim	Inhibida la biosíntesis de lípidos	Crecimiento
Tiolcarbamatos	EPTC	Inhibida la biosíntesis de lípidos	Crecimiento
Amidas	difenamida	Inhibida la división celular	Crecimiento
Carbamatos	asulam	Inhibida la división celular	Crecimiento
Cloroacetanilidas	alachlor	Inhibida la división celular	Crecimiento
Dinitroanilinas	pendimetalina	Inhibida la división celular	Crecimiento
Ácidos arilcarboxílicos	dicamba	acción sobre el ácido Indol-acético	Crecimiento
Ácidos (ariloxi) alcanoicos	2,4-D, MCPA	acción sobre el ácido Indol-acético	Crecimiento
Ácidos quinolinacarboxílicos	quinclorac	acción sobre el ácido Indol-acético	Crecimiento
Nitrilos	bromoxinil	desacoplada la fosforilación oxidativa	Crecimiento
Imidazolinonas	imazethapyr	Bloqueada la síntesis de aminoácidos de cadena ramificada	Crecimiento
Sulfonilureas	metsulfuron	Bloqueada la síntesis de aminoácidos de cadena ramificada	Crecimiento
Compuestos Organofosforados	glifosato	Bloqueada la síntesis de aminoácidos aromáticos	Crecimiento
	glufosinato	Bloqueada la síntesis de glutamina	Crecimiento

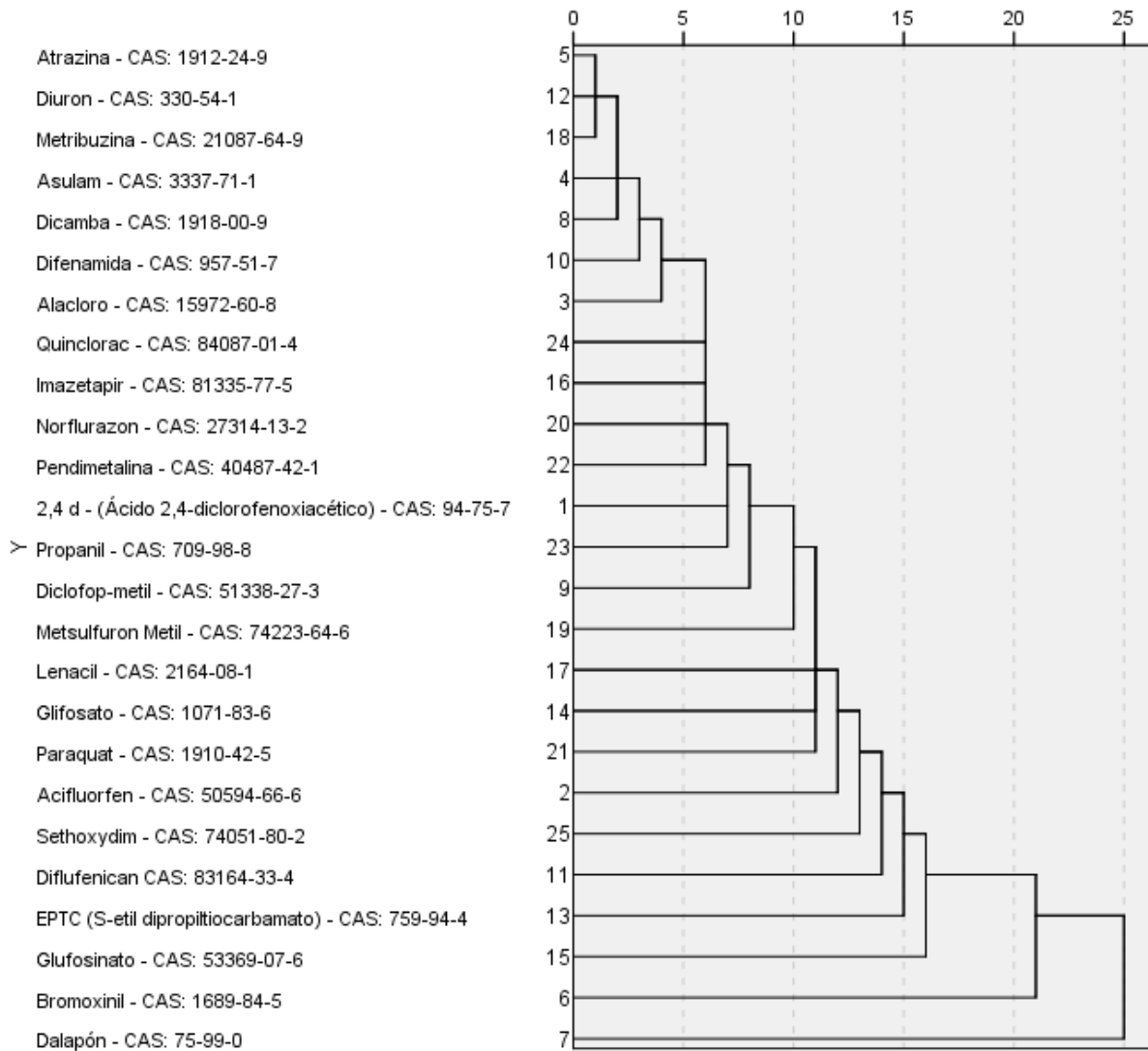
Adaptado de: "Manejo de malezas para países en desarrollo", por (Nations et al. 1996)

Apéndice 2. *Familia química de herbicidas.*

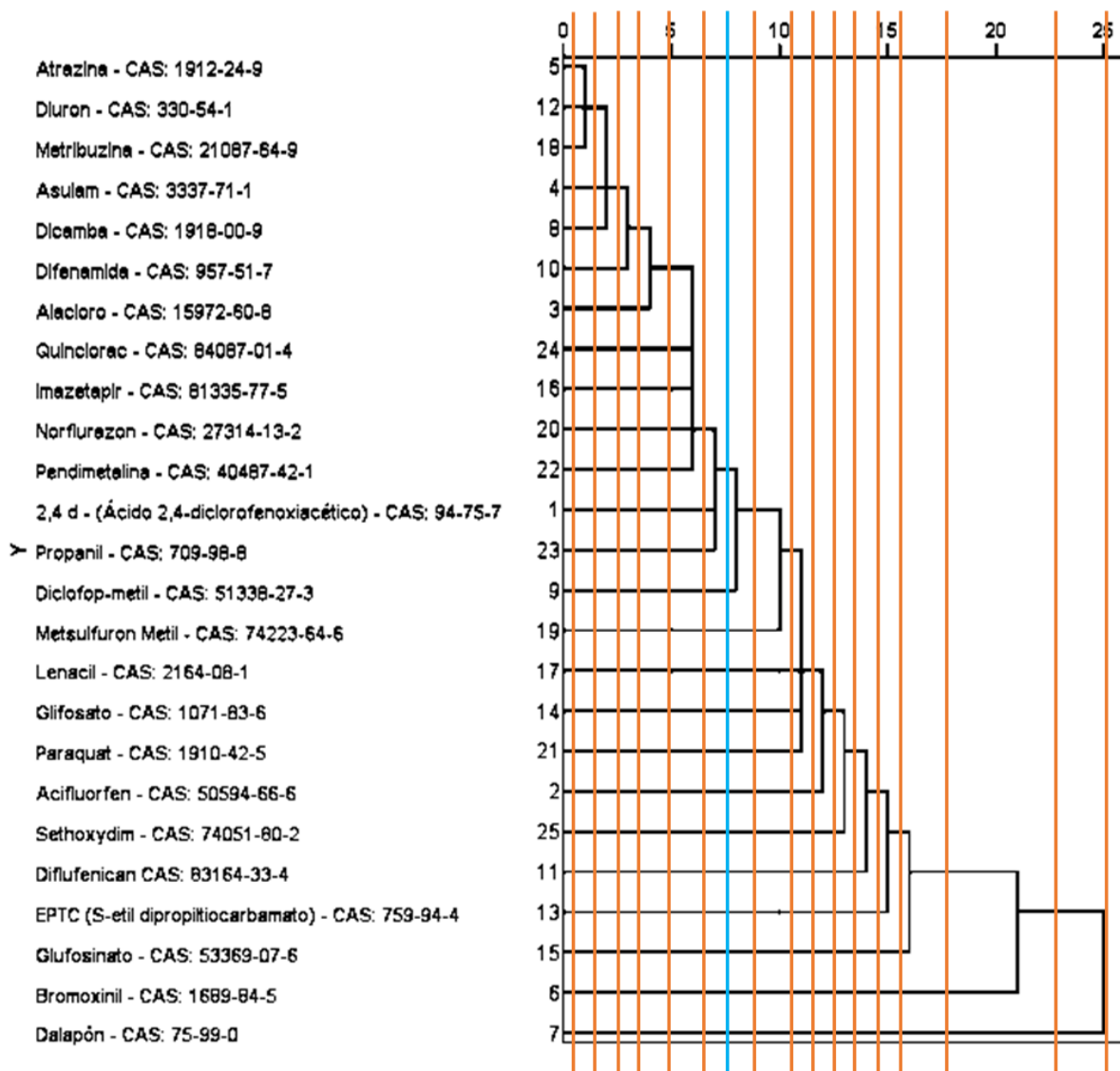
Acetamidas	Isoxazolidinonas
Acidos arilaminopropiónicos	N-fenilphthalimidas
Acidos bencenodicarboxílicos	Nitrilos
Acidos clorocarbónicos	Organoarseniacaes
Acidos fenoxicarboxílicos	Oxadiazoles
Acidos fosfínicos	Oxazolidinedionas
Acidos piridincarboxílicos	Oxyacetamidas
Acidos quinolincarboxílicos	Phthalamatos
Amidas	Piridinas
Ariloxifenoxipropianatos	Pyrazoles
Benzamidas	Pyridazinonas
Benzothiadiazinonas	Pyridinecarboxamidas
Bipiridilios	Pyrimidindionas
Carbamatos	Pyrimidinyl(thio)benzoatos
Ciclohexanodionas	Sulfonilureas
Cloroacetamidas	Tetrazolinonas
Difeniléteres	Thiocarbamatos
Dinitroanilinas	Tiadiazoles
Dinitrofenoles	Triazinas
Fenilpyrazoles	Triazinonas
Fenil-pyridazinas	Triazoles
Fenyl-carbamatos	Triazolinonas
Fosforoamidas	Triazolocarboxamidas
Fosforodithioatos	Triazolopyrimidinas
Glicinas	Triketonas
Imidazolinonas	Ureas
Isoxasoles	

Adaptado de “Herbicidas, modos y mecanismos de acción en las plantas”, por (Álvaro 2007)

Apéndice 3. *Dendrograma con Medida de similitud Euclidiana y Método de agrupamiento Centroide.*



Apéndice 4. Cortes en dendrograma con Medida de similitud Euclidiana y Método de agrupamiento Centroide.

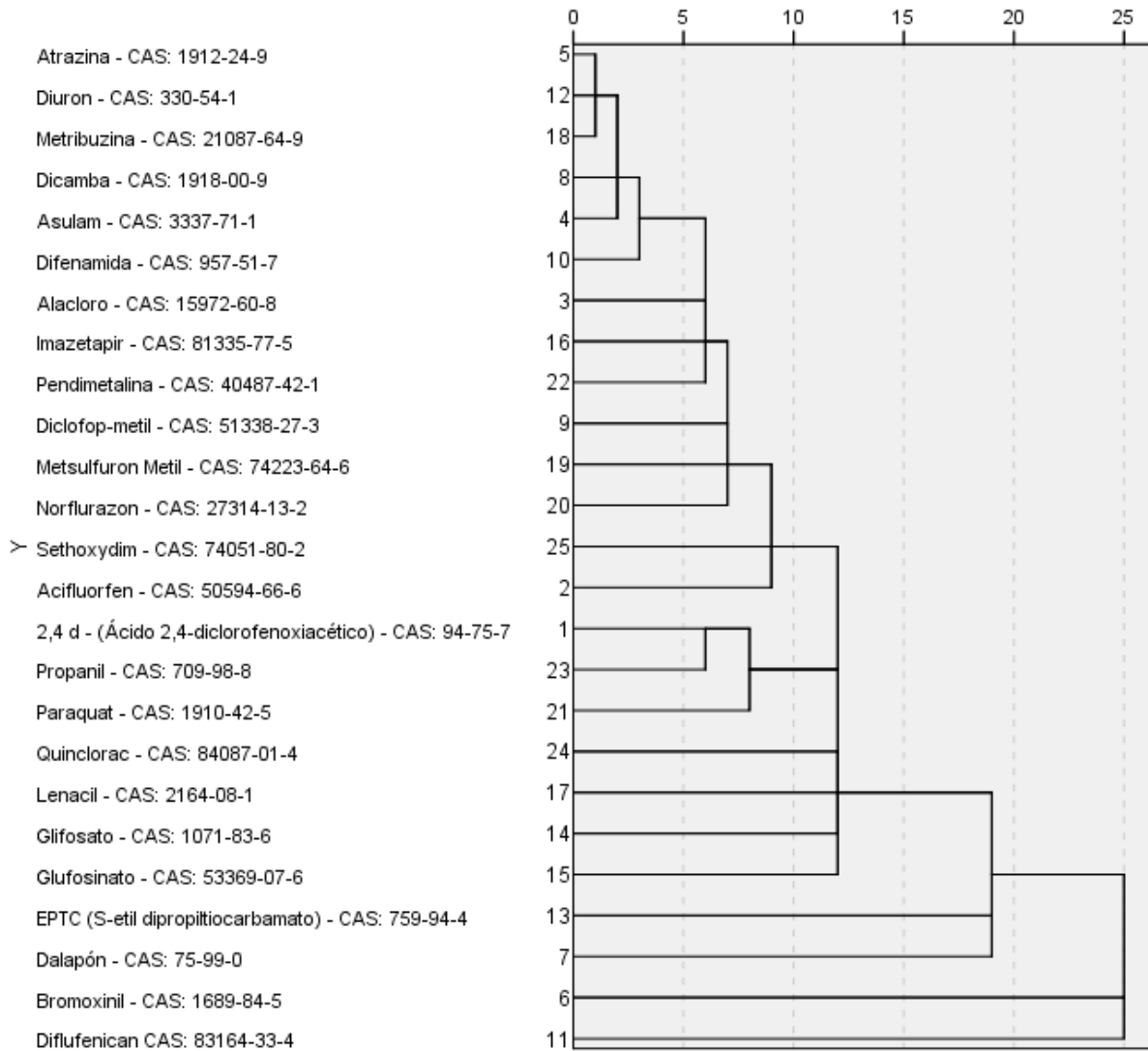


Base topológica

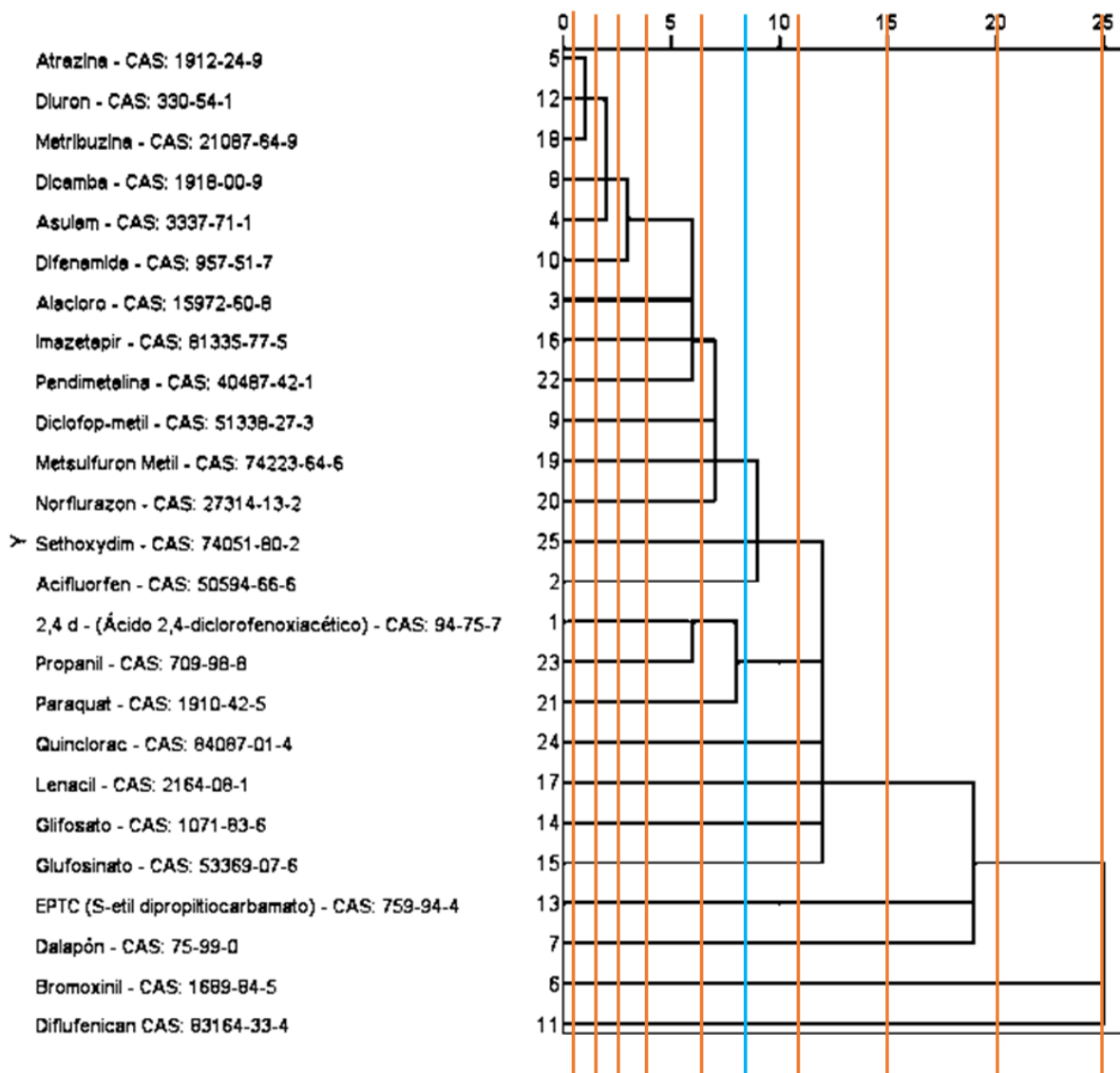
Bs= {(Atrazina, Diuron, Metribuzina, Asulam, Dicamba, Difenamida, Alacloro, Quinclorac, Imazetapir, Norflurazon, Pendimetalina, 2-4 D, Propanil) - (Diclofop-metil), (Metsulfuron metil), (Lenacil), (Glifosato), (Paraquat), (Acifluorfen), (Sethoxydim), (Diflufenican), (EPTC), (Glufosinato), (Bromoxinil), (Dalapón)}

Apéndice 5. *Determinación del número de selección S en dendrograma con Medida de similitud**Euclidiana y Método de agrupamiento Centroide.*

<i>n</i>	<i>C</i>	$\prod C_i $	<i>S</i>
1	25	$1 \times 1 = 1$	$1 \times 25 = 25$
2	23	$3 \times 1 = 3$	$3 \times 23 = 69$
3	21	$5 \times 1 = 5$	$5 \times 21 = 105$
4	20	$6 \times 1 = 6$	$6 \times 20 = 120$
5	19	$7 \times 1 = 7$	$7 \times 19 = 133$
6	15	$11 \times 1 = 11$	$11 \times 15 = 165$
7	13	$13 \times 1 = 13$	$13 \times 13 = 169$
8	12	$14 \times 1 = 14$	$14 \times 12 = 168$
9	11	$15 \times 1 = 15$	$15 \times 11 = 165$
10	8	$18 \times 1 = 18$	$18 \times 8 = 144$
11	7	$19 \times 1 = 19$	$19 \times 7 = 133$
12	6	$20 \times 1 = 20$	$20 \times 6 = 120$
13	5	$21 \times 1 = 21$	$21 \times 5 = 105$
14	4	$22 \times 1 = 22$	$22 \times 4 = 88$
15	3	$23 \times 1 = 23$	$23 \times 3 = 69$
16	2	$24 \times 1 = 24$	$24 \times 2 = 48$
17-25	1	25	$25 \times 1 = 25$

Apéndice 6. Dendrograma con Medida de similitud Euclidiana y Método de agrupamiento*Mediana.*

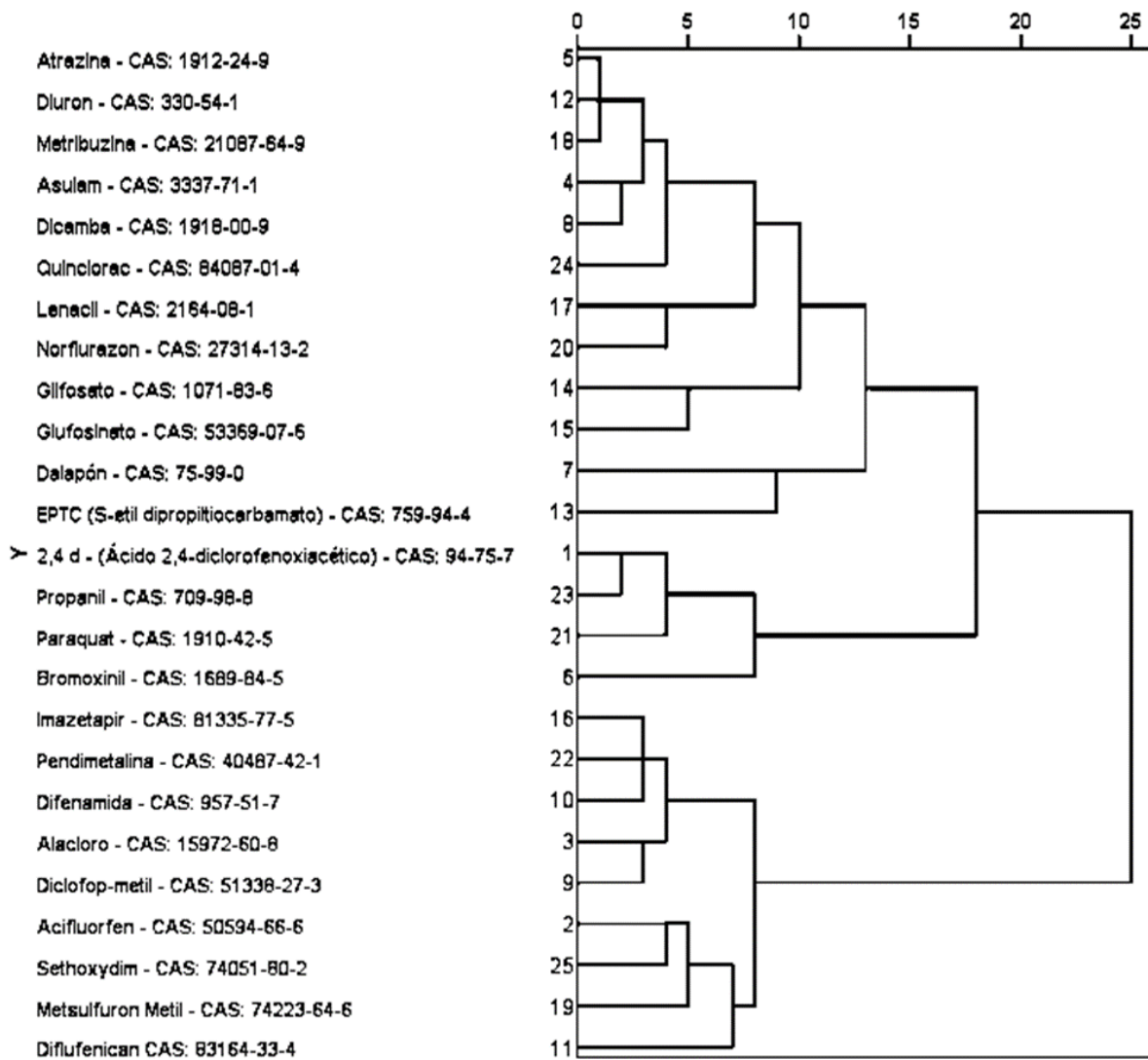
Apéndice 7. Cortes en dendrograma con Medida de similitud Euclidiana y Método de agrupamiento Mediana.



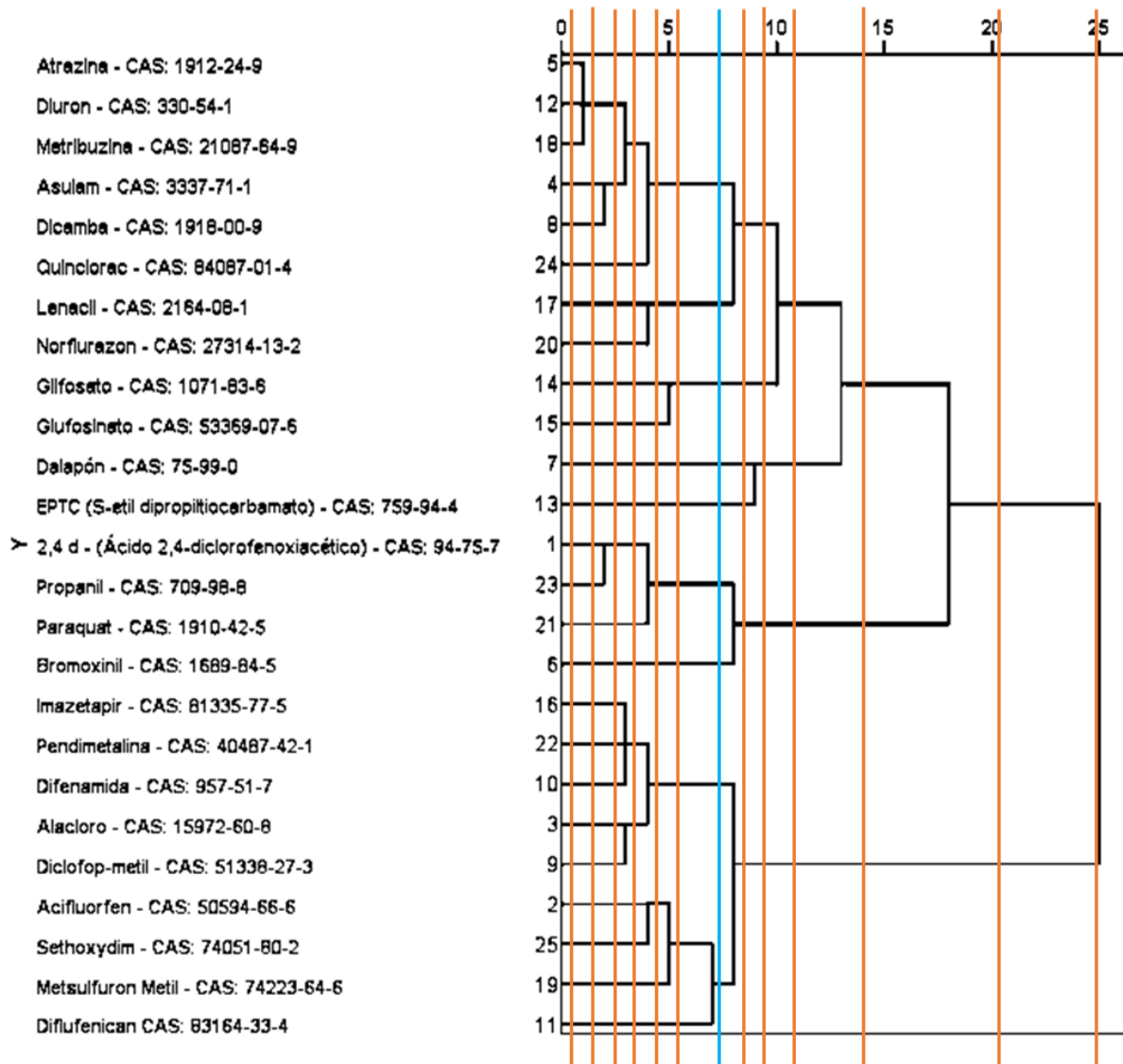
Base topológica

Bs= {(Atrazina, Diuron, Metribuzina, Dicamba, Asulam, Difenamida, Alacloro, Imazetapir, Pendimetalina, Diclofop-metil, Metsulfuron metil, Norflurazon); (Sethoxydim); (Acifluorfen); (2-4 D, Propanil, Paraquat); (Quinclorac); (Lenacil); (Glifosato); (Glufosinato); (EPTC); (Dalapón); (Bromoxinil); (Diflufenican)}

Apéndice 9. *Dendrograma con Medida de similitud Euclidiana y Método de agrupamiento Ward.*



Apéndice 10. Cortes en dendrograma con Medida de similitud Euclidiana y Método de agrupamiento Ward.



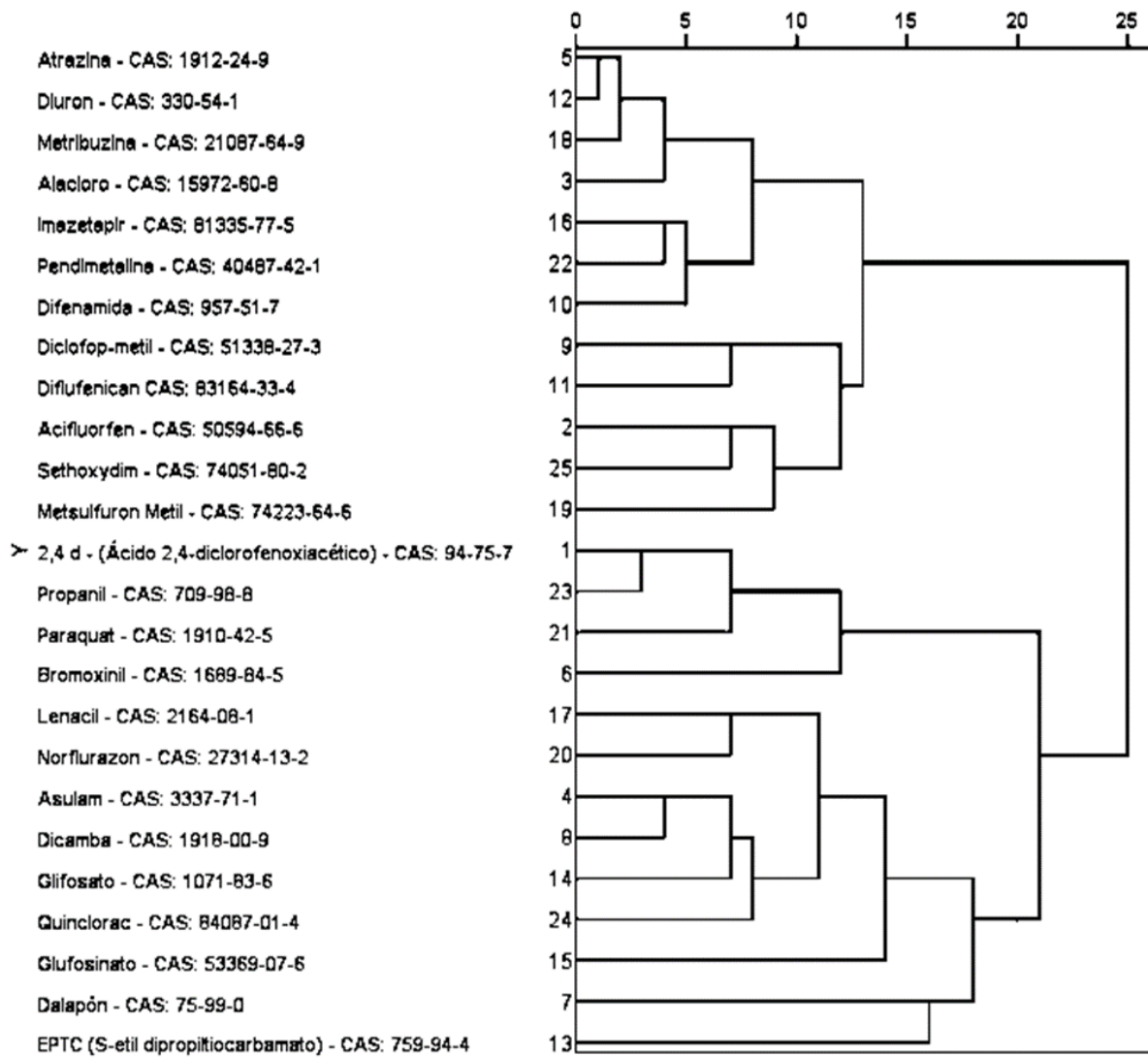
Base topológica

Bs= {(Atrazina, Diuron, Metribuzina, Asulam, Dicamba, Quinclorac); (Lenacil, Norflurazon); (Glifosato, Glufosinato); (Dalapón); (EPTC); (2-4 D; Propanil, Paraquat); (Bromoxinil); (Imazetapir, Pendimetalina, Difenamida, Alacloro, Diclofop-metil); (Acifluorfen, Sethoxydim, Metsulfuron Metil, Diflufenican)}

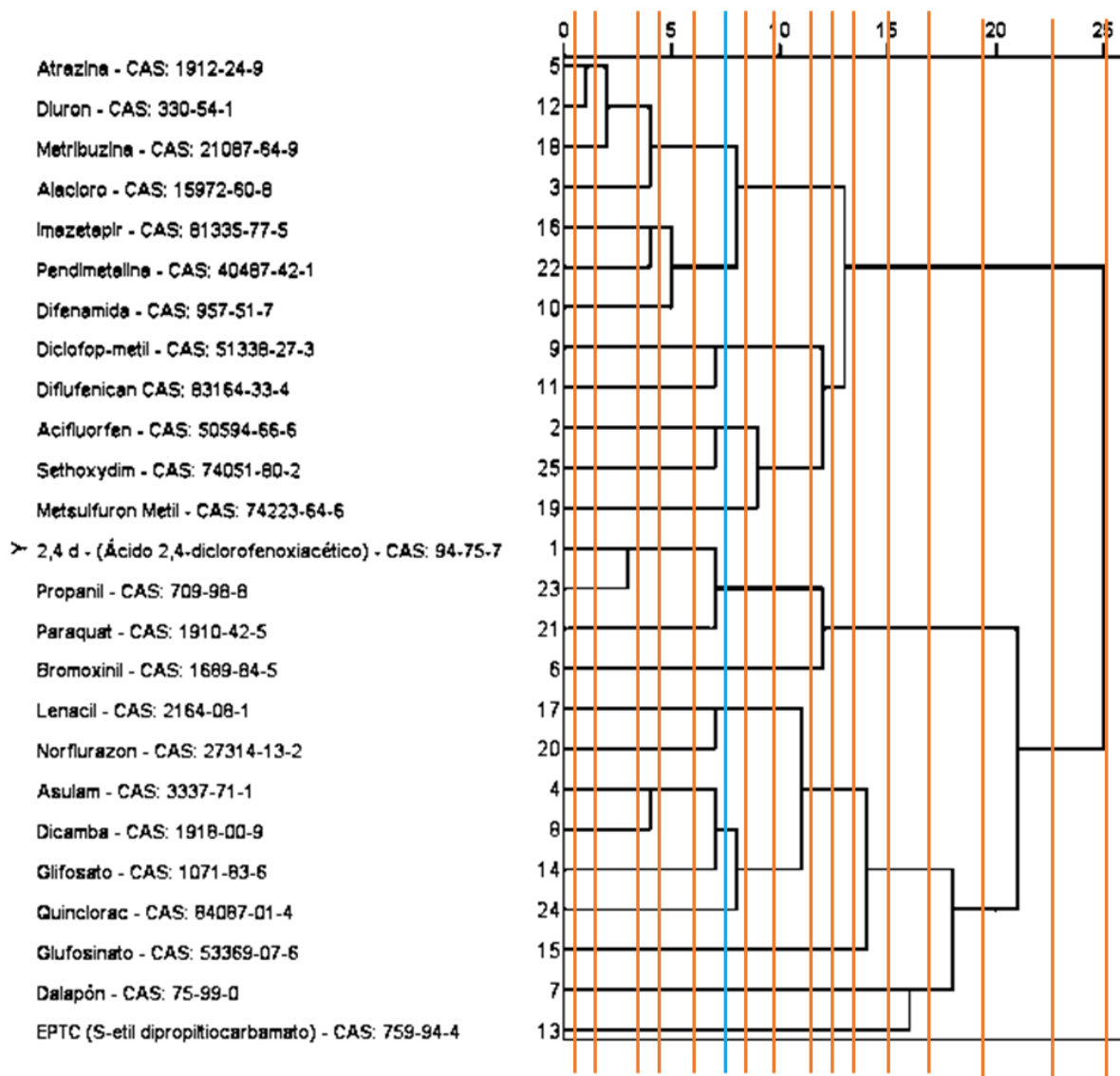
Apéndice 11. *Determinación del número de selección S en dendrograma con Medida de similitud Euclidiana y Método de agrupamiento Ward.*

n	C	$\prod_i C_i $	S
1	25	$1 \times 1 = 1$	$1 \times 25 = 25$
2	22	$3 \times 1 = 3$	$3 \times 22 = 66$
3	21	$3 \times 2 \times 1 \times 1 \times 1 \times 1 \times 1 \times 1 \times 1 \times 1 \times 2 \times 1 \times 1 \times 1 \times 1 \times 1 \times 1 \times 1 \times 1 \times 1 \times 1 \times 1 \times 1 \times 1 \times 1 \times 1 = 12$	$12 \times 21 = 252$
4	17	$5 \times 1 \times 1 \times 1 \times 1 \times 1 \times 1 \times 1 \times 2 \times 1 \times 1 \times 1 \times 3 \times 2 \times 1 \times 1 \times 1 \times 1 \times 1 \times 1 \times 1 \times 1 \times 1 \times 1 \times 1 \times 1 \times 1 = 60$	$60 \times 17 = 1020$
5	12	$6 \times 2 \times 1 \times 1 \times 1 \times 1 \times 3 \times 1 \times 5 \times 2 \times 1 \times 1 \times 1 \times 1 \times 1 \times 1 \times 1 \times 1 \times 1 \times 1 \times 1 \times 1 \times 1 \times 1 \times 1 \times 1 \times 1 = 360$	$360 \times 12 = 4320$
6	10	$6 \times 2 \times 2 \times 1 \times 1 \times 3 \times 1 \times 5 \times 3 \times 1 \times 1 \times 1 \times 1 \times 1 \times 1 \times 1 \times 1 \times 1 \times 1 \times 1 \times 1 \times 1 \times 1 \times 1 \times 1 \times 1 \times 1 \times 1 = 1080$	$1080 \times 10 = 10800$
7	9	$6 \times 2 \times 2 \times 1 \times 1 \times 3 \times 1 \times 5 \times 4 = 1440$	$1440 \times 9 = 12960$
8	6	$8 \times 2 \times 1 \times 1 \times 4 \times 9 = 576$	$576 \times 6 = 3456$
9	5	$8 \times 2 \times 2 \times 4 \times 9 = 1152$	$1152 \times 5 = 5760$
10	4	$10 \times 2 \times 4 \times 9 = 720$	$720 \times 4 = 2880$
11	3	$12 \times 4 \times 9 = 432$	$432 \times 3 = 1296$
12	2	$16 \times 9 = 144$	$144 \times 2 = 288$
13-25	1	25	$25 \times 1 = 25$

Apéndice 12. *Dendrograma con Medida de similitud Euclidiana y Método de agrupamiento Vecino más lejano.*



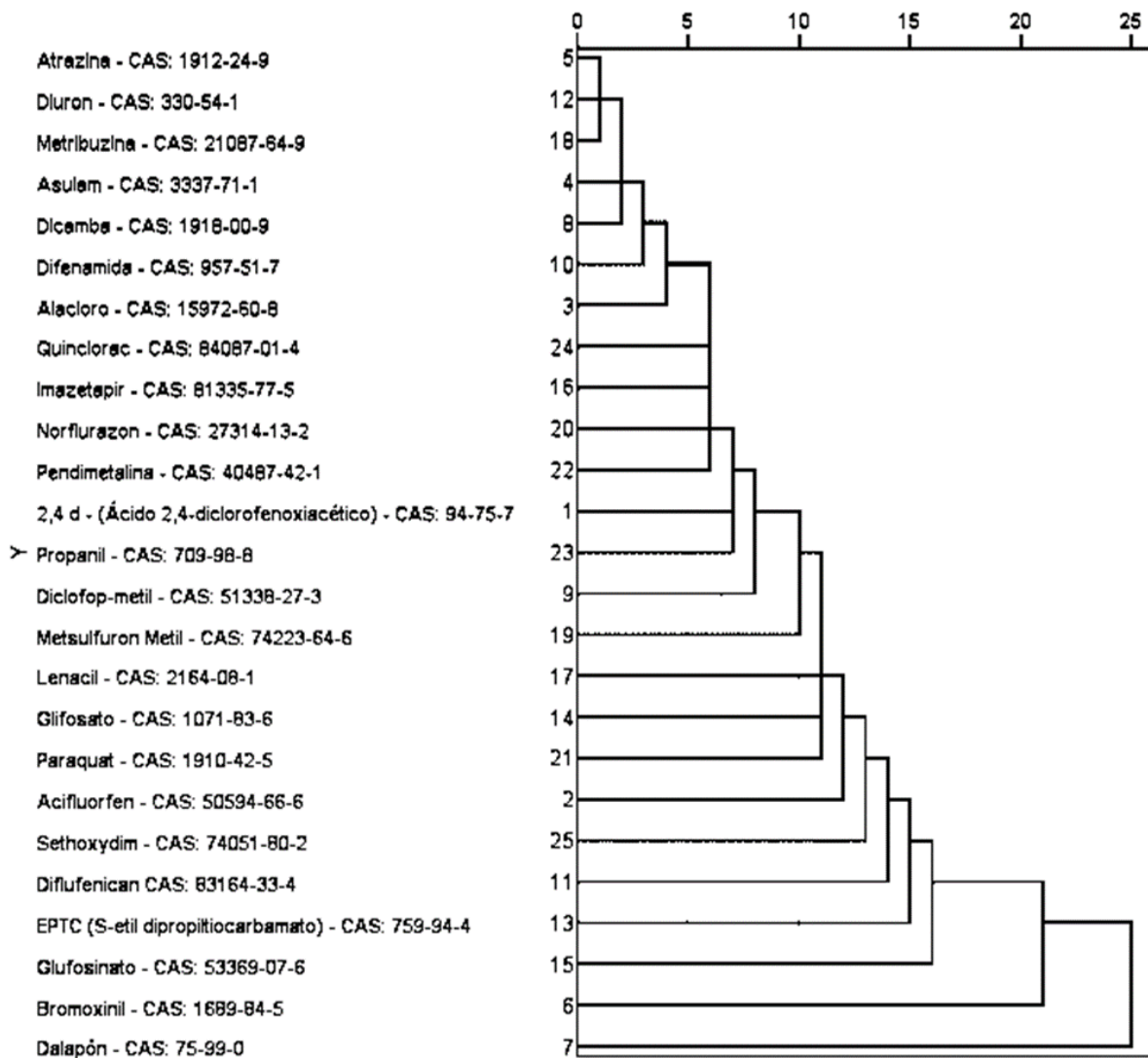
Apéndice 13. Cortes en dendrograma con Medida de similitud Euclidiana y Método de agrupamiento Vecino más lejano.



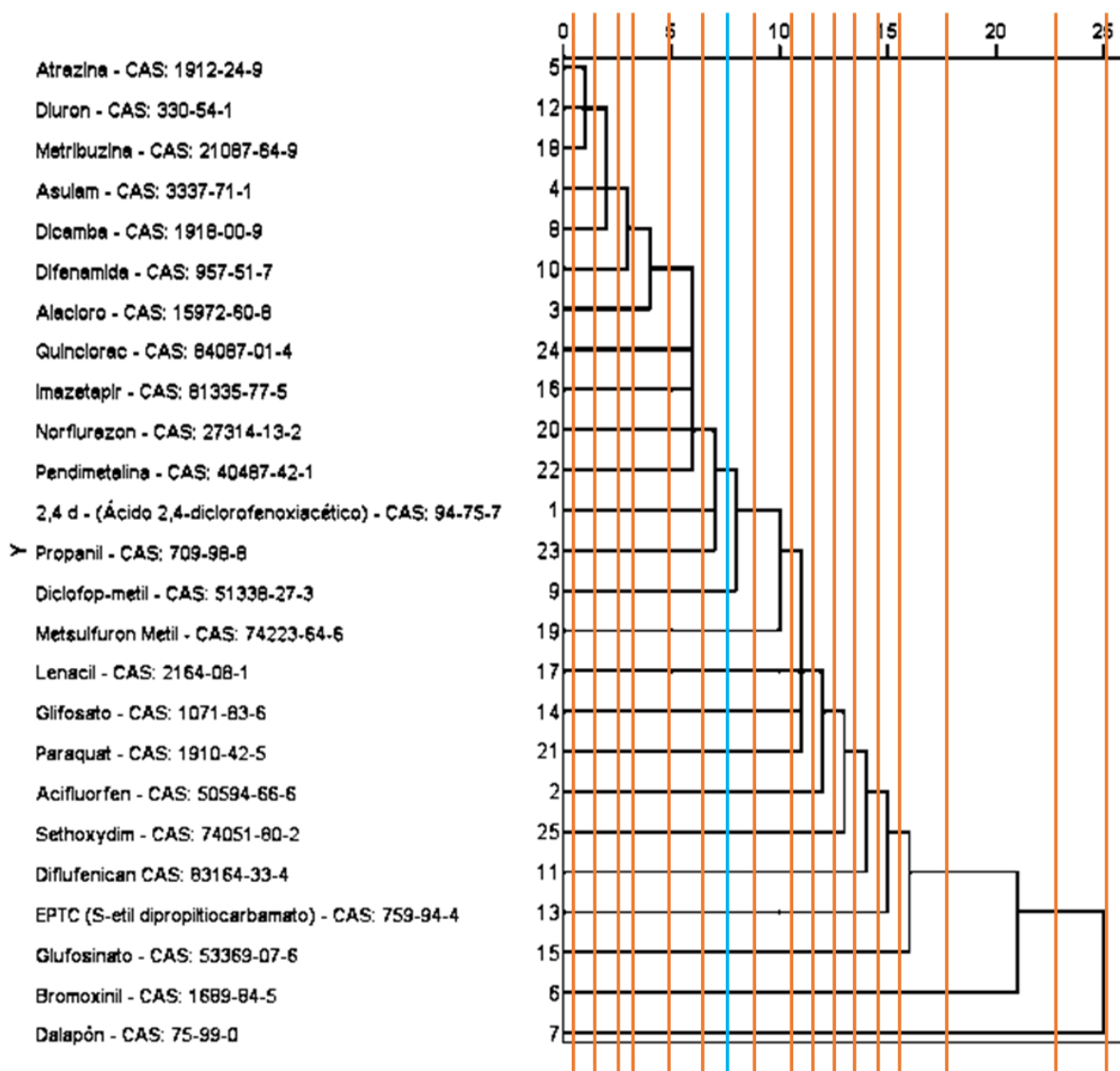
Base topológica

$B_s = \{(Atrazina, Diuron, Metribuzina, Alacloro); (Imazetapir, Pendimetalina, Difenamida); (Diclofop-metil, Diflufenican); (Acifluorfen, Sethoxydim); (Metsulfuron metil); (2-4D, Propanil, paraquat); (Bromoxinil); (Lenacil, Norflurazon); (Asulam, Dicamba, Glifosato); (Quinclorac); (Glufosinato); (Dalapón); (EPTC)\}$

Apéndice 15. *Dendrograma con Medida de similitud Minkowski y Método de agrupamiento Centroide.*



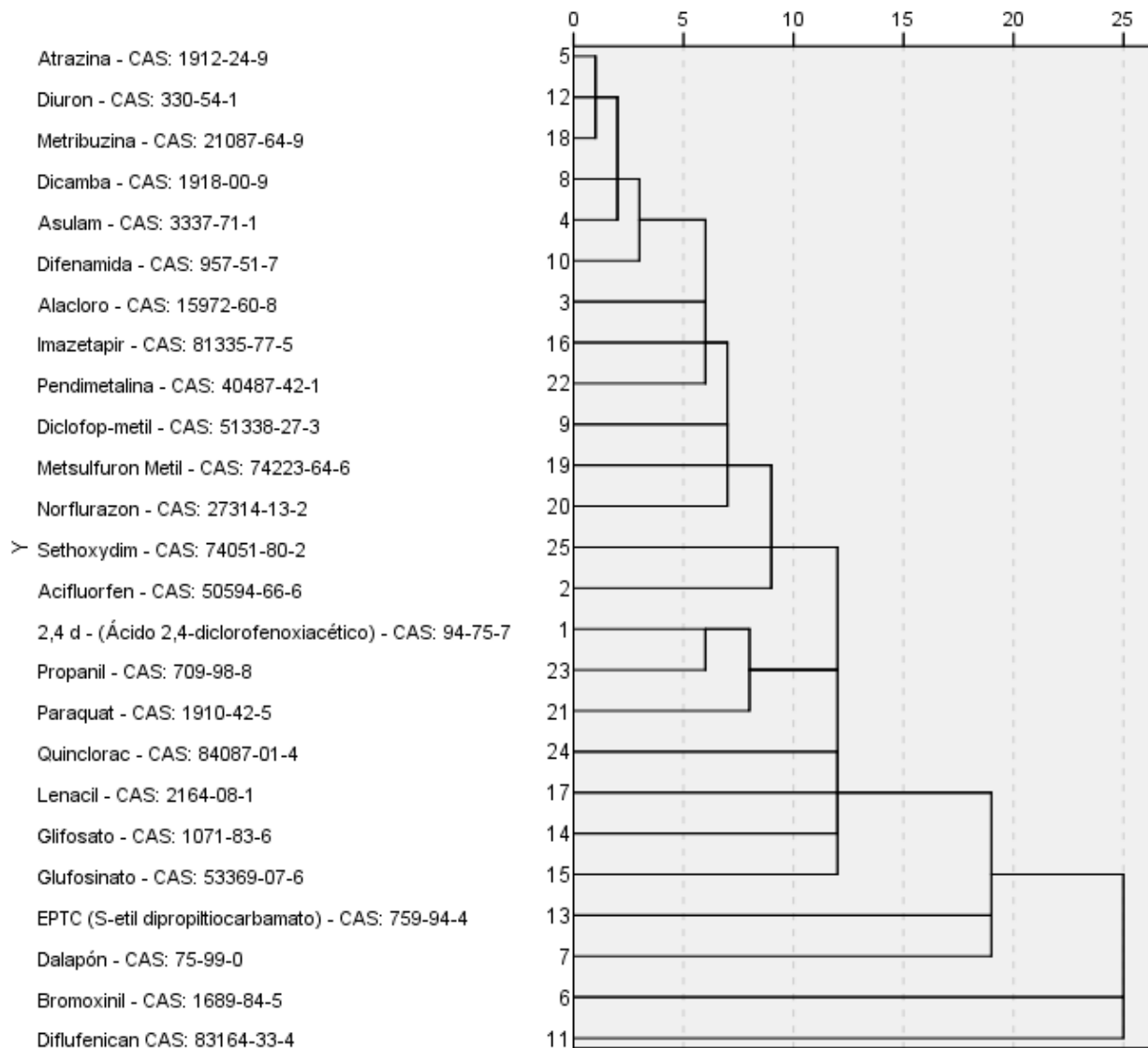
Apéndice 16. Cortes en dendrograma con Medida de similitud Minkowski y Método de agrupamiento Centroide.



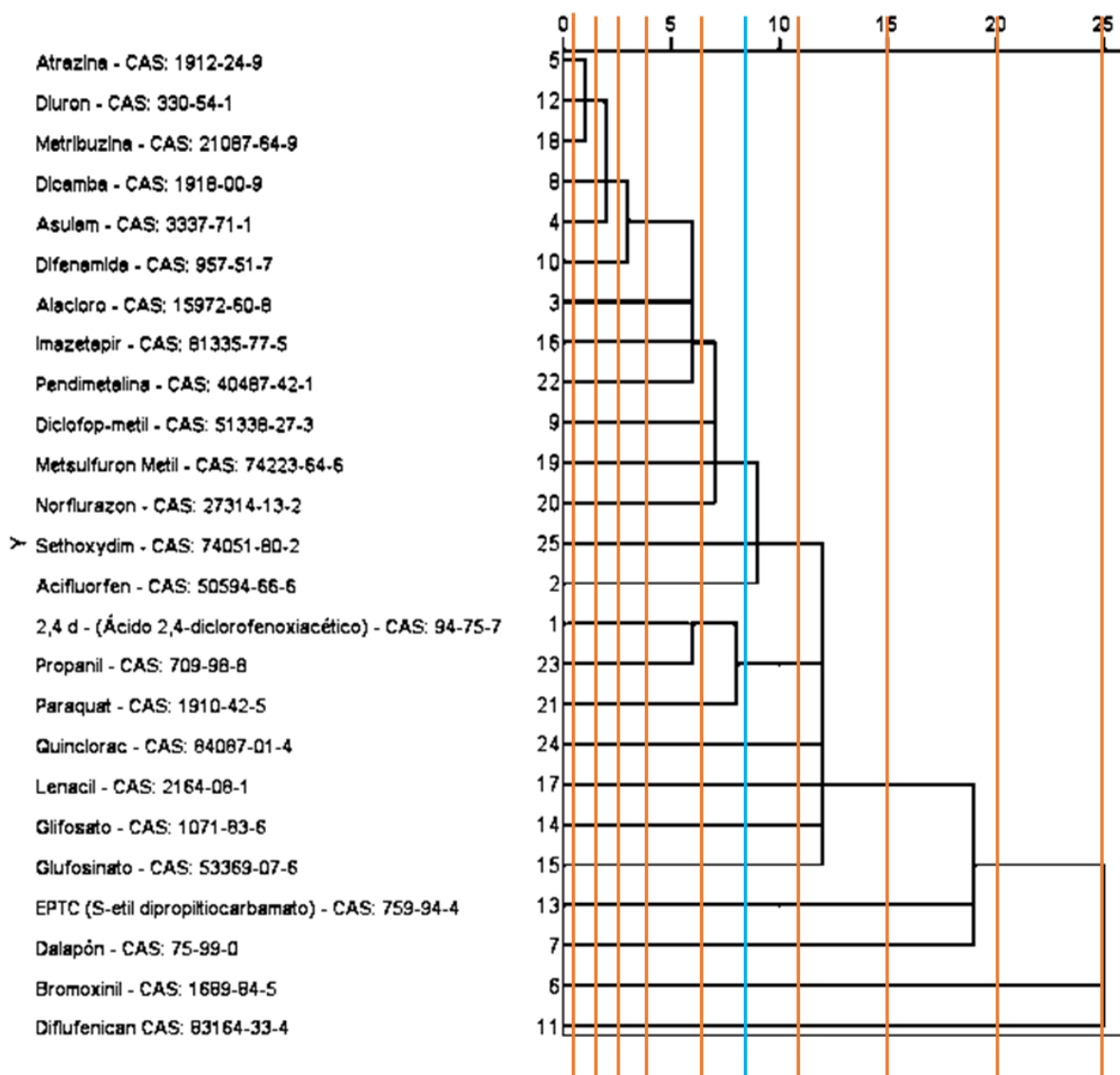
Base topológica

Bs= {(Atrazina, Diuron, Metribuzina, Asulam, Dicamba, Difenamida, Al Cloro, Quinclorac, Imazetapir, Norflurazon, Pendimetelina, 2-4 D, Propanil) - (Diclofop-metil), (Metsulfuron metil), (Lenacil), (Glifosato), (Paraquat), (Acifluorfen), (Sethoxydim), (Diflufenican), (EPTC), (Glufosinato), (Bromoxinil), (Dalapón)}

Apéndice 18. *Dendrograma con Medida de similitud Minkowski y Método de agrupamiento Mediana.*

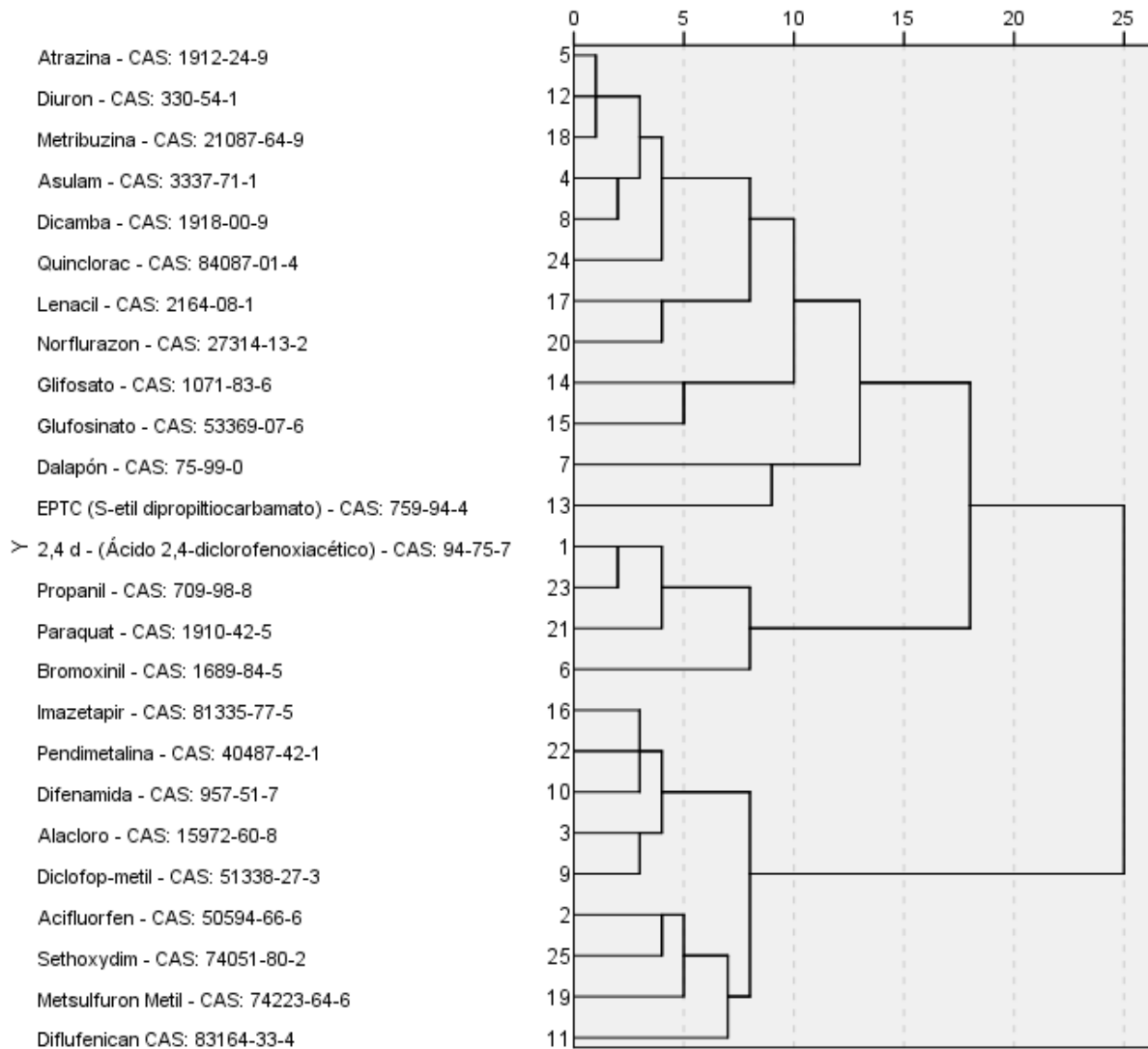


Apéndice 19. Cortes en dendrograma con Medida de similitud Minkowski y Método de agrupamiento Mediana.

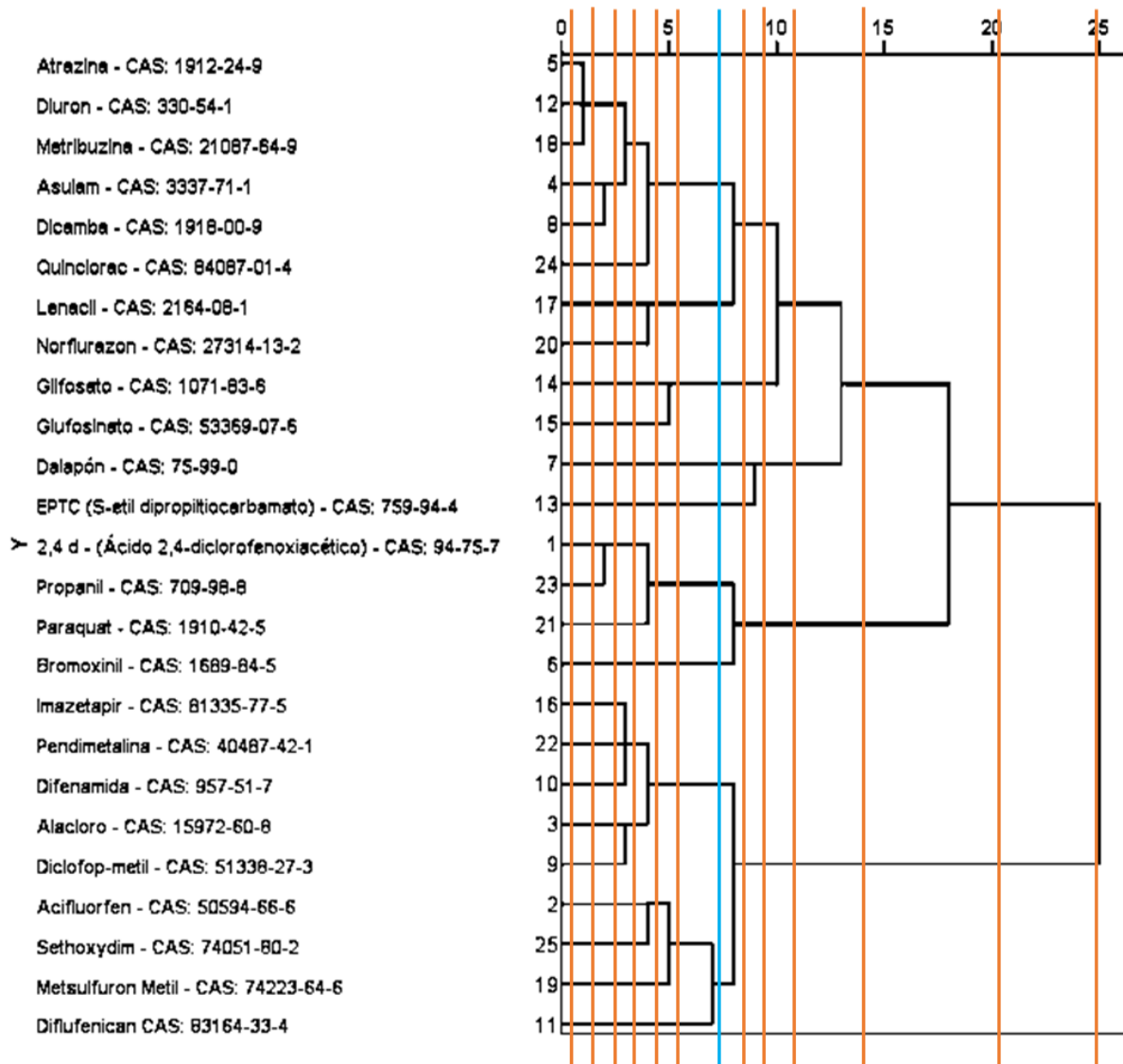


Base topológica

Bs= {(Atrazina, Diuron, Metribuzina, Dicamba, Asulam, Difenamida, Al Cloro, Imazetapir, Pendimetalina, Diclofop-metil, Metsulfuron metil, Norflurazon); (Sethoxydim); (Acifluorfen); (2-4 D, Propanil, Paraquat); (Quinclorac); (Lenacil); (Glifosato); (Glufosinato); (EPTC); (Dalapón); (Bromoxinil); (Diflufenican)}

Apéndice 21. *Dendrograma con Medida de similitud Minkowski y Método de agrupamiento Ward.*

Apéndice 22. Cortes en dendrograma con Medida de similitud Minkowski y Método de agrupamiento Ward.



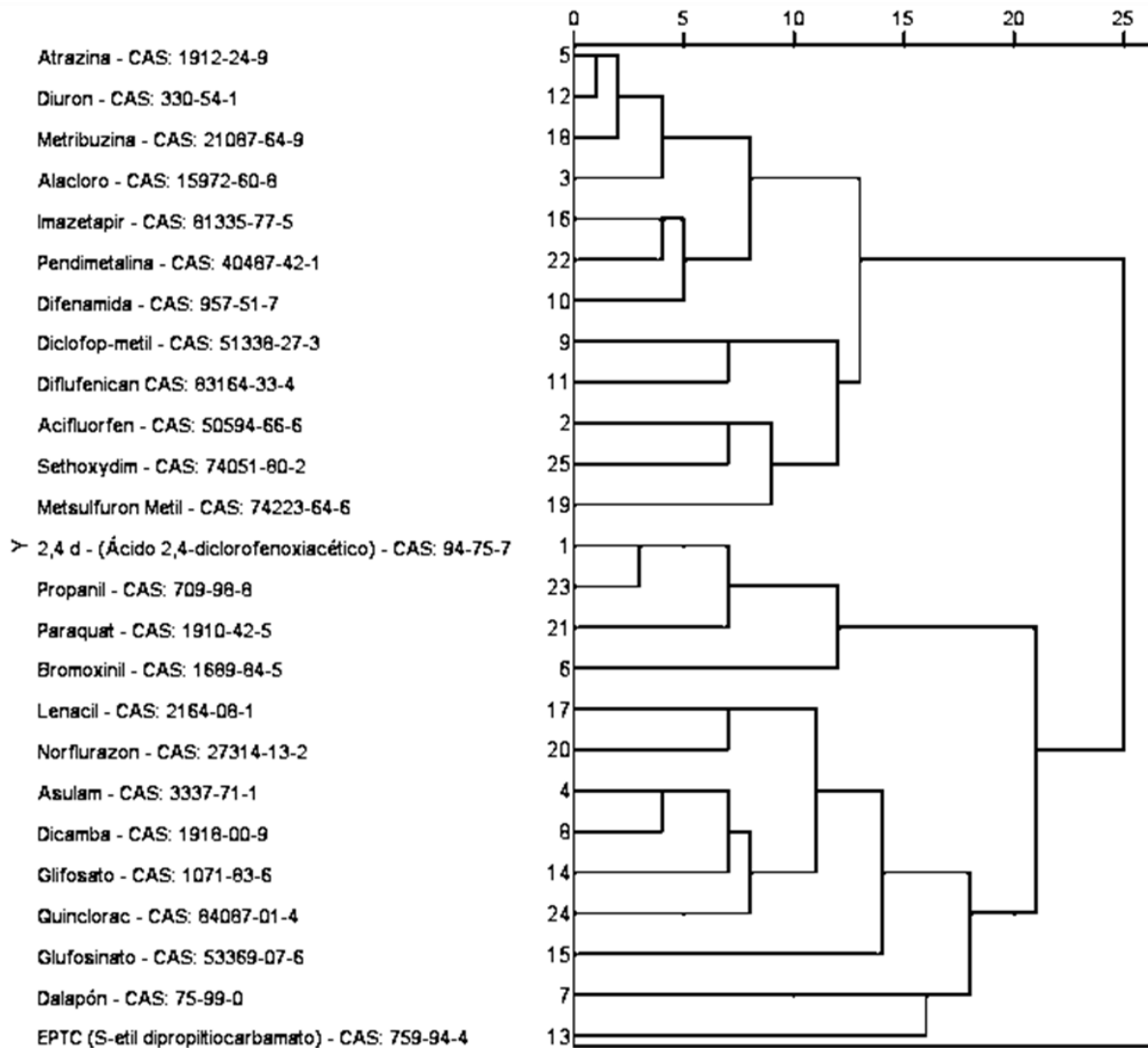
Base topológica

Bs= {(Atrazina, Diuron, Metribuzina, Asulam, Dicamba, Quinclorac); (Lenacil, Norflurazon); (Glifosato, Glufosinato); (Dalapón); (EPTC); (2-4 D; Propanil, Paraquat); (Bromoxinil); (Imazetapir, Pendimetalina, Difenamida, Al Cloro, Diclofop-metil); (Acifluorfen, Sethoxydim, Metsulfuron Metil, Diflufenican)}

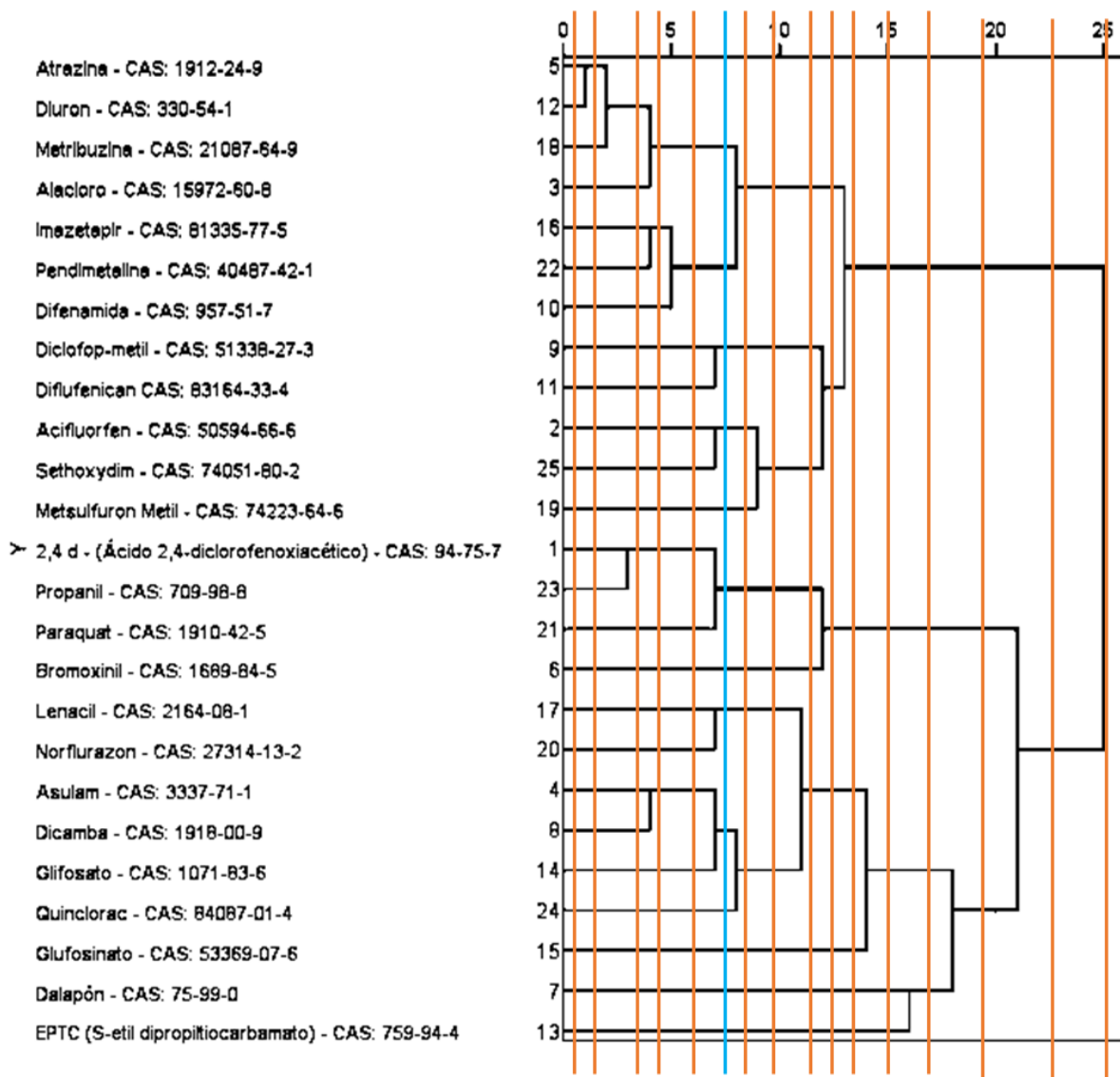
Apéndice 23. *Determinación del número de selección S en dendrograma con Medida de similitud Minkowski y Método de agrupamiento Ward.*

<i>n</i>	<i>C</i>	$\prod_i C_i $	<i>S</i>
1	25	1x1=1	1x25=25
2	22	3x1=3	3x22=66
3	21	3x2x1x1x1x1x1x1x1x1x2x1x1x1x1x1x1x1x1x1x1x1x1x1x1=12	12x21=252
4	17	5x1x1x1x1x1x1x1x1x2x1x1x3x2x1x1x1x1x1=60	60x17=1020
5	12	6x2x1x1x1x1x1x3x1x5x2x1x1=360	360x12=4320
6	10	6x2x2x1x1x3x1x5x3x1=1080	1080x10=10800
7	9	6x2x2x1x1x3x1x5x4=1440	1440x9=12960
8	6	8x2x1x1x4x9=576	576x6=3456
9	5	8x2x2x4x9=1152	1152x5=5760
10	4	10x2x4x9=720	720x4=2880
11	3	12x4x9=432	432x3=1296
12	2	16x9=144	144x2=288
13-25	1	25	25x1=25

Apéndice 24. *Dendrograma con Medida de similitud Minkowski y Método de agrupamiento Vecino más lejano.*



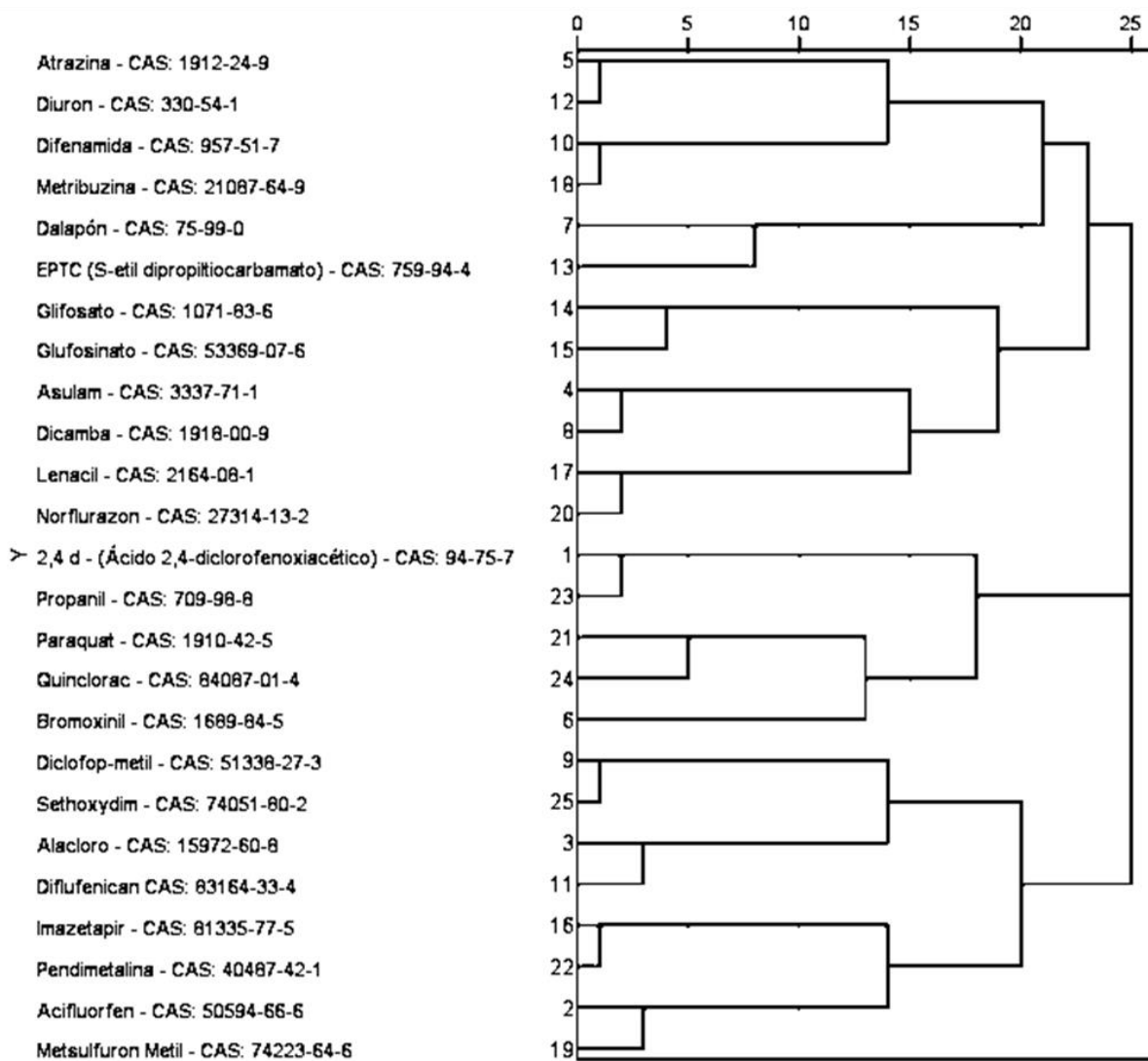
Apéndice 25. Cortes en dendrograma con Medida de similitud Minkowski y Método de agrupamiento Vecino más lejano.



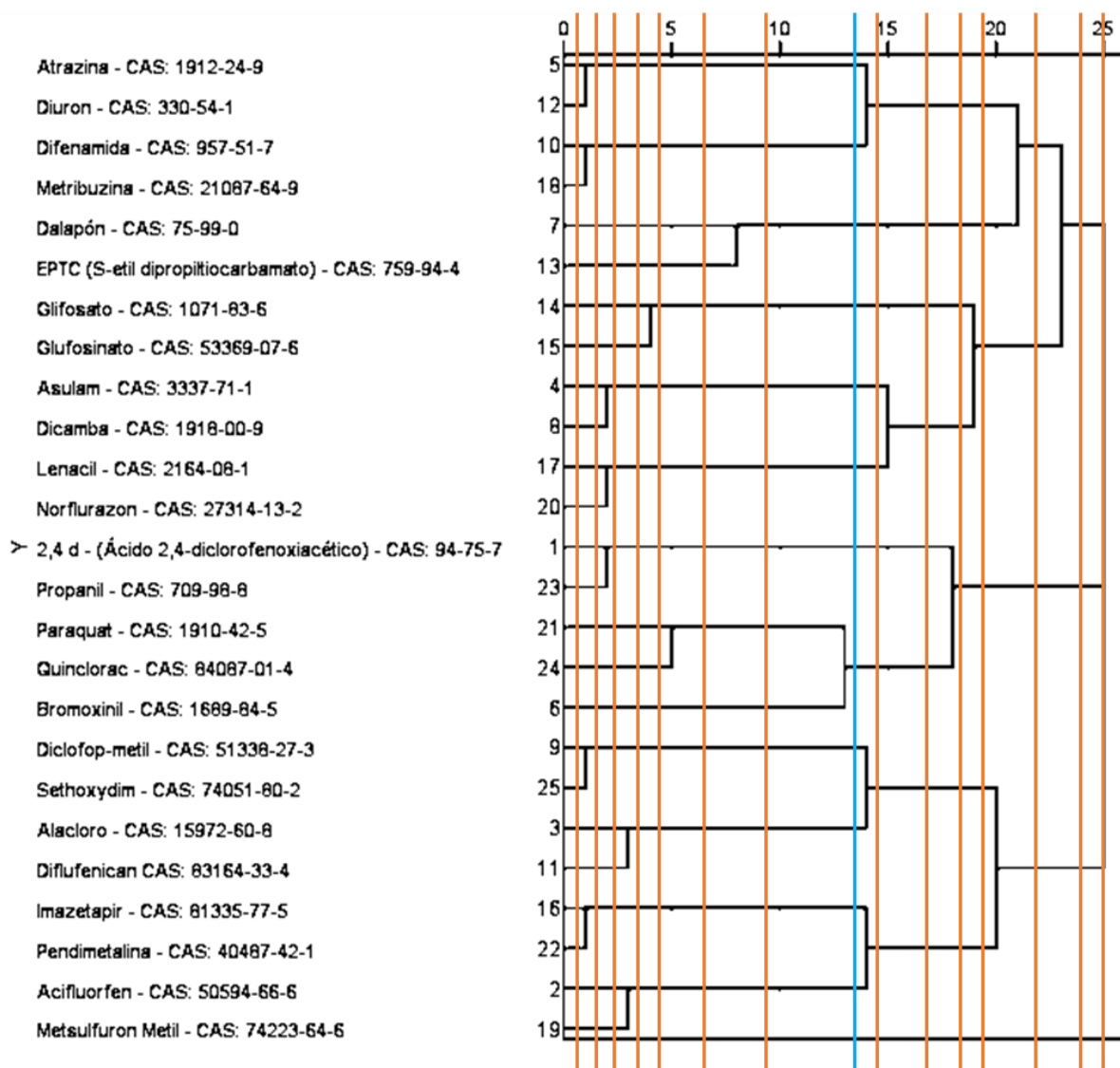
Base topológica

Bs= {(Atrazina, Diuron, Metribuzina, Al Cloro); (Imazetapir, Pendimetalina, Difenamida); (Diclofop-metil, Diflufenican); (Acifluorfen, Sethoxydim); (Metsulfuron metil); (2-4D, Propanil, paraquat); (Bromoxinil); (Lenacil, Norflurazon); (Asulam, Dicamba, Glifosato); (Quinclorac); (Glufosinato); (Dalapón); (EPTC)}

Apéndice 27. *Dendrograma con Medida de similitud Coseno y Método de agrupamiento Centroide.*



Apéndice 28. Cortes en dendrograma con Medida de similitud Coseno y Método de agrupamiento Centroide.



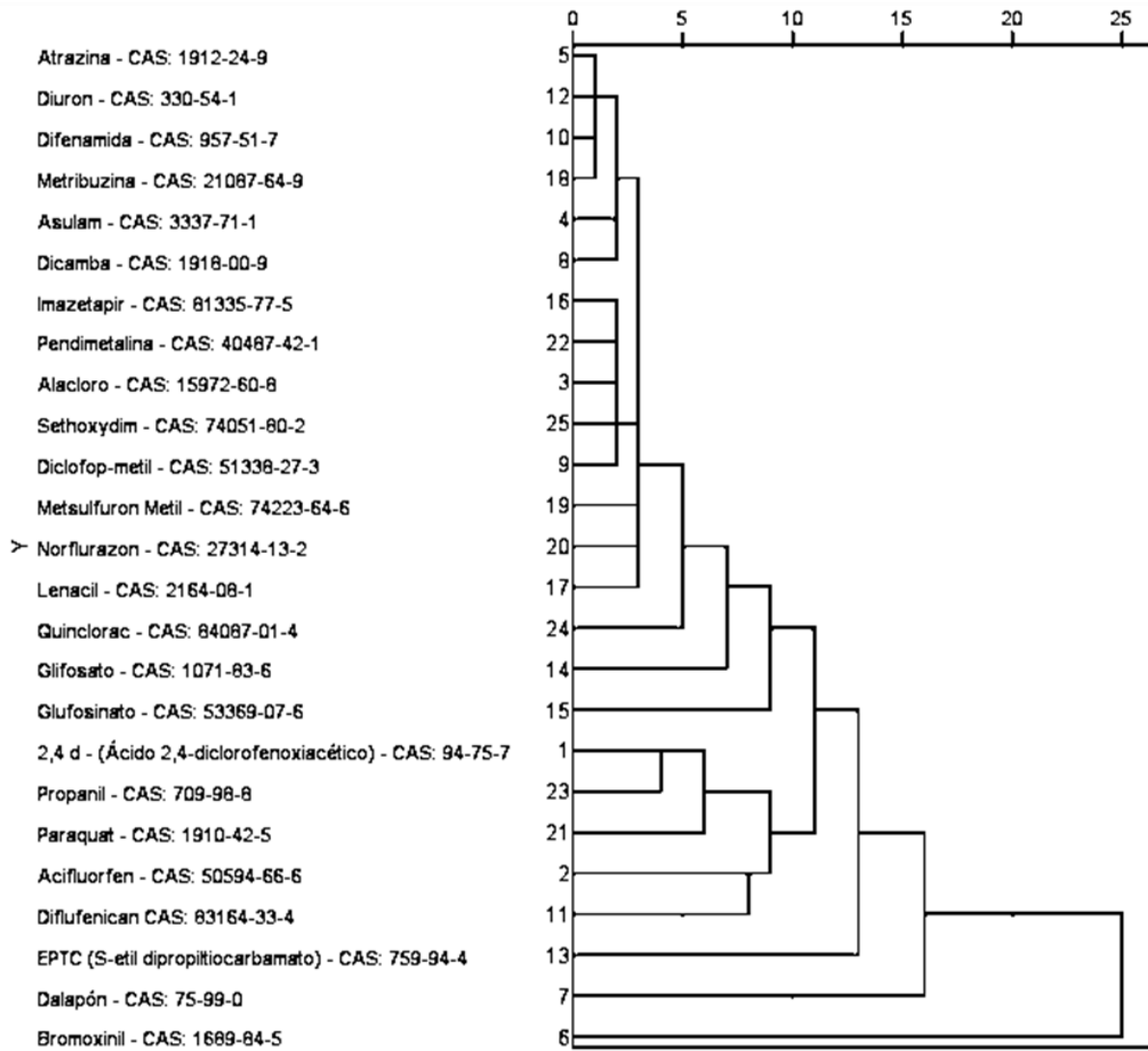
Base topológica

Bs= {(Atrazina, Diuron, Difenamida, Metribuzina; (Dalapón, EPTC); (Glifosato, Glufosinato); (Asulam, Dicamba); (Lenacil, Norflurazon); (2-4 D, Propanil); (paraquat, Quinclorac, Bromoxinil); (Diclofop-metil; Sethoxydim); (Al Cloro, Diflufenican); (Imazetapir, Pendimetalina); (Acifluorfen, Metsulfuron metil)}

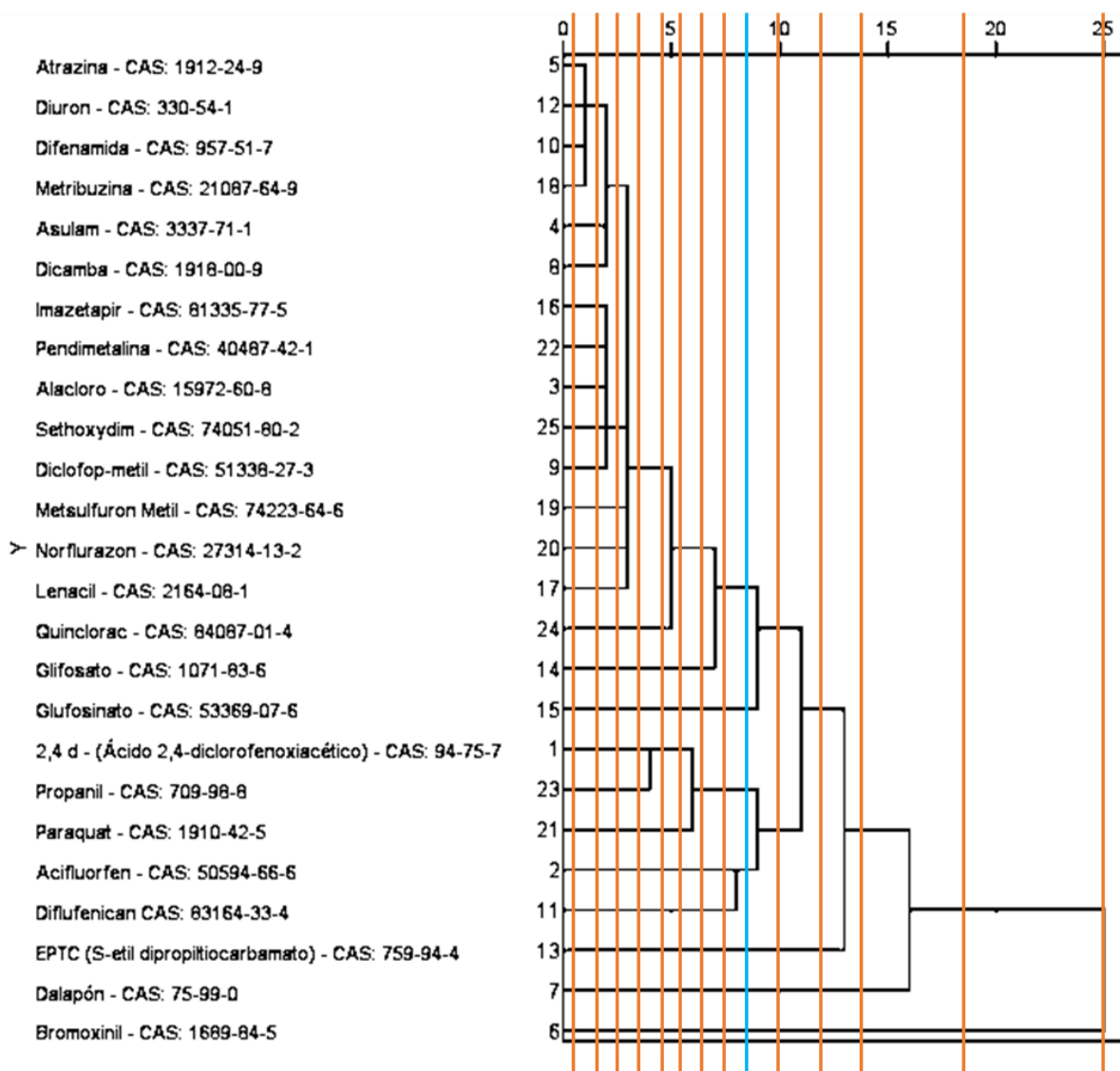
Apéndice 29. Determinación del número de selección S en dendrograma con Medida de similitud Coseno y Método de agrupamiento Centroide.

n	C	$\prod_i C_i $	S
1	25	$1 \times 1 = 1$	$1 \times 25 = 25$
2	21	$2 \times 2 \times 1 = 16$	$16 \times 21 = 336$
3	18	$2 \times 2 \times 1 \times 1 \times 1 \times 1 \times 1 \times 2 \times 2 \times 1 \times 1 \times 1 \times 1 \times 2 \times 1 \times 1 \times 2 \times 1 \times 1 = 128$	$128 \times 18 = 2304$
4	16	$2 \times 2 \times 1 \times 1 \times 1 \times 1 \times 1 \times 2 \times 2 \times 2 \times 1 \times 1 \times 1 \times 1 \times 2 \times 2 \times 2 \times 2 = 512$	$512 \times 16 = 8256$
5	15	$2 \times 2 \times 1 \times 1 \times 2 \times 2 \times 2 \times 2 \times 1 \times 1 \times 1 \times 1 \times 2 \times 2 \times 2 \times 2 = 1024$	$1024 \times 15 = 15360$
6	14	$2 \times 2 \times 1 \times 1 \times 2 \times 2 \times 2 \times 2 \times 2 \times 1 \times 2 \times 2 \times 2 \times 2 = 2048$	$2048 \times 14 = 28672$
7	13	$2 \times 2 \times 2 \times 2 \times 2 \times 2 \times 2 \times 2 \times 1 \times 2 \times 2 \times 2 \times 2 = 4096$	$4096 \times 13 = 53248$
8	12	$2 \times 2 \times 2 \times 2 \times 2 \times 2 \times 2 \times 2 \times 3 \times 2 \times 2 \times 2 \times 2 = 6144$	$6144 \times 12 = 73728$
9	9	$4 \times 2 \times 2 \times 2 \times 2 \times 2 \times 3 \times 4 \times 4 = 6144$	$6144 \times 9 = 55296$
10	8	$4 \times 2 \times 2 \times 4 \times 2 \times 3 \times 4 \times 4 = 6144$	$6144 \times 8 = 49152$
11	7	$4 \times 2 \times 2 \times 4 \times 5 \times 4 \times 4 = 5120$	$5120 \times 7 = 35840$
12	6	$4 \times 2 \times 6 \times 5 \times 4 \times 4 = 3840$	$3840 \times 6 = 23040$
13	4	$6 \times 6 \times 5 \times 8 = 1440$	$1440 \times 4 = 5760$
14	2	$12 \times 13 = 156$	$156 \times 2 = 312$
15-25	1	25	$25 \times 1 = 25$

Apéndice 30. *Dendrograma con Medida de similitud Coseno y Método de agrupamiento Mediana.*



Apéndice 31. Cortes en dendrograma con Medida de similitud Coseno y Método de agrupamiento Mediana.



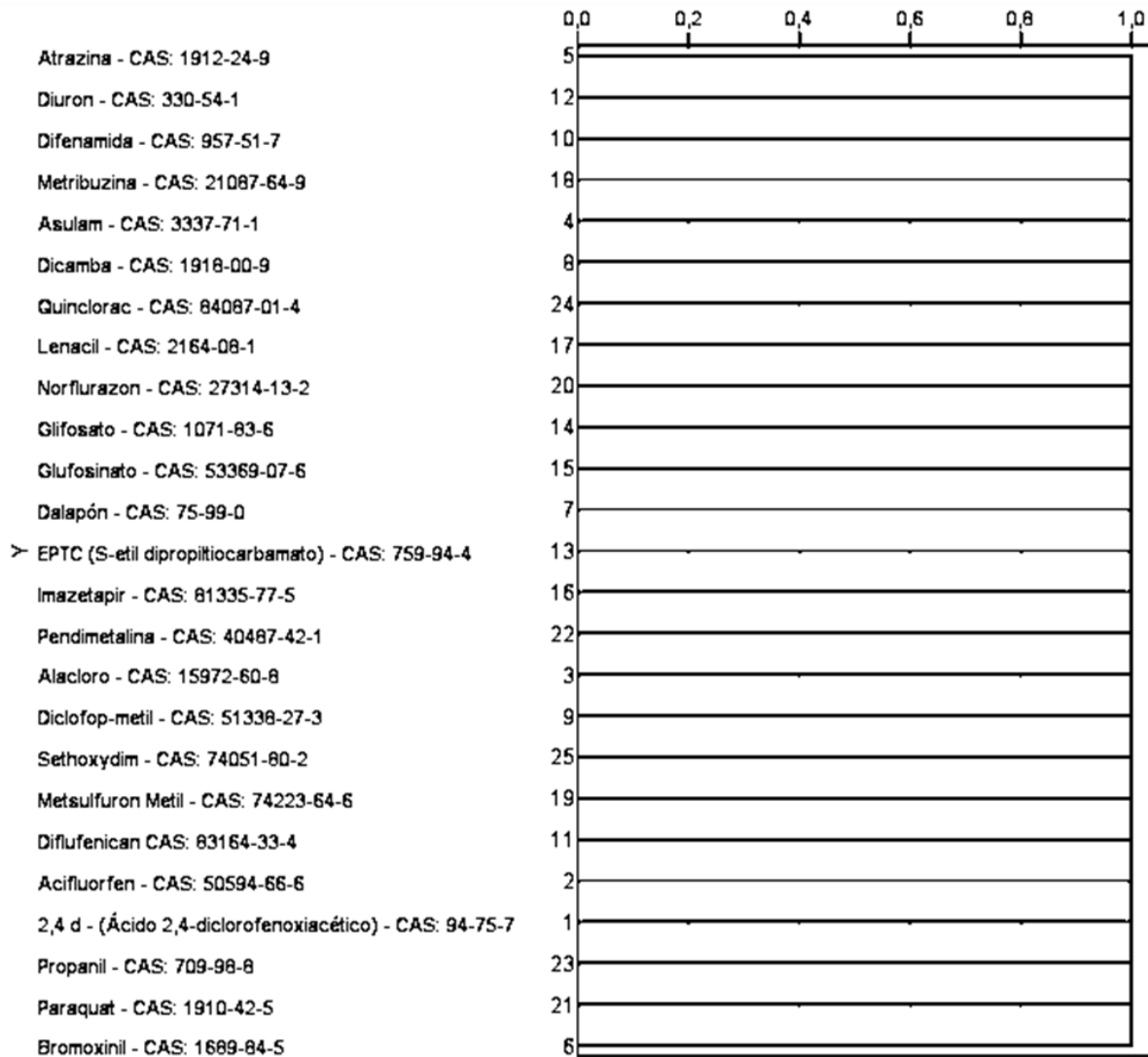
Base topológica

Bs= {(Atrazina, Diuron, Difenamida, Metribuzina, Asulam, Dicamba, Imazetapir, Pendimetalina, Al Cloro, Sethoxydim, Diclofop-metil, Metsulfuron metil, Norflurazon, Lenacil, Quinclorac, glifosato); (Glufosinato); (2-4 Propanil, paraquat); (Acifluorfen, Diflufenican); (EPTC); (Dalapón); (Bromoxinil)}

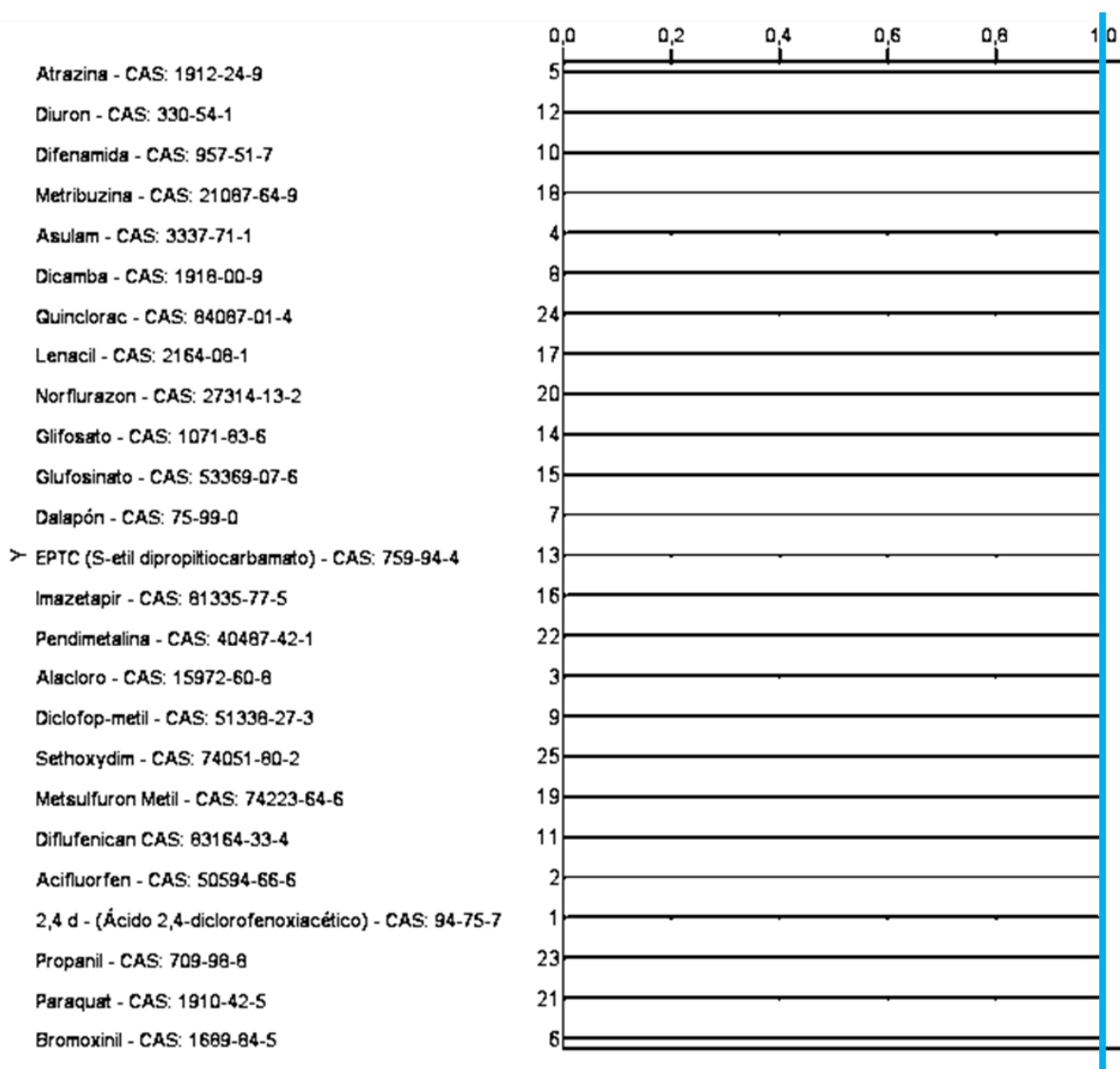
Apéndice 32. Determinación del número de selección S en dendrograma con Medida de similitud Coseno y Método de agrupamiento Mediana.

n	C	$\prod_i C_i $	S
1	25	$1 \times 1 = 1$	$1 \times 25 = 25$
2	22	$4 \times 1 = 4$	$4 \times 22 = 88$
3	16	$6 \times 5 \times 1 = 30$	$30 \times 16 = 480$
4	12	$14 \times 1 = 14$	$14 \times 12 = 168$
5	11	$14 \times 1 \times 1 \times 1 \times 2 \times 1 \times 1 \times 1 \times 1 \times 1 \times 1 \times 1 \times 1 \times 1 \times 1 \times 1 \times 1 \times 1 \times 1 \times 1 \times 1 \times 1 \times 1 \times 1 = 28$	$28 \times 11 = 308$
6	10	$15 \times 1 \times 1 \times 2 \times 1 = 30$	$30 \times 10 = 300$
7	9	$15 \times 1 \times 1 \times 3 \times 1 = 45$	$45 \times 9 = 405$
8	8	$16 \times 1 \times 3 \times 1 = 48$	$48 \times 8 = 384$
9	7	$16 \times 1 \times 3 \times 2 \times 1 = 96$	$96 \times 7 = 672$
10	5	$17 \times 5 \times 1 = 85$	$85 \times 5 = 425$
11	4	$22 \times 1 = 22$	$22 \times 4 = 88$
12	3	$23 \times 1 = 23$	$23 \times 3 = 69$
13	2	$24 \times 1 = 24$	$24 \times 2 = 48$
14-25	1	25	$25 \times 1 = 25$

Apéndice 33. *Dendrograma con Medida de similitud Coseno y Método de agrupamiento Ward.*



Apéndice 34. Cortes en dendrograma con Medida de similitud Coseno y Método de agrupamiento Ward.



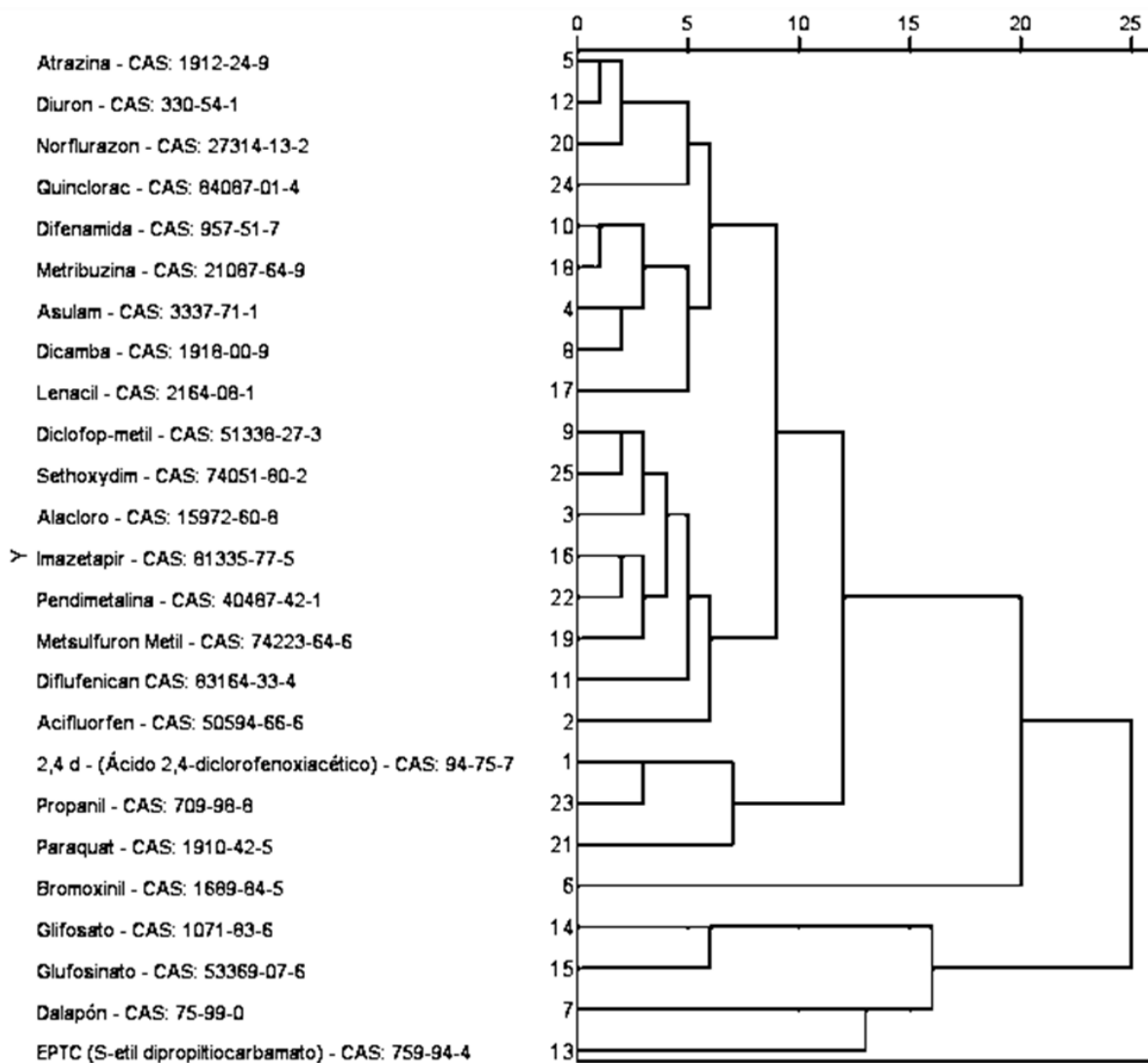
Base topológica

B1-25= {(Atrazina, Diuron, Difenamida, Metribuzina, Asulam, Dicamba, Imazetapir, Pendimetalina, Al Cloro, Sethoxydim, Diclofop-metil, Metsulfuron metil, Norflurazon, Lenacil, Quinclorac, glifosato, Glufosinato, 2-4 Propanil, Paraquat, Acifluorfen, Diflufenican, EPTC, Dalapón, Bromoxinil)}

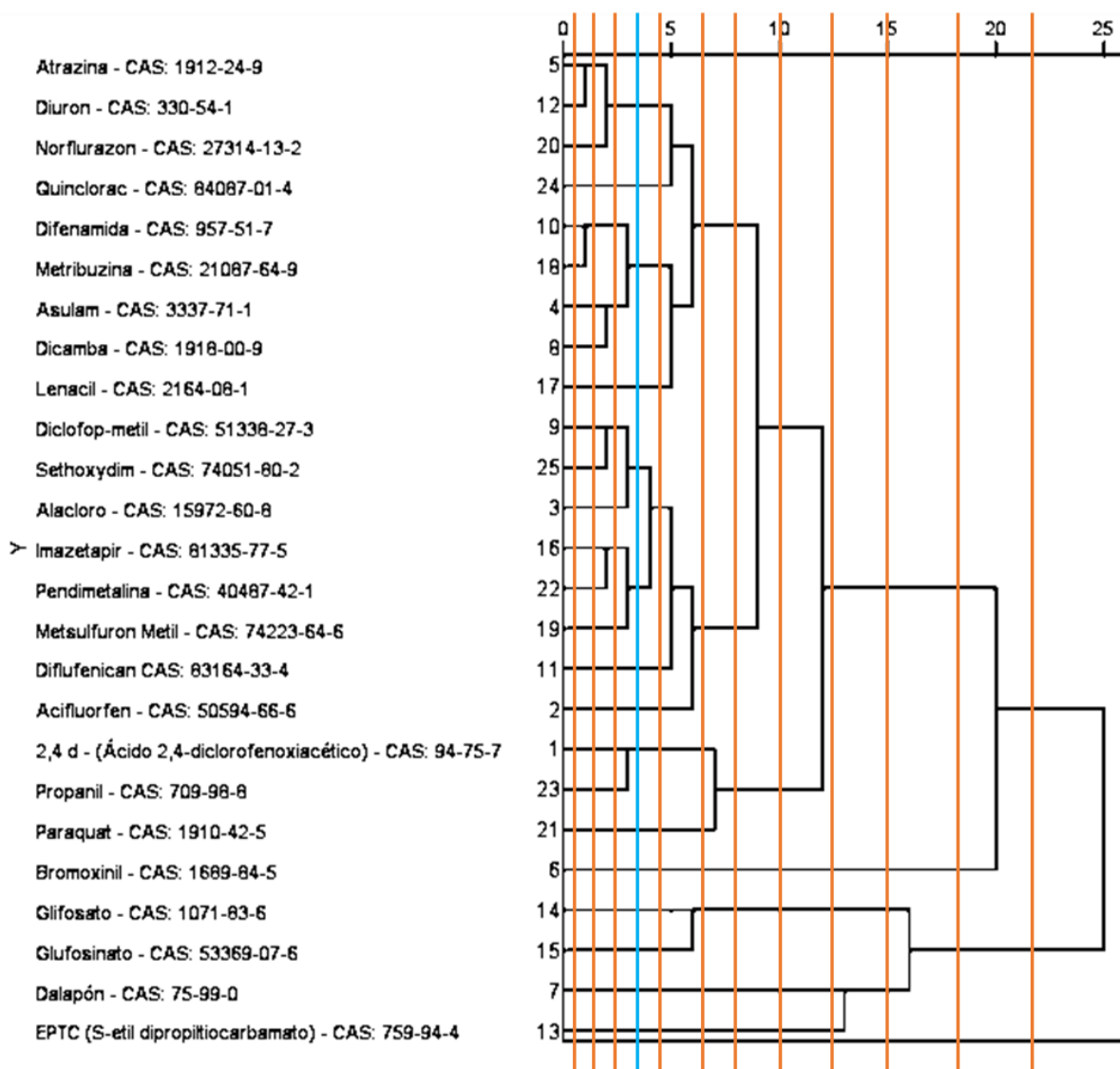
Apéndice 35. *Determinación del número de selección S en dendrograma con Medida de similitud Coseno y Método de agrupamiento Ward.*

<i>n</i>	<i>C</i>	$\prod_i C_i $	<i>S</i>
1-25	25	$1 \times 1 = 1$	$1 \times 25 = 25$

Apéndice 36. *Dendrograma con Medida de similitud Coseno y Método de agrupamiento Vecino más lejano.*



Apéndice 37. Cortes en dendrograma con Medida de similitud Coseno y Método de agrupamiento Vecino más lejano.



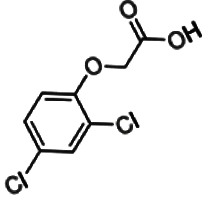
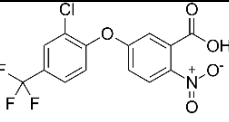
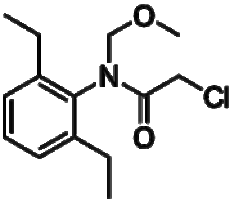
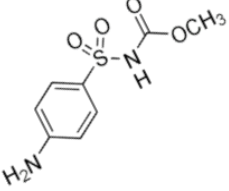
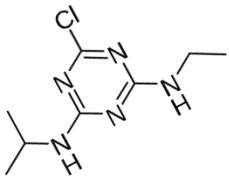
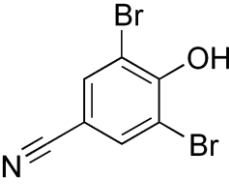
Base topológica

Bs= {(Atrazina, Diuron, Norflurazon); (Quinclorac); (Difenamida, Metribuzina, Asulam, Dicamba); (Lenacil); (Diclofop-metil; Sethoxydim; Al Cloro); (Imazetapir, Pendimetalina, Metsulfuron metil); (Diflufenican) (Acifluorfen); (2-4 D, Propanil); (paraquat); (Bromoxinil); (glifosato); (Glufosinato); (Dalapón); (EPTC)}

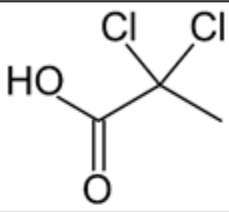
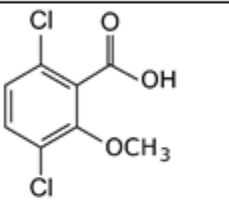
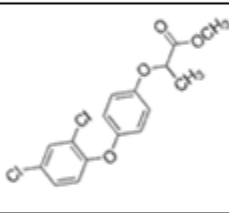
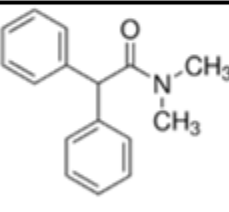
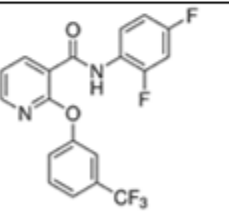
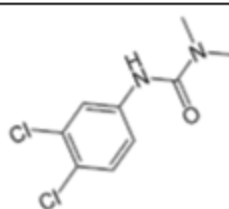
Apéndice 38. *Determinación del número de selección S en dendrograma con Medida de similitud**Coseno y Método de agrupamiento Vecino más lejano.*

<i>n</i>	<i>C</i>	$\prod_i C_i $	<i>S</i>
1	25	$1 \times 1 = 1$	$1 \times 25 = 25$
2	23	$2 \times 1 \times 1 \times 2 \times 1 \times 1 \times 1 \times 1 \times 1 \times 1 \times 1 \times 1 \times 1 \times 1 \times 1 \times 1 \times 1 \times 1 \times 1 \times 1 \times 1 \times 1 = 4$	$4 \times 23 = 92$
3	19	$3 \times 1 \times 2 \times 2 \times 1 \times 2 \times 1 \times 2 \times 1 \times 1 \times 1 \times 1 \times 1 \times 1 \times 1 \times 1 \times 1 \times 1 \times 1 \times 1 = 48$	$48 \times 19 = 912$
4	14	$3 \times 1 \times 4 \times 1 \times 3 \times 3 \times 2 \times 2 \times 1 \times 1 \times 1 \times 1 \times 1 \times 1 \times 1 = 432$	$432 \times 14 = 6048$
5	14	$3 \times 1 \times 4 \times 1 \times 6 \times 1 \times 1 \times 2 \times 1 \times 1 \times 1 \times 1 \times 1 \times 1 \times 1 = 144$	$144 \times 14 = 2016$
6	8	$9 \times 8 \times 2 \times 1 \times 1 \times 2 \times 1 \times 1 = 288$	$288 \times 8 = 2304$
7	7	$9 \times 8 \times 3 \times 1 \times 2 \times 1 \times 1 = 432$	$432 \times 7 = 3024$
8	6	$17 \times 3 \times 1 \times 2 \times 1 \times 1 = 102$	$102 \times 6 = 612$
9	5	$20 \times 1 \times 2 \times 1 \times 1 = 40$	$40 \times 5 = 200$
10	4	$20 \times 1 \times 2 \times 2 = 80$	$80 \times 4 = 320$
11	3	$20 \times 1 \times 4 = 80$	$80 \times 3 = 240$
12	2	$21 \times 4 = 84$	$84 \times 2 = 168$
13-25	1	25	$25 \times 1 = 25$

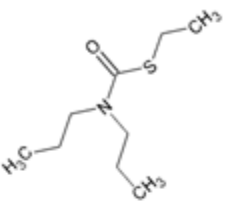
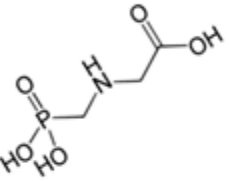
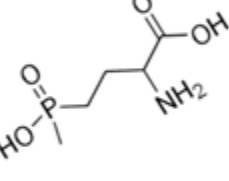
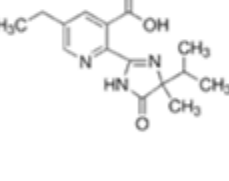
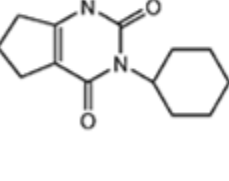
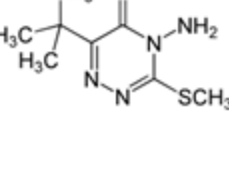
Apéndice 39. Matriz de datos de propiedades fisicoquímicas de herbicidas seleccionados.

N°	SUSTANCIA QUIMICA		
	NOMBRE	ESTRUCTURA MOLECULAR	FORMULA MOLECULAR
1	2,4 d - (Ácido 2,4-diclorofenoxiacético) - CAS: 94-75-7		C8H6Cl2O3
2	Acifluorfen - CAS: 50594-66-6		C14H7ClF3NO5
3	Alacloro - CAS: 15972-60-8		C14H20ClNO2
4	Asulam - CAS: 3337-71-1		C8H10N2O4S
5	Atrazina - CAS: 1912-24-9		C8H14ClN5
6	Bromoxinil - CAS: 1689-84-5		C7H3Br2NO

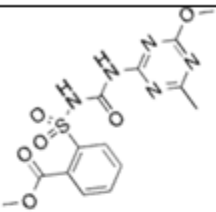
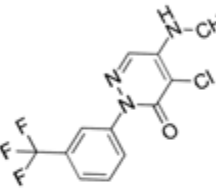
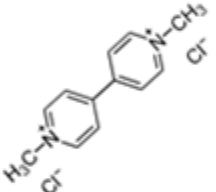
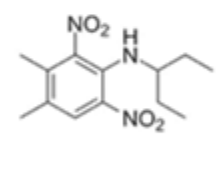
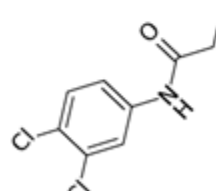
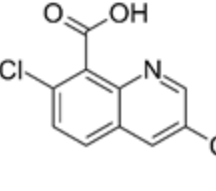
Apéndice 39. Matriz de datos de propiedades fisicoquímicas de herbicidas seleccionados
(Continuación).

N°	SUSTANCIA QUIMICA		
	NOMBRE	ESTRUCTURA MOLECULAR	FORMULA MOLECULAR
7	Dalapón - CAS: 75-99-0		C ₃ H ₄ Cl ₂ O ₂
8	Dicamba - CAS: 1918-00-9		C ₈ H ₆ Cl ₂ O ₃
9	Diclofop-metil - CAS: 51338-27- 3		C ₁₆ H ₁₄ Cl ₂ O ₄
10	Difenamida - CAS: 957-51-7		C ₁₆ H ₁₇ NO
11	Diflufenican CAS: 83164-33- 4		C ₁₉ H ₁₁ F ₅ N ₂ O ₂
12	Diuron - CAS: 330-54-1		C ₉ H ₁₀ Cl ₂ N ₂ O

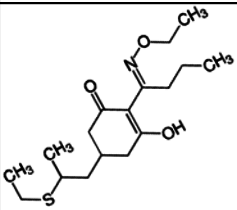
Apéndice 39. Matriz de datos de propiedades fisicoquímicas de herbicidas seleccionados
(Continuación).

N°	SUSTANCIA QUIMICA		
	NOMBRE	ESTRUCTURA MOLECULAR	FORMULA MOLECULAR
13	EPTC (S-etil dipropiltiocarbamato) - CAS: 759-94-4		C ₉ H ₁₉ NOS
14	Glifosato - CAS: 1071-83-6		C ₃ H ₈ NO ₅ P
15	Glufosinato - CAS: 53369-07-6		C ₅ H ₁₂ NO ₄ P
16	Imazetapir - CAS: 81335-77-5		C ₁₅ H ₁₉ N ₃ O ₃
17	Lenacil - CAS: 2164-08-1		C ₁₃ H ₁₈ N ₂ O ₂
18	Metribuzina - CAS: 21087-64-9		C ₈ H ₁₄ N ₄ OS

Apéndice 39. Matriz de datos de propiedades fisicoquímicas de herbicidas seleccionados
(Continuación).

N°	SUSTANCIA QUIMICA		
	NOMBRE	ESTRUCTURA MOLECULAR	FORMULA MOLECULAR
19	Metsulfuron Metil - CAS: 74223-64-6		C14H15N5O6S
20	Norflurazon - CAS: 27314-13-2		C12H9Clf3N3O
21	Paraquat - CAS: 1910-42-5		C12H14Cl2N2
22	Pendimetalina - CAS: 40487-42-1		C13H19N3O4
23	Propanil - CAS: 709-98-8		C9H9Cl2NO
24	Quinclorac - CAS: 84087-01-4		C10H5Cl2NO2

Apéndice 39. *Matriz de datos de propiedades fisicoquímicas de herbicidas seleccionados*
(Continuación).

N°	SUSTANCIA QUIMICA		
	NOMBRE	ESTRUCTURA	FORMULA
25	Sethoxydim - CAS: 74051-80- 2		C ₁₇ H ₂₉ NO ₃ S

Apéndice 39. Matriz de datos de propiedades fisicoquímicas de herbicidas seleccionados
(Continuación).

N°	NOMBRE	MOMENTO DIPOLAR (Debye)	ENERGIA TOTAL (KCAL/MOL)	ENERGIA TERMICA (KCAL/MOL)	CAPACIDAD CALORIFICA (kcal/mol-K)
1	2,4 d - (Ácido 2,4- diclorofenoxiac ético) - CAS: 94- 75-7	3,956007	-912698,061657	86,172	0,04467
2	Acifluorfen - CAS: 50594-66- 6	3,695622	-1084509,004273	132,831	0,07783
3	Alacloro - CAS: 15972-60-8	5,189465	-759832,921598	208,758	0,07333
4	Asulam - CAS: 3337-71-1	5,564006	-702446,784919	123,628	0,05660
5	Atrazina - CAS: 1912-24-9	5,302056	-657158,443825	150,467	0,05386
6	Bromoxinil - CAS: 1689-84-5	3,861714	-3480298,117845	57,030	0,03681

Apéndice 39. Matriz de datos de propiedades fisicoquímicas de herbicidas seleccionados
(Continuación).

N°	NOMBRE	MOMENTO DIPOLAR (Debye)	ENERGIA TOTAL (KCAL/MOL)	ENERGIA TERMICA (KCAL/MOL)	CAPACIDAD CALORIFICA (kcal/mol-K)
7	Dalapón - CAS: 75-99-0	3,087287	-745183,938601	48,566	0,02702
8	Dicamba - CAS: 1918-00-9	0,635858	-912694,647381	86,143	0,04564
9	Diclofop-metil - CAS: 51338-27- 3	5,319828	-1154207,377696	177,941	0,07942
10	Difenamida - CAS: 957-51-7	3,562102	-470560,353281	189,725	0,06504
11	Diflufenican CAS: 83164-33- 4	3,005177	-934926,509375	179,069	0,09017
12	Diuron - CAS: 330-54-1	5,856222	-912428,099755	120,086	0,05271

Apéndice 39. *Matriz de datos de propiedades fisicoquímicas de herbicidas seleccionados (Continuación).*

N°	NOMBRE	MOMENTO DIPOLAR (Debye)	ENERGIA TOTAL (KCAL/MOL)	ENERGIA TERMICA (KCAL/MOL)	CAPACIDAD CALORIFICA (kcal/mol-K)
13	EPTC (S-etil dipropiltiocarba mato) - CAS: 759-94-4	2,164410	-553802,651920	178,625	0,05662
14	Glifosato - CAS: 1071-83-6	2,358761	-559393,693104	88,550	0,04199
15	Glufosinato - CAS: 53369-07- 6	2,122624	-561512,659848	121,834	0,04982
16	Imazetapir - CAS: 81335-77- 5	5,102888	-610573,293886	213,873	0,08077
17	Lenacil - CAS: 2164-08-1	3,975602	-480813,809553	194,583	0,06041
18	Metribuzina - CAS: 21087-64- 9	2,246570	-631042,174364	148,690	0,05851

Apéndice 39. Matriz de datos de propiedades fisicoquímicas de herbicidas seleccionados
(Continuación).

N°	NOMBRE	MOMENTO DIPOLAR (Debye)	ENERGIA TOTAL (KCAL/MOL)	ENERGIA TERMICA (KCAL/MOL)	CAPACIDAD CALORIFICA (kcal/mol-K)
19	Metsulfuron Metil - CAS: 74223-64-6	4,394677	-1045316,059073	200,896	0,09376
20	Norflurazon - CAS: 27314-13- 2	8,499410	-917358,788118	133,677	0,06596
21	Paraquat - CAS: 1910-42-5	3,588464	-938436,696829	157,944	0,06126
22	Pendimetalina - CAS: 40487-42- 1	2,386975	-609825,182676	208,956	0,07861
23	Propanil - CAS: 709-98-8	3,938265	-877694,688454	108,289	0,04588
24	Quinclorac - CAS: 84087-01- 4	2,958540	-947307,082477	87,449	0,04739

Apéndice 39. *Matriz de datos de propiedades fisicoquímicas de herbicidas seleccionados*
(Continuación).

N°	NOMBRE	MOMENTO DIPOLAR (Debye)	ENERGIA TOTAL (KCAL/MOL)	ENERGIA TERMICA (KCAL/MOL)	CAPACIDAD CALORIFICA (kcal/mol-K)
25	Sethoxydim - CAS: 74051-80- 2	7,016642	-843232,718721	287,576	0,09789

Apéndice 39. Matriz de datos de propiedades fisicoquímicas de herbicidas seleccionados
(Continuación).

N°	NOMBRE	ENTROPIA (kcal/mol-K)	POLARIDAD α (C*m2/V)	PESO MOLECULAR (g/mol)	TEMPERATURA DE FUSION (K)
1	2,4 d - (Ácido 2,4- diclorofenoxiac ético) - CAS: 94- 75-7	0,11508	123,51833	221	410,15
2	Acifluorfen - CAS: 50594-66- 6	0,16402	208,83167	361,65	430,15
3	Alacloro - CAS: 15972-60-8	0,15213	183,93500	269,77	314,15
4	Asulam - CAS: 3337-71-1	0,12630	141,06700	230,24	417,15
5	Atrazina - CAS: 1912-24-9	0,12383	147,75867	215,68	443,15
6	Bromoxinil - CAS: 1689-84-5	0,10430	129,05300	276,91	462,15

Apéndice 39. Matriz de datos de propiedades fisicoquímicas de herbicidas seleccionados
(Continuación).

N°	NOMBRE	ENTROPIA (kcal/mol-K)	POLARIDAD α (C*m2/V)	PESO MOLECULAR (g/mol)	TEMPERATURA DE FUSION (K)
7	Dalapón - CAS: 75-99-0	0,08883	61,82600	142,97	439,15
8	Dicamba - CAS: 1918-00-9	0,11413	122,53600	221,03	381,15
9	Diclofop-metil - CAS: 51338-27- 3	0,16344	224,75900	341,2	310,15
10	Difenamida - CAS: 957-51-7	0,13906	185,62200	239,31	407,15
11	Diflufenican CAS: 83164-33- 4	0,17576	251,54767	394,3	433,15
12	Diuron - CAS: 330-54-1	0,12678	151,94733	233,09	429,15

Apéndice 39. *Matriz de datos de propiedades fisicoquímicas de herbicidas seleccionados (Continuación).*

N°	NOMBRE	ENTROPIA (kcal/mol-K)	POLARIDAD α (C*m2/V)	PESO MOLECULAR (g/mol)	TEMPERATURA DE FUSION (K)
13	EPTC (S-etil dipropiltiocarba mato) - CAS: 759-94-4	0,13101	138,28000	189,32	297,15
14	Glifosato - CAS: 1071-83-6	0,11050	78,49200	169,07	502,15
15	Glufosinato - CAS: 53369-07- 6	0,12048	98,99333	181,13	487,15
16	Imazetapir - CAS: 81335-77- 5	0,15754	209,25433	289,33	447,15
17	Lenacil - CAS: 2164-08-1	0,12275	163,86267	234,29	588,15
18	Metribuzina - CAS: 21087-64- 9	0,12429	151,18533	214,29	397,15

Apéndice 39. Matriz de datos de propiedades fisicoquímicas de herbicidas seleccionados
(Continuación).

N°	NOMBRE	ENTROPIA (kcal/mol-K)	POLARIDAD α (C*m2/V)	PESO MOLECULAR (g/mol)	TEMPERATURA DE FUSION (K)
19	Metsulfuron Metil - CAS: 74223-64-6	0,18262	238,70500	381,36	431,15
20	Norflurazon - CAS: 27314-13- 2	0,13959	188,62067	303,67	447,15
21	Paraquat - CAS: 1910-42-5	0,13559	208,35833	186,25	573,15
22	Pendimetalina - CAS: 40487-42- 1	0,15251	205,44400	281,31	327,15
23	Propanil - CAS: 709-98-8	0,11241	142,25967	218,08	364,15
24	Quinclorac - CAS: 84087-01- 4	0,11408	156,38433	242,05	547,15

Apéndice 39. *Matriz de datos de propiedades fisicoquímicas de herbicidas seleccionados*
(Continuación).

N°	NOMBRE	ENTROPIA (kcal/mol-K)	POLARIDAD α (C*m2/V)	PESO MOLECULAR (g/mol)	TEMPERATURA DE FUSION (K)
25	Sethoxydim - CAS: 74051-80- 2	0,18839	241,72300	327,5	362,15

Apéndice 39. *Matriz de datos de propiedades fisicoquímicas de herbicidas seleccionados (Continuación).*

N°	NOMBRE	PUNTO DE EBULLICION NORMAL (K)	DENSIDAD A 298,15 K - (g/ml)	Constante de disociación pKa	Coeficiente de Adsorción de carbono orgánico (Log KOC)
1	2,4 d - (Ácido 2,4-diclorofenoxiacético) - CAS: 94-75-7	433,15	1,416	2,64	1,68
2	Acifluorfen - CAS: 50594-66-6	695,55	1.573	1.93	4,5
3	Alacloro - CAS: 15972-60-8	373,15	1,119	1,2	2,267
4	Asulam - CAS: 3337-71-1	656,15	1,418	4,82	1,619
5	Atrazina - CAS: 1912-24-9	553,15	1,3	1,64	2,362
6	Bromoxinil - CAS: 1689-84-5	538,75	2,2	4,06	2,638

Apéndice 39. *Matriz de datos de propiedades fisicoquímicas de herbicidas seleccionados (Continuación).*

N°	NOMBRE	PUNTO DE EBULLICION NORMAL (K)	DENSIDAD A 298,15 K - (g/ml)	Constante de disociación pKa	Coeficiente de Adsorción de carbono orgánico (Log KOC)
7	Dalapón - CAS: 75-99-0	460,15	1,39	2,06	0,437
8	Dicamba - CAS: 1918-00-9	599,25	1,57	2,4	1,459
9	Diclofop-metil - CAS: 51338-27-3	711,65	1,31	-3,7	3,606
10	Difenamida - CAS: 957-51-7	655,12	1,2	-0,7	4,189
11	Diflufenican CAS: 83164-33-4	649,35	1,438	9,03	5,041
12	Diuron - CAS: 330-54-1	454,15	1,48	-2	2,134

Apéndice 39. *Matriz de datos de propiedades fisicoquímicas de herbicidas seleccionados*
(Continuación).

N°	NOMBRE	PUNTO DE EBULLICION NORMAL (K)	DENSIDAD A 298,15 K - (g/ml)	Constante de disociación pKa	Coeficiente de Adsorción de carbono orgánico (Log KOC)
13	EPTC (S-etil dipropiltiocarbamato) - CAS: 759-94-4	505,15	0,95	-1,22	2,411
14	Glifosato - CAS: 1071-83-6	738,95	1,74	1,22	1,274
15	Glufosinato - CAS: 53369-07-6	792,25	1,4	2,5	1,492
16	Imazetapir - CAS: 81335-77-5	453,15	1,28	3,9	3,143
17	Lenacil - CAS: 2164-08-1	649,35	1,32	10,66	2,269
18	Metribuzina - CAS: 21087-64-9	405,15	1,28	-0,17	3,078

Apéndice 39. *Matriz de datos de propiedades fisicoquímicas de herbicidas seleccionados (Continuación).*

N°	NOMBRE	PUNTO DE EBULLICION NORMAL (K)	DENSIDAD A 298,15 K - (g/ml)	Constante de disociación pKa	Coeficiente de Adsorción de carbono orgánico (Log KOC)
19	Metsulfuron Metil - CAS: 74223-64-6	920,35	1,473	2,55	1,84
20	Norflurazon - CAS: 27314-13-2	618,35	1,4395	1,11	3,537
21	Paraquat - CAS: 1910-42-5	583,9	1,56	3	2,815
22	Pendimetalina - CAS: 40487-42-1	603,15	1,17	-2,24	4,05
23	Propanil - CAS: 709-98-8	642,15	1,25	13,58	2,295
24	Quinclorac - CAS: 84087-01-4	678,15	1,75	-3,26	2,263

Apéndice 39. *Matriz de datos de propiedades fisicoquímicas de herbicidas seleccionados*
(Continuación).

N°	NOMBRE	PUNTO DE EBULLICION NORMAL (K)	DENSIDAD A 298,15 K - (g/ml)	Constante de disociación pKa	Coeficiente de Adsorción de carbono orgánico (Log KOC)
25	Sethoxydim - CAS: 74051-80- 2	710	1.112	4,38	3,454

Apéndice 39. Matriz de datos de propiedades fisicoquímicas de herbicidas seleccionados
(Continuación).

N°	NOMBRE	Solubilidad en agua (mg/L a 25°C)	Presión de vapor (Pa a 25°C)	coeficiente de partición de octanol agua (Log KOW)	Ley de Henry (Pa·m ³ /mol at 25°C)
1	2,4 d - (Ácido 2,4-diclorofenoxiacético) - CAS: 94-75-7	336,2	0,3719695	2,81	0,000000182
2	Acifluorfen - CAS: 50594-66-6	240	0,00052529	3,7	6,03E-11
3	Alacloro - CAS: 15972-60-8	18,07	0,2733109	3,52	4,027E-07
4	Asulam - CAS: 3337-71-1	2527	0,01853181	0,27	1,667E-10
5	Atrazina - CAS: 1912-24-9	214,1	0,381302	2,61	3,791E-08
6	Bromoxinil - CAS: 1689-84-5	43,87	0,03079747	3,39	1,919E-08

Apéndice 39. *Matriz de datos de propiedades fisicoquímicas de herbicidas seleccionados (Continuación).*

N°	NOMBRE	Solubilidad en agua (mg/L a 25°C)	Presión de vapor (Pa a 25°C)	coeficiente de partición de octanol agua (Log KOW)	Ley de Henry (Pa·m ³ /mol at 25°C)
7	Dalapón - CAS: 75-99-0	7432	89,326	1,68	0,00001696
8	Dicamba - CAS: 1918-00-9	440,5	0,7052754	2,21	3,493E-08
9	Diclofop-metil - CAS: 51338-27-3	0,7937	0,00919924	4,62	3,82E-08
10	Difenamida - CAS: 957-51-7	98,35	0,05799524	2,86	1,393E-08
11	Diflufenican CAS: 83164-33-4	0,2171	5,34623E-05	4,9	9,583E-09
12	Diuron - CAS: 330-54-1	150,6	0,06199491	2,68	9,47E-09

Apéndice 39. *Matriz de datos de propiedades fisicoquímicas de herbicidas seleccionados (Continuación).*

N°	NOMBRE	Solubilidad en agua (mg/L a 25°C)	Presión de vapor (Pa a 25°C)	coeficiente de partición de octanol agua (Log KOW)	Ley de Henry (Pa·m ³ /mol at 25°C)
13	EPTC (S-etil dipropiltiocarbamato) - CAS: 759-94-4	89,87	0,501292177	3,21	0,00001042
14	Glifosato - CAS: 1071-83-6	12000	5,7329E-07	-4	9,566E-17
15	Glufosinato - CAS: 53369-07-6	1370000	1,53321E-06	-3,96	2,741E-17
16	Imazetapir - CAS: 81335-77-5	84,54	3,02642E-09	2,6	1,022E-13
17	Lenacil - CAS: 2164-08-1	66,64	4,03967E-08	3,09	1,402E-12
18	Metribuzina - CAS: 21087-64-9	1304	0,06892767	1,7	1,118E-09

Apéndice 39. *Matriz de datos de propiedades fisicoquímicas de herbicidas seleccionados (Continuación).*

N°	NOMBRE	Solubilidad en agua (mg/L a 25°C)	Presión de vapor (Pa a 25°C)	coeficiente de partición de octanol agua (Log KOW)	Ley de Henry (Pa·m ³ /mol at 25°C)
19	Metsulfuron Metil - CAS: 74223-64-6	52,75	4,23965E-09	2,2	3,025E-13
20	Norflurazon - CAS: 27314-13-2	126,9	0,004972925	2,3	1,174E-09
21	Paraquat - CAS: 1910-42-5	395,2	0,033063952	2,47	1,538E-07
22	Pendimetalina - CAS: 40487-42-1	89,68	2,95976E-10	2,62	9,196E-17
23	Propanil - CAS: 709-98-8	84,18	0,003759691	3,07	9,61E-08
24	Quinclorac - CAS: 84087-01-4	76,02	5,27E-06	2,97	1,66E-10

Apéndice 39. *Matriz de datos de propiedades fisicoquímicas de herbicidas seleccionados*
(Continuación).

N°	NOMBRE	Solubilidad en agua (mg/L a 25°C)	Presión de vapor (Pa a 25°C)	coeficiente de partición de octanol agua (Log KOW)	Ley de Henry (Pa·m ³ /mol at 25°C)
25	Sethoxydim - CAS: 74051-80- 2	1,537	1,51E-06	4,38	3,17E-09

Apéndice 39. *Matriz de datos de propiedades fisicoquímicas de herbicidas seleccionados*
(Continuación).

N°	NOMBRE	Factor de bioconcentración (BCF)	Vida media (Días)	Indice de Refracción	coeficiente de partición octanol aire (KOA)
1	2,4 d - (Ácido 2,4-diclorofenoxiacético) - CAS: 94-75-7	3,162	1,614	1,573	8,649
2	Acifluorfen - CAS: 50594-66-6	3,162	12,353	1,576	12,308
3	Alacloro - CAS: 15972-60-8	102,4	0,237	1,54	9,988
4	Asulam - CAS: 3337-71-1	3,162	0,406	1,579	9,885
5	Atrazina - CAS: 1912-24-9	9,766	0,391	1,605	9,626
6	Bromoxinil - CAS: 1689-84-5	32,39	51,023	1,711	11,658

Apéndice 39. *Matriz de datos de propiedades fisicoquímicas de herbicidas seleccionados (Continuación).*

N°	NOMBRE	Factor de bioconcentración (BCF)	Vida media (Días)	Indice de Refracción	coeficiente de partición octanol aire (KOA)
7	Dalapón - CAS: 75-99-0	3,162	19,307	1,481	7,113
8	Dicamba - CAS: 1918-00-9	3,162	3,583	1,577	9,26
9	Diclofop-metil - CAS: 51338-27- 3	720,1	0,564	1,562	10,426
10	Difenamida - CAS: 957-51-7	31,62	0,399	1,569	11,689
11	Diflufenican CAS: 83164-33- 4	1183	3,346	1,573	9,777
12	Diuron - CAS: 330-54-1	23,1	0,983	1,565	10,366

Apéndice 39. *Matriz de datos de propiedades fisicoquímicas de herbicidas seleccionados (Continuación).*

N°	NOMBRE	Factor de bioconcentración (BCF)	Vida media (Días)	Indice de Refracción	coeficiente de partición octanol aire (KOA)
13	EPTC (S-etil dipropiltiocarbamato) - CAS: 759-94-4	59,12	0,383	1,48	6,397
14	Glifosato - CAS: 1071-83-6	3,162	0,135	1,529	12,778
15	Glufosinato - CAS: 53369-07-6	3,162	0,261	1,501	9,707
16	Imazetapir - CAS: 81335-77-5	3,162	0,675	1,611	16,971
17	Lenacil - CAS: 2164-08-1	47,53	0,23	1,585	11,591
18	Metribuzina - CAS: 21087-64-9	4,064	0,586	1,618	10,02

Apéndice 39. *Matriz de datos de propiedades fisicoquímicas de herbicidas seleccionados (Continuación).*

N°	NOMBRE	Factor de bioconcentración (BCF)	Vida media (Días)	Indice de Refracción	coeficiente de partición octanol aire (KOA)
19	Metsulfuron Metil - CAS: 74223-64-6	4,721	4,149	1,594	13,712
20	Norflurazon - CAS: 27314-13-2	11,78	1,077	1,567	10,153
21	Paraquat - CAS: 1910-42-5	16,05	6,867	1,64	7,351
22	Pendimetalina - CAS: 40487-42-1	20,82	0,352	1,58	18,835
23	Propanil - CAS: 709-98-8	46,12	2,829	1,558	9,225
24	Quinclorac - CAS: 84087-01-4	3,162	8,374	1,695	12,477

Apéndice 39. *Matriz de datos de propiedades fisicoquímicas de herbicidas seleccionados*
(Continuación).

N°	NOMBRE	Factor de bioconcentración (BCF)	Vida media (Días)	Indice de Refracción	coeficiente de partición octanol aire (KOA)
25	Sethoxydim - CAS: 74051-80- 2	470,5	0,074	1,534	13,434

Apéndice 39. Matriz de datos de propiedades fisicoquímicas de herbicidas seleccionados
(Continuación).

N°	NOMBRE	Volatilización desde agua (atm-m ³ /mol)	Toxicología DL50 (mg/Kg) ORAL -RATAS - BIBLIOGRAFÍA	Categoría Toxicológica DL50 (mg/Kg) (SEGÚN RESOLUCIÓN 10834 DE 1992)	Categoría Toxicológica DL50 (mg/Kg) (SEGÚN RESOLUCIÓN 10834 DE 1992)
1	2,4 d - (Ácido 2,4-diclorofenoxiacético) - CAS: 94-75-7	3,54E-08	347	3	MEDIANAMENTE TÓXICO (CATEGORIA 3)
2	Acifluorfen - CAS: 50594-66-6	6,03E-11	1370	4	LIGERAMENTE TÓXICO (CATEGORIA 4)
3	Alacloro - CAS: 15972-60-8	8,32E-09	930	4	LIGERAMENTE TÓXICO (CATEGORIA 4)
4	Asulam - CAS: 3337-71-1	1,71E-12	2000	4	LIGERAMENTE TÓXICO (CATEGORIA 4)
5	Atrazina - CAS: 1912-24-9	2,36E-09	672	4	LIGERAMENTE TÓXICO (CATEGORIA 4)
6	Bromoxinil - CAS: 1689-84-5	1,32E-10	190	3	MEDIANAMENTE TÓXICO (CATEGORIA 3)

Apéndice 39. Matriz de datos de propiedades fisicoquímicas de herbicidas seleccionados
(Continuación).

N°	NOMBRE	Volatilización desde agua (atm-m ³ /mol)	Toxicología DL50 (mg/Kg) ORAL -RATAS - BIBLIOGRAFÍA	Categoría Toxicológica DL50 (mg/Kg) (SEGÚN RESOLUCIÓN 10834 DE 1992)	Categoría Toxicológica DL50 (mg/Kg) (SEGÚN RESOLUCIÓN 10834 DE 1992)
7	Dalapón - CAS: 75-99-0	9,02E-08	9339	4	LIGERAMENTE TÓXICO (CATEGORIA 4)
8	Dicamba - CAS: 1918-00-9	2,18E-09	1039	4	LIGERAMENTE TÓXICO (CATEGORIA 4)
9	Diclofop-metil - CAS: 51338-27-3	3,82E-08	512	4	LIGERAMENTE TÓXICO (CATEGORIA 4)
10	Difenamida - CAS: 957-51-7	3,63E-11	685	4	LIGERAMENTE TÓXICO (CATEGORIA 4)
11	Diflufenican CAS: 83164-33-4	3,25E-07	2000	4	LIGERAMENTE TÓXICO (CATEGORIA 4)
12	Diuron - CAS: 330-54-1	5,04E-10	1017	4	LIGERAMENTE TÓXICO (CATEGORIA 4)

Apéndice 39. *Matriz de datos de propiedades fisicoquímicas de herbicidas seleccionados (Continuación).*

N°	NOMBRE	Volatilización desde agua (atm-m ³ /mol)	Toxicología DL50 (mg/Kg) ORAL -RATAS - BIBLIOGRAFÍA	Categoría Toxicológica DL50 (mg/Kg) (SEGÚN RESOLUCIÓN 10834 DE 1992)	Categoría Toxicológica DL50 (mg/Kg) (SEGÚN RESOLUCIÓN 10834 DE 1992)
13	EPTC (S-etil dipropiltiocarbamato) - CAS: 759-94-4	1,59E-05	916	4	LIGERAMENTE TÓXICO (CATEGORIA 4)
14	Glifosato - CAS: 1071-83-6	4,08E-19	5600	4	LIGERAMENTE TÓXICO (CATEGORIA 4)
15	Glufosinato - CAS: 53369-07-6	5,26E-16	2000	4	LIGERAMENTE TÓXICO (CATEGORIA 4)
16	Imazetapir - CAS: 81335-77-5	1,04E-16	5000	4	LIGERAMENTE TÓXICO (CATEGORIA 4)
17	Lenacil - CAS: 2164-08-1	7,71E-11	11000	4	LIGERAMENTE TÓXICO (CATEGORIA 4)
18	Metribuzina - CAS: 21087-64-9	1,17E-10	1100	4	LIGERAMENTE TÓXICO (CATEGORIA 4)

Apéndice 39. *Matriz de datos de propiedades fisicoquímicas de herbicidas seleccionados (Continuación).*

N°	NOMBRE	Volatilización desde agua (atm-m ³ /mol)	Toxicología DL50 (mg/Kg) ORAL -RATAS - BIBLIOGRAFÍA	Categoría Toxicológica DL50 (mg/Kg) (SEGÚN RESOLUCIÓN 10834 DE 1992)	Categoría Toxicológica DL50 (mg/Kg) (SEGÚN RESOLUCIÓN 10834 DE 1992)
19	Metsulfuron Metil - CAS: 74223-64-6	7,52E-14	5000	4	LIGERAMENTE TÓXICO (CATEGORIA 4)
20	Norflurazon - CAS: 27314-13-2	3,43E-10	8000	4	LIGERAMENTE TÓXICO (CATEGORIA 4)
21	Paraquat - CAS: 1910-42-5	3,22E-07	100	3	MEDIANAMENTE TÓXICO (CATEGORIA 3)
22	Pendimetalina - CAS: 40487-42-1	1,49E-18	1050	4	LIGERAMENTE TÓXICO (CATEGORIA 4)
23	Propanil - CAS: 709-98-8	1,71E-08	367	3	MEDIANAMENTE TÓXICO (CATEGORIA 3)
24	Quinclorac - CAS: 84087-01-4	9,52E-12	2190	4	LIGERAMENTE TÓXICO (CATEGORIA 4)

Apéndice 39. *Matriz de datos de propiedades fisicoquímicas de herbicidas seleccionados*
(Continuación).

N°	NOMBRE	Volatilización desde agua (atm-m ³ /mol)	Toxicología DL50 (mg/Kg) ORAL -RATAS - BIBLIOGRAFÍA	Categoría Toxicológica DL50 (mg/Kg) (SEGÚN RESOLUCIÓN 10834 DE 1992)	Categoría Toxicológica DL50 (mg/Kg) (SEGÚN RESOLUCIÓN 10834 DE 1992)
25	Sethoxydim - CAS: 74051-80-2	2,16E-11	3200	4	LIGERAMENTE TÓXICO (CATEGORIA 4)

Apéndice 39. Matriz de datos de propiedades fisicoquímicas de herbicidas seleccionados
(Continuación).

N°	NOMBRE	Categoría Toxicológica Mayor DL50 (mg/Kg) Oral Ratas - Presentación Comercial - (SEGÚN REGISTRO DEL ICA)	Categoría Toxicológica Mayor DL50 (mg/Kg) Oral Ratas - Presentación Comercial - (SEGÚN REGISTRO DEL ICA)	GRUPO FUNCIONAL IUPAC	FAMILIA QUÍMICA, GRUPO TOXÓFORO
1	2,4 d - (Ácido 2,4-diclorofenoxiacético) - CAS: 94-75-7	2	ALTAMENTE TÓXICO (CATEGORÍA 2)	ÁCIDO	Acidos fenoxi-carboxílicos
2	Acifluorfen - CAS: 50594-66-6	4	LIGERAMENTE TÓXICO (CATEGORÍA 4)	ÁCIDO	Difenileteres
3	Alacloro - CAS: 15972-60-8	2	ALTAMENTE TÓXICO (CATEGORÍA 2)	AMIDA	Cloroacetamidas
4	Asulam - CAS: 3337-71-1	4	LIGERAMENTE TÓXICO (CATEGORÍA 4)	ÉSTER	Carbamatos
5	Atrazina - CAS: 1912-24-9	3	MEDIANAMENTE TÓXICO (CATEGORIA 3)	AMINA	Triazinas
6	Bromoxinil - CAS: 1689-84-5	3	MEDIANAMENTE TÓXICO (CATEGORIA 3)	NITRILO	Nitrilos

Apéndice 39. *Matriz de datos de propiedades fisicoquímicas de herbicidas seleccionados (Continuación).*

N°	NOMBRE	Categoría Toxicológica Mayor DL50 (mg/Kg) Oral Ratas - Presentación Comercial - (SEGÚN REGISTRO DEL ICA)	Categoría Toxicológica Mayor DL50 (mg/Kg) Oral Ratas - Presentación Comercial - (SEGÚN REGISTRO DEL ICA)	GRUPO FUNCIONAL IUPAC	FAMILIA QUÍMICA, GRUPO TOXÓFORO
7	Dalapón - CAS: 75-99-0	4	LIGERAMENTE TÓXICO (CATEGORIA 4)	ÉSTER	Ácidos cloro carbónicos
8	Dicamba - CAS: 1918-00-9	3	MEDIANAMENTE TÓXICO (CATEGORIA 3)	ÁCIDO	Acido benzoico
9	Diclofop-metil - CAS: 51338-27-3	3	MEDIANAMENTE TÓXICO (CATEGORIA 3)	ÉSTER	Ariloxifenoxipropionatos
10	Difenamida - CAS: 957-51-7	4	LIGERAMENTE TÓXICO (CATEGORIA 4)	AMIDA	acetamida (anilida)
11	Diflufenican CAS: 83164-33-4	2	ALTAMENTE TÓXICO (CATEGORÍA 2)	AMIDA	Piridin carboxamidas
12	Diuron - CAS: 330-54-1	2	ALTAMENTE TÓXICO (CATEGORÍA 2)	AMIDA	Ureas

Apéndice 39. *Matriz de datos de propiedades fisicoquímicas de herbicidas seleccionados (Continuación).*

N°	NOMBRE	Categoría Toxicológica Mayor DL50 (mg/Kg) Oral Ratas - Presentación Comercial - (SEGÚN REGISTRO DEL ICA)	Categoría Toxicológica Mayor DL50 (mg/Kg) Oral Ratas - Presentación Comercial - (SEGÚN REGISTRO DEL ICA)	GRUPO FUNCIONAL IUPAC	FAMILIA QUÍMICA, GRUPO TOXÓFORO
13	EPTC (S-etil dipropiltiocarbamato) - CAS: 759-94-4	4	LIGERAMENTE TÓXICO (CATEGORÍA 4)	ÉSTER	Tiocarbamatos
14	Glifosato - CAS: 1071-83-6	2	ALTAMENTE TÓXICO (CATEGORÍA 2)	ÁCIDO	Glicinas
15	Glufosinato - CAS: 53369-07-6	4	LIGERAMENTE TÓXICO (CATEGORÍA 4)	ÁCIDO	Ácidos fosfínicos
16	Imazetapir - CAS: 81335-77-5	3	MEDIANAMENTE TÓXICO (CATEGORÍA 3)	ÁCIDO	Imidazolinonas
17	Lenacil - CAS: 2164-08-1	4	LIGERAMENTE TÓXICO (CATEGORÍA 4)	CETONA	Uracilos
18	Metribuzina - CAS: 21087-64-9	3	MEDIANAMENTE TÓXICO (CATEGORÍA 3)	CETONA	Triazinonas

Apéndice 39. *Matriz de datos de propiedades fisicoquímicas de herbicidas seleccionados (Continuación).*

N°	NOMBRE	Categoría Toxicológica Mayor DL50 (mg/Kg) Oral Ratas - Presentación Comercial - (SEGÚN REGISTRO DEL ICA)	Categoría Toxicológica Mayor DL50 (mg/Kg) Oral Ratas - Presentación Comercial - (SEGÚN REGISTRO DEL ICA)	GRUPO FUNCIONAL IUPAC	FAMILIA QUÍMICA, GRUPO TOXÓFORO
19	Metsulfuron Metil - CAS: 74223-64-6	3	MEDIANAMENTE TÓXICO (CATEGORIA 3)	ÉSTER	Sulfonilureas
20	Norflurazon - CAS: 27314-13-2	3	MEDIANAMENTE TÓXICO (CATEGORIA 3)	CETONA	piridazinona
21	Paraquat - CAS: 1910-42-5	1	EXTREMEDAMENTE TÓXICO (CATEGORIA 1)	AMINA	Bipiridilos
22	Pendimetalina - CAS: 40487-42-1	2	ALTAMENTE TÓXICO (CATEGORÍA 2)	AMINA	Dinitroanilinas
23	Propanil - CAS: 709-98-8	2	ALTAMENTE TÓXICO (CATEGORÍA 2)	AMIDA	Amidas
24	Quinclorac - CAS: 84087-01-4	2	ALTAMENTE TÓXICO (CATEGORÍA 2)	ÁCIDO	Ácidos quinolin carboxílicos

Apéndice 39. *Matriz de datos de propiedades fisicoquímicas de herbicidas seleccionados*
(Continuación).

N°	NOMBRE	Categoría Toxicológica Mayor DL50 (mg/Kg) Oral Ratas - Presentación Comercial - (SEGÚN REGISTRO DEL ICA)	Categoría Toxicológica Mayor DL50 (mg/Kg) Oral Ratas - Presentación Comercial - (SEGÚN REGISTRO DEL ICA)	GRUPO FUNCIONAL IUPAC	FAMILIA QUÍMICA, GRUPO TOXÓFORO
25	Sethoxydim - CAS: 74051-80-2	3	MEDIANAMENTE TÓXICO (CATEGORIA 3)	CETONA	Ciclohexanodionas

Apéndice 39. *Matriz de datos de propiedades fisicoquímicas de herbicidas seleccionados*
(Continuación).

N°	NOMBRE	SELECTIVIDAD	MODO DE ACCIÓN	TIPO DE SIEMBRA
1	2,4 d - (Ácido 2,4-diclorofenoxiacético) - CAS: 94-75-7	SI	SISTEMICO	POSTSIEMBRA
2	Acifluorfen - CAS: 50594-66-6	SI	CONTACTO	POSTSIEMBRA
3	Alacloro - CAS: 15972-60-8	SI	SISTEMICO	PRESIEMBRA
4	Asulam - CAS: 3337-71-1	SI	SISTEMICO	POSTSIEMBRA
5	Atrazina - CAS: 1912-24-9	SI	SISTEMICO Y CONTACTO	PRESIEMBRA Y POSTSIEMBRA
6	Bromoxinil - CAS: 1689-84-5	SI	CONTACTO	POSTSIEMBRA
7	Dalapón - CAS: 75-99-0	SI	SISTEMICO	PRESIEMBRA Y POSTSIEMBRA

Apéndice 39. *Matriz de datos de propiedades fisicoquímicas de herbicidas seleccionados (Continuación).*

N°	NOMBRE	SELECTIVIDAD	MODO DE ACCIÓN	TIPO DE SIEMBRA
8	Dicamba - CAS: 1918-00-9	SI	SISTEMICO	POSTSIEMBRA
9	Diclofop-metil - CAS: 51338-27- 3	SI	SISTEMICO Y CONTACTO	POSTSIEMBRA
10	Difenamida - CAS: 957-51-7	SI	SISTEMICO	PRESIEMBRA
11	Diflufenican CAS: 83164-33- 4	SI	SISTEMICO	PRESIEMBRA
12	Diuron - CAS: 330-54-1	SI	SISTEMICO	PRESIEMBRA Y POSTSIEMBRA
13	EPTC (S-etil dipropiltiocarba mato) - CAS: 759-94-4	SI	SISTEMICO	PRESIEMBRA
14	Glifosato - CAS: 1071-83-6	NO	SISTEMICO	POSTSIEMBRA

Apéndice 39. *Matriz de datos de propiedades fisicoquímicas de herbicidas seleccionados*
(Continuación).

N°	NOMBRE	SELECTIVIDAD	MODO DE ACCIÓN	TIPO DE SIEMBRA
15	Glufosinato - CAS: 53369-07- 6	NO	CONTACTO	POSTSIEMBRA
16	Imazetapir - CAS: 81335-77- 5	SI	SISTEMICO	POSTSIEMBRA
17	Lenacil - CAS: 2164-08-1	SI	SISTEMICO	PRESIEMBRA
18	Metribuzina - CAS: 21087-64- 9	SI	SISTEMICO	PRESIEMBRA Y POSTSIEMBRA
19	Metsulfuron Metil - CAS: 74223-64-6	SI	SISTEMICO	POSTSIEMBRA
20	Norflurazon - CAS: 27314-13- 2	SI	SISTEMICO	PRESIEMBRA
21	Paraquat - CAS: 1910-42-5	NO	CONTACTO	POSTSIEMBRA

Apéndice 39. *Matriz de datos de propiedades fisicoquímicas de herbicidas seleccionados*
(Continuación).

N°	NOMBRE	SELECTIVIDAD	MODO DE ACCIÓN	TIPO DE SIEMBRA
22	Pendimetalina - CAS: 40487-42- 1	SI	SISTEMICO	PRESIEMBRA
23	Propanil - CAS: 709-98-8	SI	CONTACTO	POSTSIEMBRA
24	Quinclorac - CAS: 84087-01- 4	SI	SISTEMICO	POSTSIEMBRA
25	Sethoxydim - CAS: 74051-80- 2	SI	SISTEMICO	POSTSIEMBRA

Apéndice 40. *Matriz de datos de propiedades fisicoquímicas normalizadas de herbicidas seleccionados.*

N°	NOMBRE	MOMENTO DIPOLAR (Debye)	ENERGIA TOTAL (KCAL/MOL)	ENERGIA TERMICA (KCAL/MOL)	CAPACIDAD CALORIFICA (kcal/mol-K)
1	2,4 d - (Ácido 2,4-diclorofenoxiacético) - CAS: 94-75-7	0,422220009	0,853097598	0,157340697	0,248987654
2	Acifluorfen - CAS: 50594-66-6	0,389107111	0,796012577	0,35255847	0,716881834
3	Alacloro - CAS: 15972-60-8	0,579077623	0,903887783	0,670231371	0,653474427
4	Asulam - CAS: 3337-71-1	0,626707625	0,922954606	0,314053805	0,417410935
5	Atrazina - CAS: 1912-24-9	0,593395707	0,938001878	0,426346178	0,378708995
6	Bromoxinil - CAS: 1689-84-5	0,410228863	0	0,035412744	0,138201058
7	Dalapón - CAS: 75-99-0	0,311745761	0,908754979	0	0
8	Dicamba - CAS: 1918-00-9	0	0,853098732	0,157219363	0,262758377
9	Diclofop-metil - CAS: 51338-27-3	0,595655755	0,772854954	0,541295343	0,739343915
10	Difenamida - CAS: 957-51-7	0,372127507	1	0,59059872	0,536380952

Apéndice 40. *Matriz de datos de propiedades fisicoquímicas normalizadas de herbicidas seleccionados (Continuación).*

N°	NOMBRE	MOMENTO DIPOLAR (Debye)	ENERGIA TOTAL (KCAL/MOL)	ENERGIA TERMICA (KCAL/MOL)	CAPACIDAD CALORIFICA (kcal/mol-K)
11	Diflufenican CAS: 83164-33-4	0,301303915	0,845712088	0,546014811	0,891075838
12	Diuron - CAS: 330-54-1	0,66386844	0,853187294	0,299234342	0,362426808
13	EPTC (S-etil dipropiltiocarbamato) - CAS: 759-94-4	0,194384421	0,972342342	0,544157148	0,417608466
14	Glifosato - CAS: 1071- 83-6	0,219099842	0,970484691	0,167290072	0,211202822
15	Glufosinato - CAS: 53369-07-6	0,189070537	0,969780654	0,306547843	0,321693122
16	Imazetapir - CAS: 81335-77-5	0,568067713	0,95348002	0,691632149	0,758320988
17	Lenacil - CAS: 2164-08- 1	0,424711886	0,996593239	0,610924229	0,471153439
18	Metribuzina - CAS: 21087-64-9	0,204832625	0,946679135	0,418911343	0,44431746
19	Metsulfuron Metil - CAS: 74223-64-6	0,478005232	0,809034623	0,63733735	0,941601411
20	Norflurazon - CAS: 27314-13-2	1	0,851549049	0,356098071	0,549488536

Apéndice 40. *Matriz de datos de propiedades fisicoquímicas normalizadas de herbicidas seleccionados (Continuación).*

N°	NOMBRE	MOMENTO DIPOLAR (Debye)	ENERGIA TOTAL (KCAL/MOL)	ENERGIA TERMICA (KCAL/MOL)	CAPACIDAD CALORIFICA (kcal/mol-K)
21	Paraquat - CAS: 1910-42-5	0,375479936	0,844545811	0,457629388	0,483132275
22	Pendimetalina - CAS: 40487-42-1	0,222687788	0,953728584	0,671059788	0,727929453
23	Propanil - CAS: 709-98-8	0,419963777	0,864727638	0,249876574	0,266088183
24	Quinclorac - CAS: 84087-01-4	0,295373134	0,841598582	0,16268357	0,287463845
25	Sethoxydim - CAS: 74051-80-2	0,811437885	0,876177795	1	1

Apéndice 40. *Matriz de datos de propiedades fisicoquímicas normalizadas de herbicidas seleccionados (Continuación).*

N°	NOMBRE	ENTROPIA (kcal/mol-K)	POLARIDAD α (C*m ² /V)	PESO MOLECULAR (g/mol)	TEMPERATURA DE FUSION (K)
1	2,4 d - (Ácido 2,4-diclorofenoxiacético) - CAS: 94-75-7	0,263727213	0,325172839	0,310468309	0,388316151
2	Acifluorfen - CAS: 50594-66-6	0,755215186	0,774849121	0,870091115	0,457044674
3	Alacloro - CAS: 15972-60-8	0,635805755	0,643621796	0,504515975	0,058419244
4	Asulam - CAS: 3337-71-1	0,376337066	0,417669744	0,347232722	0,412371134
5	Atrazina - CAS: 1912-24-9	0,351539196	0,452940712	0,289300919	0,501718213
6	Bromoxinil - CAS: 1689-84-5	0,155456235	0,3543454	0,53292484	0,567010309
7	Dalapón - CAS: 75-99-0	0	0	0	0,487972509
8	Dicamba - CAS: 1918-00-9	0,254175664	0,31999508	0,310587674	0,288659794
9	Diclofop-metil - CAS: 51338-27-3	0,749389846	0,858800171	0,788723988	0,04467354
10	Difenamida - CAS: 957-51-7	0,50454477	0,652513769	0,383320734	0,378006873

Apéndice 40. *Matriz de datos de propiedades fisicoquímicas normalizadas de herbicidas seleccionados (Continuación).*

N°	NOMBRE	ENTROPIA (kcal/mol-K)	POLARIDAD α (C*m ² /V)	PESO MOLECULAR (g/mol)	TEMPERATURA DE FUSION (K)
11	Diflufenican CAS: 83164-33-4	0,873097976	1	1	0,467353952
12	Diuron - CAS: 330-54-1	0,381228343	0,475018665	0,358572395	0,453608247
13	EPTC (S-etil dipropiltiocarbamato) - CAS: 759-94-4	0,423642846	0,402979803	0,184418891	0
14	Glifosato - CAS: 1071-83-6	0,217646763	0,087844474	0,103847531	0,704467354
15	Glufosinato - CAS: 53369-07-6	0,317922965	0,195904525	0,151832252	0,652920962
16	Imazetapir - CAS: 81335-77-5	0,690172249	0,777076943	0,582341941	0,515463918
17	Lenacil - CAS: 2164-08-1	0,340762316	0,537822952	0,363346994	1
18	Metribuzina - CAS: 21087-64-9	0,356199468	0,471002255	0,283770342	0,343642612
19	Metsulfuron Metil - CAS: 74223-64-6	0,942047908	0,932307853	0,948513906	0,4604811
20	Norflurazon - CAS: 27314-13-2	0,509847838	0,668319381	0,639398401	0,515463918

Apéndice 40. *Matriz de datos de propiedades fisicoquímicas normalizadas de herbicidas seleccionados (Continuación).*

N°	NOMBRE	ENTROPIA (kcal/mol-K)	POLARIDAD α (C*m ² /V)	PESO MOLECULAR (g/mol)	TEMPERATURA DE FUSION (K)
21	Paraquat - CAS: 1910-42-5	0,469652991	0,772354235	0,172203875	0,948453608
22	Pendimetalina - CAS: 40487-42-1	0,639592226	0,756993138	0,550431703	0,103092784
23	Propanil - CAS: 709-98-8	0,236900517	0,423956147	0,298850117	0,23024055
24	Quinclorac - CAS: 84087-01-4	0,253603174	0,498405556	0,394222735	0,859106529
25	Sethoxydim - CAS: 74051-80-2	1	0,948215366	0,734213982	0,223367698

Apéndice 40. *Matriz de datos de propiedades fisicoquímicas normalizadas de herbicidas seleccionados (Continuación).*

N°	NOMBRE	PUNTO DE EBULLICION NORMAL (K)	DENSIDAD A 298,15 K - (g/ml)	Constante de disociación pKa	Coefficiente de Adsorción de carbono orgánico (Log KOC):
1	2,4 d - (Ácido 2,4-diclorofenoxiacético) - CAS: 94-75-7	0,109649123	0,000296428	0,366898148	0,269982624
2	Acifluorfen - CAS: 50594-66-6	0,589181287	1	0,325810185	0,882493484
3	Alacloro - CAS: 15972-60-8	0	0,000107503	0,283564815	0,397480452
4	Asulam - CAS: 3337-71-1	0,517178363	0,0002977	0,493055556	0,256733275
5	Atrazina - CAS: 1912-24-9	0,328947368	0,000222639	0,309027778	0,418114683
6	Bromoxinil - CAS: 1689-84-5	0,302631579	0,00079514	0,449074074	0,478062554
7	Dalapón - CAS: 75-99-0	0,158991228	0,000279889	0,333333333	0
8	Dicamba - CAS: 1918-00-9	0,413194444	0,000394389	0,353009259	0,221980886
9	Diclofop-metil - CAS: 51338-27-3	0,618603801	0,000229	0	0,688314509
10	Difenamida - CAS: 957-51-7	0,515296053	0,000159028	0,173611111	0,814943527

Apéndice 40. *Matriz de datos de propiedades fisicoquímicas normalizadas de herbicidas seleccionados (Continuación).*

N°	NOMBRE	PUNTO DE EBULLICION NORMAL (K)	DENSIDAD A 298,15 K - (g/ml)	Constante de disociación pKa	Coefficiente de Adsorción de carbono orgánico (Log KOC):
11	Diflufenican CAS: 83164-33-4	0,504751462	0,000310423	0,736689815	1
12	Diuron - CAS: 330-54-1	0,148026316	0,000337139	0,09837963	0,368592528
13	EPTC (S-etil dipropiltiocarbamato) - CAS: 759-94-4	0,24122807	0	0,143518519	0,428757602
14	Glifosato - CAS: 1071-83-6	0,668494152	0,000502529	0,284722222	0,181798436
15	Glufosinato - CAS: 53369-07-6	0,765899123	0,00028625	0,358796296	0,229148566
16	Imazetapir - CAS: 81335-77-5	0,14619883	0,000209917	0,439814815	0,587749783
17	Lenacil - CAS: 2164-08-1	0,504751462	0,000235361	0,831018519	0,397914857
18	Metribuzina - CAS: 21087-64-9	0,058479532	0,000209917	0,204282407	0,573631625
19	Metsulfuron Metil - CAS: 74223-64-6	1	0,000332687	0,361689815	0,304735013
20	Norflurazon - CAS: 27314-13-2	0,448099415	0,000311377	0,278356481	0,673327541

Apéndice 40. *Matriz de datos de propiedades fisicoquímicas normalizadas de herbicidas seleccionados (Continuación).*

N°	NOMBRE	PUNTO DE EBULLICION NORMAL (K)	DENSIDAD A 298,15 K - (g/ml)	Constante de disociación pKa	Coefficiente de Adsorción de carbono orgánico (Log KOC):
21	Paraquat - CAS: 1910-42-5	0,385142544	0,000388028	0,387731481	0,516507385
22	Pendimetalina - CAS: 40487-42-1	0,420321637	0,000139945	0,084490741	0,784752389
23	Propanil - CAS: 709-98-8	0,491593567	0,000190834	1	0,40356212
24	Quinclorac - CAS: 84087-01-4	0,557383041	0,00050889	0,025462963	0,396611642
25	Sethoxydim - CAS: 74051-80-2	0,615895468	0,70675233	0,467592593	0,655299739

Apéndice 40. *Matriz de datos de propiedades fisicoquímicas normalizadas de herbicidas seleccionados (Continuación).*

N°	NOMBRE	Solubilidad en agua (mg/L a 25°C)	Presión de vapor (Pa a 25°C)	coeficiente de partición de octanol agua (Log KOW)	Ley de Henry (Pa·m ³ /mol at 25°C)
1	2,4 d - (Ácido 2,4-diclorofenoacético) - CAS: 94-75-7	0,000245243	0,00416418	0,765168539	0,010731132
2	Acifluorfen - CAS: 50594-66-6	0,000175024	5,88059E-06	0,865168539	3,55542E-06
3	Alacloro - CAS: 15972-60-8	1,30313E-05	0,003059702	0,84494382	0,023744104
4	Asulam - CAS: 3337-71-1	0,001844367	0,000207463	0,479775281	9,82901E-06
5	Atrazina - CAS: 1912-24-9	0,000156119	0,004268656	0,742696629	0,002235259
6	Bromoxinil - CAS: 1689-84-5	3,18634E-05	0,000344776	0,830337079	0,001131486
7	Dalapón - CAS: 75-99-0	0,00542466	1	0,638202247	1
8	Dicamba - CAS: 1918-00-9	0,000321374	0,007895522	0,697752809	0,002059552
9	Diclofop-metil - CAS: 51338-27-3	4,20876E-07	0,000102985	0,968539326	0,002252358
10	Difenamida - CAS: 957-51-7	7,16299E-05	0,000649254	0,770786517	0,000821344

Apéndice 40. *Matriz de datos de propiedades fisicoquímicas normalizadas de herbicidas seleccionados (Continuación).*

N°	NOMBRE	Solubilidad en agua (mg/L a 25°C)	Presión de vapor (Pa a 25°C)	coeficiente de partición de octanol agua (Log KOW)	Ley de Henry (Pa·m ³ /mol at 25°C)
11	Diflufenican CAS: 83164-33-4	0	5,98504E-07	1	0,000565035
12	Diuron - CAS: 330-54-1	0,000109769	0,00069403	0,750561798	0,000558373
13	EPTC (S-etil dipropiltiocarbamato) - CAS: 759-94-4	6,54401E-05	0,00561194	0,81011236	0,614386792
14	Glifosato - CAS: 1071- 83-6	0,008758967	6,41464E-09	0	4,02417E-12
15	Glufosinato - CAS: 53369-07-6	1	1,71609E-08	0,004494382	0
16	Imazetapir - CAS: 81335-77-5	6,15496E-05	3,05672E-11	0,741573034	6,02433E-09
17	Lenacil - CAS: 2164-08- 1	4,84839E-05	4,48926E-10	0,796629213	8,26635E-08
18	Metribuzina - CAS: 21087-64-9	0,000951667	0,000771642	0,640449438	6,59198E-05
19	Metsulfuron Metil - CAS: 74223-64-6	3,83452E-05	4,41492E-11	0,696629213	1,78345E-08
20	Norflurazon - CAS: 27314-13-2	9,24693E-05	5,56716E-05	0,707865169	6,92217E-05

Apéndice 40. *Matriz de datos de propiedades fisicoquímicas normalizadas de herbicidas seleccionados (Continuación).*

N°	NOMBRE	Solubilidad en agua (mg/L a 25°C)	Presión de vapor (Pa a 25°C)	coeficiente de partición de octanol agua (Log KOW)	Ley de Henry (Pa·m ³ /mol at 25°C)
21	Paraquat - CAS: 1910-42-5	0,000288309	0,000370149	0,726966292	0,009068396
22	Pendimetalina - CAS: 40487-42-1	6,53014E-05	0	0,743820225	3,80601E-12
23	Propanil - CAS: 709-98-8	6,12868E-05	4,20895E-05	0,794382022	0,005668042
24	Quinclorac - CAS: 84087-01-4	5,53306E-05	5,89519E-08	0,783146067	9,75825E-06
25	Sethoxydim - CAS: 74051-80-2	9,63431E-07	1,68623E-08	0,941573034	0,000186792

Apéndice 40. *Matriz de datos de propiedades fisicoquímicas normalizadas de herbicidas seleccionados (Continuación).*

N°	NOMBRE	Factor de bioconcentración (BCF)	Vida media (Días)	Indice de Refracción	coeficiente de partición octanol aire (KOA)
1	2,4 d - (Ácido 2,4-diclorofenoxiacético) - CAS: 94-75-7	0	0,030226305	0,402597403	0,181058048
2	Acifluorfen - CAS: 50594-66-6	0	0,241005712	0,415584416	0,475237176
3	Alacloro - CAS: 15972-60-8	0,084111548	0,003199278	0,25974026	0,288712012
4	Asulam - CAS: 3337-71-1	0	0,00651632	0,428571429	0,280430937
5	Atrazina - CAS: 1912-24-9	0,005597379	0,006221908	0,541125541	0,259607654
6	Bromoxinil - CAS: 1689-84-5	0,024772893	1	1	0,422977971
7	Dalapón - CAS: 75-99-0	0	0,377495142	0,004329004	0,057565525
8	Dicamba - CAS: 1918-00-9	0	0,068872794	0,41991342	0,230181701
9	Diclofop-metil - CAS: 51338-27-3	0,607658001	0,009617461	0,354978355	0,323926676
10	Difenamida - CAS: 957-51-7	0,024120261	0,006378928	0,385281385	0,425470333

Apéndice 40. *Matriz de datos de propiedades fisicoquímicas normalizadas de herbicidas seleccionados (Continuación).*

N°	NOMBRE	Factor de bioconcentración (BCF)	Vida media (Días)	Indice de Refracción	coeficiente de partición octanol aire (KOA)
11	Diflufenican CAS: 83164-33-4	1	0,064221084	0,402597403	0,271747869
12	Diuron - CAS: 330-54-1	0,01689893	0,017841371	0,367965368	0,31910275
13	EPTC (S-etil dipropiltiocarbamato) - CAS: 759-94-4	0,047428545	0,006064888	0	0
14	Glifosato - CAS: 1071-83-6	0	0,001197276	0,212121212	0,513024602
15	Glufosinato - CAS: 53369-07-6	0	0,003670337	0,090909091	0,266119955
16	Imazetapir - CAS: 81335-77-5	0	0,01179611	0,567099567	0,850136678
17	Lenacil - CAS: 2164-08-1	0,037605163	0,003061885	0,454545455	0,417591253
18	Metribuzina - CAS: 21087-64-9	0,000764512	0,010049265	0,597402597	0,291284772
19	Metsulfuron Metil - CAS: 74223-64-6	0,001321368	0,079981943	0,493506494	0,588117061
20	Norflurazon - CAS: 27314-13-2	0,007304393	0,019686353	0,376623377	0,30197781

Apéndice 40. *Matriz de datos de propiedades fisicoquímicas normalizadas de herbicidas seleccionados (Continuación).*

N°	NOMBRE	Factor de bioconcentración (BCF)	Vida media (Días)	Indice de Refracción	coeficiente de partición octanol aire (KOA)
21	Paraquat - CAS: 1910-42-5	0,010923534	0,133329408	0,692640693	0,076700434
22	Pendimetalina - CAS: 40487-42-1	0,014966461	0,005456437	0,432900433	1
23	Propanil - CAS: 709-98-8	0,036410083	0,054073682	0,337662338	0,227367744
24	Quinclorac - CAS: 84087-01-4	0	0,162908006	0,930735931	0,48882457
25	Sethoxydim - CAS: 74051-80-2	0,396103533	0	0,233766234	0,5657662

Apéndice 40. *Matriz de datos de propiedades fisicoquímicas normalizadas de herbicidas seleccionados (Continuación).*

N°	NOMBRE	Volatilización desde agua (atm-m ³ /mol)	Toxicología DL50 (mg/Kg) ORAL - RATAS - BIBLIOGRAFÍA	Categoría Toxicológica DL50 (mg/Kg) (SEGÚN RESOLUCIÓN 10834 DE 1992)	Categoría Toxicológica Mayor DL50 (mg/Kg) Oral Ratas - Presentación Comercial - (SEGÚN REGISTRO DEL ICA)
1	2,4 d - (Ácido 2,4-diclorofenoxiacético) - CAS: 94-75-7	0,002226415	0,02266055	0	0,333333333
2	Acifluorfen - CAS: 50594-66-6	3,79245E-06	0,116513761	1	1
3	Alacloro - CAS: 15972-60-8	0,00052327	0,076146789	1	0,333333333
4	Asulam - CAS: 3337-71-1	1,07547E-07	0,174311927	1	1
5	Atrazina - CAS: 1912-24-9	0,000148428	0,052477064	1	0,666666667
6	Bromoxinil - CAS: 1689-84-5	8,30189E-06	0,008256881	0	0,666666667
7	Dalapón - CAS: 75-99-0	0,005672956	0,847614679	1	1
8	Dicamba - CAS: 1918-00-9	0,000137107	0,086146789	1	0,666666667
9	Diclofop-metil - CAS: 51338-27-3	0,002402516	0,037798165	1	0,666666667
10	Difenamida - CAS: 957-51-7	2,28302E-06	0,053669725	1	1

Apéndice 40. *Matriz de datos de propiedades fisicoquímicas normalizadas de herbicidas seleccionados (Continuación).*

N°	NOMBRE	Volatilización desde agua (atm-m ³ /mol)	Toxicología DL50 (mg/Kg) ORAL - RATAS - BIBLIOGRAFÍA	Categoría Toxicológica DL50 (mg/Kg) (SEGÚN RESOLUCIÓN 10834 DE 1992)	Categoría Toxicológica Mayor DL50 (mg/Kg) Oral Ratas - Presentación Comercial - (SEGÚN REGISTRO DEL ICA)
11	Diflufenican CAS: 83164-33-4	0,020440252	0,174311927	1	0,333333333
12	Diuron - CAS: 330-54-1	3,16981E-05	0,08412844	1	0,333333333
13	EPTC (S-etil dipropiltiocarbamato) - CAS: 759-94-4	1	0,074862385	1	1
14	Glifosato - CAS: 1071-83-6	0	0,504587156	1	0,333333333
15	Glufosinato - CAS: 53369-07-6	3,30561E-11	0,174311927	1	1
16	Imazetapir - CAS: 81335-77-5	6,51522E-12	0,449541284	1	0,666666667
17	Lenacil - CAS: 2164-08-1	4,84906E-06	1	1	1
18	Metribuzina - CAS: 21087-64-9	7,35849E-06	0,091743119	1	0,666666667
19	Metsulfuron Metil - CAS: 74223-64-6	4,72953E-09	0,449541284	1	0,666666667
20	Norflurazon - CAS: 27314-13-2	2,15723E-05	0,724770642	1	0,666666667

Apéndice 40. *Matriz de datos de propiedades fisicoquímicas normalizadas de herbicidas seleccionados (Continuación).*

N°	NOMBRE	Volatilización desde agua (atm-m ³ /mol)	Toxicología DL50 (mg/Kg) ORAL - RATAS - BIBLIOGRAFÍA	Categoría Toxicológica DL50 (mg/Kg) (SEGÚN RESOLUCIÓN 10834 DE 1992)	Categoría Toxicológica Mayor DL50 (mg/Kg) Oral Ratas - Presentación Comercial - (SEGÚN REGISTRO DEL ICA)
21	Paraquat - CAS: 1910-42-5	0,020251572	0	0	0
22	Pendimetalina - CAS: 40487-42-1	6,80503E-14	0,087155963	1	0,333333333
23	Propanil - CAS: 709-98-8	0,001075472	0,024495413	0	0,333333333
24	Quinclorac - CAS: 84087-01-4	5,98742E-07	0,191743119	1	0,333333333
25	Sethoxydim - CAS: 74051-80-2	1,35849E-06	0,28440367	1	0,666666667

Apéndice 41. Referencias bibliográficas de la matriz de datos de propiedades fisicoquímicas de herbicidas seleccionados.

N°	NOMBRE	ESTRUCTURA MOLECULAR	FORMULA MOLECULAR	MOMENTO DIPOLAR (Debye)
1	2,4 d - (Ácido 2,4-diclorofenoxiacético) - CAS: 94- 75 - 7	<p>Beltrán Martí, R. (2019). Desarrollo y aplicación de un polímero de impronta molecular para la extracción del plaguicida MCPA en muestras de agua (Doctoral dissertation).</p> <p>PAG 3</p> <p>https://riunet.upv.es/bitstream/handle/10251/126134/BeltrBeltr%C3%A1n%20Mart%C3%AD,%20R.%20(2019).%20Desarrollo%20y%20aplicaci%C3%B3n%20de%20un%20pol%C3%ADmero%20de%20impronta%20molecular%20para%20la%20extracci%C3%B3n%20del%20plaguicida%20MCPA%20en%20muestras%20de%20agua%20(Doctoral%20dissertation).%C3%A1n%20-%20DESARROLLO%20Y%20APLICACI%C3%93N%20DE%20UN%20POL%C3%8DMERO%20DE%20IMPONTA%20MOLECULAR%20PARA%20LA%20EXTRACCI%C3%93N%20DEL%20PLA....pdf?sequence=1&isAllowed=y</p>	<p>Ecología Humana, C. P. (1993). Acido 2, 4-diclorofenoxiacético (2, 4-D): guía para la salud y la seguridad. Guía para la Salud y la Seguridad; 5.</p> <p>PAG 10</p> <p>https://iris.paho.org/bitstream/handle/10665.2/31241/9275370621-spa.pdf?sequence=1&isAllowed=y</p>	<p>Dennington, R., Keith, T., & Millam, J. (2009). GaussView, version 5</p> <p>Gaussian09, R. A. (2009). 1, mj frisch, gw trucks, hb schlegel, ge scuseria, ma robb, jr cheeseman, g. Scalmani, v. Barone, b. Mennucci, ga petersson et al., gaussian. Inc., Wallingford CT, 121, 150-166.</p>

Apéndice 41. Referencias bibliográficas de la matriz de datos de propiedades fisicoquímicas de herbicidas seleccionados (Continuación).

N°	NOMBRE	ENERGIA TOTAL (KCAL/MOL)	ENERGIA TERMICA (KCAL/MOL)	CAPACIDAD CALORIFICA (kcal/mol-K)	ENTROPIA (kcal/mol-K)
1	2,4 d - (Ácido 2,4-diclorofenoxiacético) - CAS: 94-75-7	Dennington, R., Keith, T., & Millam, J. (2009). GaussView, version 5 Gaussian09, R. A. (2009). 1, mj frisch, gw trucks, hb schlegel, ge scuseria, ma robb, jr cheeseman, g. Scalmani, v. Barone, b. Mennucci, ga petersson et al., gaussian. Inc., Wallingford CT, 121, 150-166.	Dennington, R., Keith, T., & Millam, J. (2009). GaussView, version 5 Gaussian09, R. A. (2009). 1, mj frisch, gw trucks, hb schlegel, ge scuseria, ma robb, jr cheeseman, g. Scalmani, v. Barone, b. Mennucci, ga petersson et al., gaussian. Inc., Wallingford CT, 121, 150-166.	Dennington, R., Keith, T., & Millam, J. (2009). GaussView, version 5 Gaussian09, R. A. (2009). 1, mj frisch, gw trucks, hb schlegel, ge scuseria, ma robb, jr cheeseman, g. Scalmani, v. Barone, b. Mennucci, ga petersson et al., gaussian. Inc., Wallingford CT, 121, 150-166.	Dennington, R., Keith, T., & Millam, J. (2009). GaussView, version 5 Gaussian09, R. A. (2009). 1, mj frisch, gw trucks, hb schlegel, ge scuseria, ma robb, jr cheeseman, g. Scalmani, v. Barone, b. Mennucci, ga petersson et al., gaussian. Inc., Wallingford CT, 121, 150-166.

Apéndice 41. Referencias bibliográficas de la matriz de datos de propiedades fisicoquímicas de herbicidas seleccionados (Continuación).

N°	NOMBRE	POLARIDAD α (C*m ² /V)	PESO MOLECULAR (g/mol)	TEMPERATURA DE FUSION (K)	PUNTO DE EBULLICION NORMAL (K)
1	2,4 d - (Ácido 2,4-diclorofenoxiacético) - CAS: 94- 75 - 7	Dennington, R., Keith, T., & Millam, J. (2009). GaussView, version 5 Gaussian09, R. A. (2009). 1, mj frisch, gw trucks, hb schlegel, ge scuseria, ma robb, jr cheeseman, g. Scalmani, v. Barone, b. Mennucci, ga petersson et al., gaussian. Inc., Wallingford CT, 121, 150-166.	Bennett, G. (1992). International chemical safety cards: by Commission of the European Communities and International Programme on Chemical Safety, World Health Organization, Geneva, Switzerland, 1990, ISBN 92. Elsevier. https://www.ilo.org/safework/info/publications/WCMS_113134/lang--en/index.htm	Bennett, G. (1992). International chemical safety cards: by Commission of the European Communities and International Programme on Chemical Safety, World Health Organization, Geneva, Switzerland, 1990, ISBN 92. Elsevier. https://www.ilo.org/safework/info/publications/WCMS_113134/lang--en/index.htm	Soto Durán, S. J. (2010). Cuantificación del uso de 2.4-D en Colombia, y análisis de su posible riesgo toxicológico (Bachelor's thesis, Bogotá-Uniandes). Pag 14 https://repositorio.uniandes.edu.co/bitstream/handle/1992/14419/u402572.pdf?sequence=1&isAllowed=y

Apéndice 41. Referencias bibliográficas de la matriz de datos de propiedades fisicoquímicas de herbicidas seleccionados (Continuación).

N°	NOMBRE	DENSIDAD A 298,15 K - (g/ml)	Constante de disociación pKa	Coeficiente de Adsorción de carbono orgánico (Log KOC):	Solubilidad en agua (mg/L a 25°C)
1	2,4 d - (Ácido 2,4-diclorofenoxiacético) - CAS: 94- 75 - 7	<p>Merckmillipore. (2015). 2,4-Dichlorophenoxyacetic acid for synthesis. https://www.merckmillipore.com/CO/es/product/24-Dichlorophenoxyacetic-acid,MDA_CHEM-820451</p> <p>PUBCHEM BASE DE DATOS</p> <p>Kim, S., Thiessen, P. A., Bolton, E. E., Chen, J., Fu, G., Gindulyte, A., ... & Wang, J. (2016). PubChem substance and compound databases. <i>Nucleic acids research</i>, 44(D1), D1202-D1213.</p>	<p>Chemical Book. 2020. "Chemical Search Engine." Base de Datos de Productos Químicos. Retrieved September 12, 2020 (https://www.chemicalbook.com/ProductIndex_EN.aspx).</p>	<p>Pence, H. E., & Williams, A. (2010). ChemSpider: an online chemical information resource.</p> <p>Mackay, D., Shiu, W. Y., & Lee, S. C. (2006). Handbook of physical-chemical properties and environmental fate for organic chemicals. CRC press.</p>	<p>Pence, H. E., & Williams, A. (2010). ChemSpider: an online chemical information resource.</p> <p>Mackay, D., Shiu, W. Y., & Lee, S. C. (2006). Handbook of physical-chemical properties and environmental fate for organic chemicals. CRC press.</p>

Apéndice 41. Referencias bibliográficas de la matriz de datos de propiedades fisicoquímicas de herbicidas seleccionados (Continuación).

N°	NOMBRE	Presión de vapor (Pa a 25°C)	coeficiente de partición de octanol agua (Log KOW)	Ley de Henry (Pa·m ³ /mol at 25°C)	Factor de bioconcentración (BCF)
1	2,4 d - (Ácido 2,4-diclorofenoxiacético) - CAS: 94- 75 - 7	<p>Pence, H. E., & Williams, A. (2010). ChemSpider: an online chemical information resource.</p> <p>Mackay, D., Shiu, W. Y., & Lee, S. C. (2006). Handbook of physical-chemical properties and environmental fate for organic chemicals. CRC press.</p>	<p>Pence, H. E., & Williams, A. (2010). ChemSpider: an online chemical information resource.</p> <p>Mackay, D., Shiu, W. Y., & Lee, S. C. (2006). Handbook of physical-chemical properties and environmental fate for organic chemicals. CRC press.</p>	<p>Pence, H. E., & Williams, A. (2010). ChemSpider: an online chemical information resource.</p> <p>Mackay, D., Shiu, W. Y., & Lee, S. C. (2006). Handbook of physical-chemical properties and environmental fate for organic chemicals. CRC press.</p>	<p>Pence, H. E., & Williams, A. (2010). ChemSpider: an online chemical information resource.</p> <p>Mackay, D., Shiu, W. Y., & Lee, S. C. (2006). Handbook of physical-chemical properties and environmental fate for organic chemicals. CRC press.</p>

Apéndice 41. Referencias bibliográficas de la matriz de datos de propiedades fisicoquímicas de herbicidas seleccionados (Continuación).

N°	NOMBRE	Vida media (Días)	Indice de Refracción	coeficiente de partición octanol aire (KOA)	Volatilización desde agua (atm-m ³ /mol)
1	2,4 d - (Ácido 2,4-diclorofenoxiacético) - CAS: 94- 75 - 7	Pence, H. E., & Williams, A. (2010). ChemSpider: an online chemical information resource. Mackay, D., Shiu, W. Y., & Lee, S. C. (2006). Handbook of physical-chemical properties and environmental fate for organic chemicals. CRC press.	Pence, H. E., & Williams, A. (2010). ChemSpider: an online chemical information resource. Mackay, D., Shiu, W. Y., & Lee, S. C. (2006). Handbook of physical-chemical properties and environmental fate for organic chemicals. CRC press.	Pence, H. E., & Williams, A. (2010). ChemSpider: an online chemical information resource. Mackay, D., Shiu, W. Y., & Lee, S. C. (2006). Handbook of physical-chemical properties and environmental fate for organic chemicals. CRC press.	Pence, H. E., & Williams, A. (2010). ChemSpider: an online chemical information resource. Mackay, D., Shiu, W. Y., & Lee, S. C. (2006). Handbook of physical-chemical properties and environmental fate for organic chemicals. CRC press.

Apéndice 41. Referencias bibliográficas de la matriz de datos de propiedades fisicoquímicas de herbicidas seleccionados (Continuación).

N°	NOMBRE	Toxicología DL50 (mg/Kg) ORAL - RATAS - BIBLIOGRAFÍA	Categoría Toxicológica DL50 (mg/Kg) (SEGÚN RESOLUCIÓN 10834 DE 1992)	Categoría Toxicológica DL50 (mg/Kg) (SEGÚN RESOLUCIÓN 10834 DE 1992)	Categoría Toxicológica Mayor DL50 (mg/Kg) Oral Ratas - Presentación Comercial - (SEGÚN REGISTRO DEL ICA)
1	2,4 d - (Ácido 2,4-diclorofenoxiacético) - CAS: 94- 75 - 7	Ecología Humana, C. P. (1993). Acido 2, 4-diclorofenoxiacético (2, 4-D): guía para la salud y la seguridad. Guía para la Salud y la Seguridad; 5. PAG 16 https://iris.paho.org/bitstream/handle/10665.2/31241/9275370621-spa.pdf?sequence=1&isAllowed=y	Ministerio de Salud de Colombia. (1992). RESOLUCIÓN 10834 DE 1992. Septiembre 07, 2020, de Ministerio de Salud de Colombia Sitio web: https://www.icbf.gov.co/cargues/avance/docs/resolucion_minsalud_10834_1992.htm	Ministerio de Salud de Colombia. (1992). RESOLUCIÓN 10834 DE 1992. Septiembre 07, 2020, de Ministerio de Salud de Colombia Sitio web: https://www.icbf.gov.co/cargues/avance/docs/resolucion_minsalud_10834_1992.htm	ICA. 2020. REGISTROS PLAGUICIDAS REGISTRADOS - 16 DE JULIO 2020. BOGOTA - COLOMBIA.

Apéndice 41. Referencias bibliográficas de la matriz de datos de propiedades fisicoquímicas de herbicidas seleccionados (Continuación).

N°	NOMBRE	Categoría Toxicológica Mayor DL50 (mg/Kg) Oral Ratas - Presentación Comercial - (SEGÚN REGISTRO DEL ICA)	GRUPO FUNCIONAL IUPAC	FAMILIA QUÍMICA, GRUPO TOXÓFORO	SELECTIVIDAD
1	2,4 d - (Ácido 2,4-diclorofenoxiacético) - CAS: 94- 75 - 7	ICA. 2020. REGISTROS PLAGUICIDAS REGISTRADOS - 16 DE JULIO 2020. BOGOTA - COLOMBIA.	Velasco, M. A., Y. Caballero Arroyo, and G. Quezad. 2006. Grupos Funcionales. Nomenclatura Y Reacciones Principales. Unam. Fernández, G. 2011. Nomenclatura En Química Orgánica. Germán Fernández.	Diez, P. (2013). Manejo de malezas problema: Modos de acción de herbicidas. Red de conocimiento en malezas resistentes. Rosario, Argentina.	de plaguicidas de Centroamérica, M. Consultado febrero del 2018.

Apéndice 41. Referencias bibliográficas de la matriz de datos de propiedades fisicoquímicas de herbicidas seleccionados (Continuación).

N°	NOMBRE	MODO DE ACCIÓN	TIPO DE SIEMBRA
1	2,4 d - (Ácido 2,4-diclorofenoxiacético) - CAS: 94- 75 - 7	Diez, P. (2013). Manejo de malezas problema: Modos de acción de herbicidas. Red de conocimiento en malezas resistentes. Rosario, Argentina.	Diez, P. (2013). Manejo de malezas problema: Modos de acción de herbicidas. Red de conocimiento en malezas resistentes. Rosario, Argentina.

Apéndice 41. Referencias bibliográficas de la matriz de datos de propiedades fisicoquímicas de herbicidas seleccionados (Continuación).

N°	NOMBRE	ESTRUCTURA MOLECULAR	FORMULA MOLECULAR	MOMENTO DIPOLAR (Debye)	ENERGIA TOTAL (KCAL/MOL)
2	Acifluorfen - CAS: 50594-66-6	Kim, S., Thiessen, P. A., Bolton, E. E., Chen, J., Fu, G., Gindulyte, A., Han, L., He, J., He, S., & Shoemaker, B. A. (2016). PubChem substance and compound databases. Nucleic Acids Research, 44(D1), D1202–D1213.	Kim, S., Thiessen, P. A., Bolton, E. E., Chen, J., Fu, G., Gindulyte, A., Han, L., He, J., He, S., & Shoemaker, B. A. (2016). PubChem substance and compound databases. Nucleic Acids Research, 44(D1), D1202–D1213.	Dennington, R., Keith, T., & Millam, J. (2009). GaussView, version 5 Gaussian09, R. A. (2009). 1, mj frisch, gw trucks, hb schlegel, ge scuseria, ma robb, jr cheeseman, g. Scalmani, v. Barone, b. Mennucci, ga petersson et al., gaussian. Inc., Wallingford CT, 121, 150-166.	Dennington, R., Keith, T., & Millam, J. (2009). GaussView, version 5 Gaussian09, R. A. (2009). 1, mj frisch, gw trucks, hb schlegel, ge scuseria, ma robb, jr cheeseman, g. Scalmani, v. Barone, b. Mennucci, ga petersson et al., gaussian. Inc., Wallingford CT, 121, 150-166.

Apéndice 41. Referencias bibliográficas de la matriz de datos de propiedades fisicoquímicas de herbicidas seleccionados (Continuación).

N°	NOMBRE	ENERGIA TERMICA (KCAL/MOL)	CAPACIDAD CALORIFICA (kcal/mol-K)	ENTROPIA (kcal/mol-K)	POLARIDAD α (C*m2/V)
2	Acifluorfen - CAS: 50594-66-6	Dennington, R., Keith, T., & Millam, J. (2009). GaussView, version 5 Gaussian09, R. A. (2009). 1, mj frisch, gw trucks, hb schlegel, ge scuseria, ma robb, jr cheeseman, g. Scalmani, v. Barone, b. Mennucci, ga petersson et al., gaussian. Inc., Wallingford CT, 121, 150-166.	Dennington, R., Keith, T., & Millam, J. (2009). GaussView, version 5 Gaussian09, R. A. (2009). 1, mj frisch, gw trucks, hb schlegel, ge scuseria, ma robb, jr cheeseman, g. Scalmani, v. Barone, b. Mennucci, ga petersson et al., gaussian. Inc., Wallingford CT, 121, 150-166.	Dennington, R., Keith, T., & Millam, J. (2009). GaussView, version 5 Gaussian09, R. A. (2009). 1, mj frisch, gw trucks, hb schlegel, ge scuseria, ma robb, jr cheeseman, g. Scalmani, v. Barone, b. Mennucci, ga petersson et al., gaussian. Inc., Wallingford CT, 121, 150-166.	Dennington, R., Keith, T., & Millam, J. (2009). GaussView, version 5 Gaussian09, R. A. (2009). 1, mj frisch, gw trucks, hb schlegel, ge scuseria, ma robb, jr cheeseman, g. Scalmani, v. Barone, b. Mennucci, ga petersson et al., gaussian. Inc., Wallingford CT, 121, 150-166.

Apéndice 41. Referencias bibliográficas de la matriz de datos de propiedades fisicoquímicas de herbicidas seleccionados (Continuación).

N°	NOMBRE	PESO MOLECULAR (g/mol)	TEMPERATURA DE FUSION (K)	PUNTO DE EBULLICION NORMAL (K)	DENSIDAD A 298,15 K - (g/ml)
2	Acifluorfen - CAS: 50594-66-6	Kim, S., Thiessen, P. A., Bolton, E. E., Chen, J., Fu, G., Gindulyte, A., Han, L., He, J., He, S., & Shoemaker, B. A. (2016). PubChem substance and compound databases. Nucleic Acids Research, 44(D1), D1202–D1213.	Kim, S., Thiessen, P. A., Bolton, E. E., Chen, J., Fu, G., Gindulyte, A., Han, L., He, J., He, S., & Shoemaker, B. A. (2016). PubChem substance and compound databases. Nucleic Acids Research, 44(D1), D1202–D1213.	Kim, S., Thiessen, P. A., Bolton, E. E., Chen, J., Fu, G., Gindulyte, A., Han, L., He, J., He, S., & Shoemaker, B. A. (2016). PubChem substance and compound databases. Nucleic Acids Research, 44(D1), D1202–D1213.	Humburg, N. E., & Colby, S. R. (1989). Manual de herbicidas de la sociedad de ciencias de la hierba de América. Kim, S., Thiessen, P. A., Bolton, E. E., Chen, J., Fu, G., Gindulyte, A., Han, L., He, J., He, S., & Shoemaker, B. A. (2016). PubChem

Apéndice 41. Referencias bibliográficas de la matriz de datos de propiedades fisicoquímicas de herbicidas seleccionados (Continuación).

N°	NOMBRE	Constante de disociación pKa	Coeficiente de Adsorción de carbono orgánico (Log KOC):	Solubilidad en agua (mg/L a 25°C)	Presión de vapor (Pa a 25°C)
2	Acifluorfen - CAS: 50594-66-6	Chemical Book. 2020. "Chemical Search Engine." Base de Datos de Productos Químicos. Retrieved September 12, 2020 (https://www.chemicalbook.com/ProductIndex_EN.aspx).	Pence, H. E., & Williams, A. (2010). ChemSpider: an online chemical information resource. Mackay, D., Shiu, W. Y., & Lee, S. C. (2006). Handbook of physical-chemical properties and environmental fate for organic chemicals. CRC press.	Pence, H. E., & Williams, A. (2010). ChemSpider: an online chemical information resource. Mackay, D., Shiu, W. Y., & Lee, S. C. (2006). Handbook of physical-chemical properties and environmental fate for organic chemicals. CRC press.	Pence, H. E., & Williams, A. (2010). ChemSpider: an online chemical information resource. Mackay, D., Shiu, W. Y., & Lee, S. C. (2006). Handbook of physical-chemical properties and environmental fate for organic chemicals. CRC press.

Apéndice 41. Referencias bibliográficas de la matriz de datos de propiedades fisicoquímicas de herbicidas seleccionados (Continuación).

N°	NOMBRE	coeficiente de partición de octanol agua (Log KOW)	Ley de Henry (Pa·m ³ /mol at 25°C)	Factor de bioconcentraci ón (BCF)	Vida media (Días)
2	Acifluorfen - CAS: 50594-66-6	Pence, H. E., & Williams, A. (2010). ChemSpider: an online chemical information resource. Mackay, D., Shiu, W. Y., & Lee, S. C. (2006). Handbook of physical- chemical properties and environmental fate for organic chemicals. CRC press.	Pence, H. E., & Williams, A. (2010). ChemSpider: an online chemical information resource. Mackay, D., Shiu, W. Y., & Lee, S. C. (2006). Handbook of physical- chemical properties and environmental fate for organic chemicals. CRC press.	Pence, H. E., & Williams, A. (2010). ChemSpider: an online chemical information resource. Mackay, D., Shiu, W. Y., & Lee, S. C. (2006). Handbook of physical- chemical properties and environmental fate for organic chemicals. CRC press.	Pence, H. E., & Williams, A. (2010). ChemSpider: an online chemical information resource. Mackay, D., Shiu, W. Y., & Lee, S. C. (2006). Handbook of physical- chemical properties and environmental fate for organic chemicals. CRC press.

Apéndice 41. Referencias bibliográficas de la matriz de datos de propiedades fisicoquímicas de herbicidas seleccionados (Continuación).

N°	NOMBRE	Indice de Refracción	coeficiente de partición octanol aire (KOA)	Volatilización desde agua (atm-m ³ /mol)	Toxicología DL50 (mg/Kg) ORAL -RATAS - BIBLIOGRAFÍA
2	Acifluorfen - CAS: 50594-66-6	Pence, H. E., & Williams, A. (2010). ChemSpider: an online chemical information resource. Mackay, D., Shiu, W. Y., & Lee, S. C. (2006). Handbook of physical-chemical properties and environmental fate for organic chemicals. CRC press.	Pence, H. E., & Williams, A. (2010). ChemSpider: an online chemical information resource. Mackay, D., Shiu, W. Y., & Lee, S. C. (2006). Handbook of physical-chemical properties and environmental fate for organic chemicals. CRC press.	Pence, H. E., & Williams, A. (2010). ChemSpider: an online chemical information resource. Mackay, D., Shiu, W. Y., & Lee, S. C. (2006). Handbook of physical-chemical properties and environmental fate for organic chemicals. CRC press.	ChemIDplus, U. S. 2014. "National Library of Medicine."

Apéndice 41. Referencias bibliográficas de la matriz de datos de propiedades fisicoquímicas de herbicidas seleccionados (Continuación).

N°	NOMBRE	Categoría Toxicológica DL50 (mg/Kg) (SEGÚN RESOLUCIÓN 10834 DE 1992)	Categoría Toxicológica DL50 (mg/Kg) (SEGÚN RESOLUCIÓN 10834 DE 1992)	Categoría Toxicológica Mayor DL50 (mg/Kg) Oral Ratas - Presentación Comercial - (SEGÚN REGISTRO DEL ICA)	Categoría Toxicológica Mayor DL50 (mg/Kg) Oral Ratas - Presentación Comercial - (SEGÚN REGISTRO DEL ICA)
2	Acifluorfen - CAS: 50594-66-6	Ministerio de Salud de Colombia. (1992). RESOLUCIÓN 10834 DE 1992. Septiembre 07, 2020, de Ministerio de Salud de Colombia Sitio web: https://www.icbf.gov.co/cargues/avance/docs/resolucion_minsalud_10834_1992.htm	Ministerio de Salud de Colombia. (1992). RESOLUCIÓN 10834 DE 1992. Septiembre 07, 2020, de Ministerio de Salud de Colombia Sitio web: https://www.icbf.gov.co/cargues/avance/docs/resolucion_minsalud_10834_1992.htm	ICA. 2020. REGISTROS PLAGUICIDAS REGISTRADOS - 16 DE JULIO 2020. BOGOTA - COLOMBIA.	ICA. 2020. REGISTROS PLAGUICIDAS REGISTRADOS - 16 DE JULIO 2020. BOGOTA - COLOMBIA.

Apéndice 41. Referencias bibliográficas de la matriz de datos de propiedades fisicoquímicas de herbicidas seleccionados (Continuación).

N°	NOMBRE	GRUPO FUNCIONAL IUPAC	FAMILIA QUÍMICA, GRUPO TOXÓFORO	SELECTIVIDAD	MODO DE ACCIÓN	TIPO DE SIEMBRA
2	Acifluorfen - CAS: 50594-66-6	<p>Velasco, M. A., Y. Caballero Arroyo, and G. Quezad. 2006. Grupos Funcionales. Nomenclatura Y Reacciones Principales. Unam.</p> <p>Fernández, G. 2011. Nomenclatura En Química Orgánica. Germán Fernández.</p>	<p>Diez, P. (2013). Manejo de malezas problema: Modos de acción de herbicidas. Red de conocimiento en malezas resistentes. Rosario, Argentina.</p>	<p>de plaguicidas de Centroamérica, M. Consultado febrero del 2018.</p>	<p>Diez, P. (2013). Manejo de malezas problema: Modos de acción de herbicidas. Red de conocimiento en malezas resistentes. Rosario, Argentina.</p>	<p>Diez, P. (2013). Manejo de malezas problema: Modos de acción de herbicidas. Red de conocimiento en malezas resistentes. Rosario, Argentina.</p>

Apéndice 41. Referencias bibliográficas de la matriz de datos de propiedades fisicoquímicas de herbicidas seleccionados (Continuación).

N°	NOMBRE	ESTRUCTURA MOLECULAR	FORMULA MOLECULAR	MOMENTO DIPOLAR (Debye)	ENERGIA TOTAL (KCAL/MOL)
3	Alacloro - CAS: 15972-60-8	Kim, S., Thiessen, P. A., Bolton, E. E., Chen, J., Fu, G., Gindulyte, A., Han, L., He, J., He, S., & Shoemaker, B. A. (2016). PubChem substance and compound databases. Nucleic Acids Research, 44(D1), D1202–D1213.	Kim, S., Thiessen, P. A., Bolton, E. E., Chen, J., Fu, G., Gindulyte, A., Han, L., He, J., He, S., & Shoemaker, B. A. (2016). PubChem substance and compound databases. Nucleic Acids Research, 44(D1), D1202–D1213.	Dennington, R., Keith, T., & Millam, J. (2009). GaussView, version 5 Gaussian09, R. A. (2009). 1, mj frisch, gw trucks, hb schlegel, ge scuseria, ma robb, jr cheeseman, g. Scalmani, v. Barone, b. Mennucci, ga petersson et al., gaussian. Inc., Wallingford CT, 121, 150-166.	Dennington, R., Keith, T., & Millam, J. (2009). GaussView, version 5 Gaussian09, R. A. (2009). 1, mj frisch, gw trucks, hb schlegel, ge scuseria, ma robb, jr cheeseman, g. Scalmani, v. Barone, b. Mennucci, ga petersson et al., gaussian. Inc., Wallingford CT, 121, 150-166.

Apéndice 41. Referencias bibliográficas de la matriz de datos de propiedades fisicoquímicas de herbicidas seleccionados (Continuación).

N°	NOMBRE	ENERGIA TERMICA (KCAL/MOL)	CAPACIDAD CALORIFICA (kcal/mol-K)	ENTROPIA (kcal/mol-K)	POLARIDAD α (C*m2/V)
3	Alacloro - CAS: 15972-60-8	Dennington, R., Keith, T., & Millam, J. (2009). GaussView, version 5 Gaussian09, R. A. (2009). 1, mj frisch, gw trucks, hb schlegel, ge scuseria, ma robb, jr cheeseman, g. Scalmani, v. Barone, b. Mennucci, ga petersson et al., gaussian. Inc., Wallingford CT, 121, 150-166.	Dennington, R., Keith, T., & Millam, J. (2009). GaussView, version 5 Gaussian09, R. A. (2009). 1, mj frisch, gw trucks, hb schlegel, ge scuseria, ma robb, jr cheeseman, g. Scalmani, v. Barone, b. Mennucci, ga petersson et al., gaussian. Inc., Wallingford CT, 121, 150-166.	Dennington, R., Keith, T., & Millam, J. (2009). GaussView, version 5 Gaussian09, R. A. (2009). 1, mj frisch, gw trucks, hb schlegel, ge scuseria, ma robb, jr cheeseman, g. Scalmani, v. Barone, b. Mennucci, ga petersson et al., gaussian. Inc., Wallingford CT, 121, 150-166.	Dennington, R., Keith, T., & Millam, J. (2009). GaussView, version 5 Gaussian09, R. A. (2009). 1, mj frisch, gw trucks, hb schlegel, ge scuseria, ma robb, jr cheeseman, g. Scalmani, v. Barone, b. Mennucci, ga petersson et al., gaussian. Inc., Wallingford CT, 121, 150-166.

Apéndice 41. Referencias bibliográficas de la matriz de datos de propiedades fisicoquímicas de herbicidas seleccionados (Continuación).

N°	NOMBRE	PESO MOLECULAR (g/mol)	TEMPERATURA DE FUSION (K)	PUNTO DE EBULLICION NORMAL (K)	DENSIDAD A 298,15 K - (g/ml)
3	Alacloro - CAS: 15972-60-8	Kim, S., Thiessen, P. A., Bolton, E. E., Chen, J., Fu, G., Gindulyte, A., Han, L., He, J., He, S., & Shoemaker, B. A. (2016). PubChem substance and compound databases. Nucleic Acids Research, 44(D1), D1202–D1213.	Santa Cruz Biotechnology. 2020. "Base de Datos." Base de Datos - Productos Químicos. Retrieved September 12, 2020 (https://www.scbt.com/es/home).	Santa Cruz Biotechnology. 2020. "Base de Datos." Base de Datos - Productos Químicos. Retrieved September 12, 2020 (https://www.scbt.com/es/home).	Santa Cruz Biotechnology. 2020. "Base de Datos." Base de Datos - Productos Químicos. Retrieved September 12, 2020 (https://www.scbt.com/es/home).

Apéndice 41. Referencias bibliográficas de la matriz de datos de propiedades fisicoquímicas de herbicidas seleccionados (Continuación).

N°	NOMBRE	Constante de disociación pKa	Coeficiente de Adsorción de carbono orgánico (Log KOC):	Solubilidad en agua (mg/L a 25°C)	Presión de vapor (Pa a 25°C)
3	Alacloro - CAS: 15972-60-8	Chemical Book. 2020. "Chemical Search Engine." Base de Datos de Productos Químicos. Retrieved September 12, 2020 (https://www.chemicalbook.com/ProductIndex_EN.aspx).	Pence, H. E., & Williams, A. (2010). ChemSpider: an online chemical information resource. Mackay, D., Shiu, W. Y., & Lee, S. C. (2006). Handbook of physical-chemical properties and environmental fate for organic chemicals. CRC press.	Pence, H. E., & Williams, A. (2010). ChemSpider: an online chemical information resource. Mackay, D., Shiu, W. Y., & Lee, S. C. (2006). Handbook of physical-chemical properties and environmental fate for organic chemicals. CRC press.	Pence, H. E., & Williams, A. (2010). ChemSpider: an online chemical information resource. Mackay, D., Shiu, W. Y., & Lee, S. C. (2006). Handbook of physical-chemical properties and environmental fate for organic chemicals. CRC press.

Apéndice 41. Referencias bibliográficas de la matriz de datos de propiedades fisicoquímicas de herbicidas seleccionados (Continuación).

N°	NOMBRE	coeficiente de partición de octanol agua (Log KOW)	Ley de Henry (Pa·m ³ /mol at 25°C)	Factor de bioconcentraci ón (BCF)	Vida media (Días)
3	Alacloro - CAS: 15972-60-8	Pence, H. E., & Williams, A. (2010). ChemSpider: an online chemical information resource. Mackay, D., Shiu, W. Y., & Lee, S. C. (2006). Handbook of physical- chemical properties and environmental fate for organic chemicals. CRC press.	Pence, H. E., & Williams, A. (2010). ChemSpider: an online chemical information resource. Mackay, D., Shiu, W. Y., & Lee, S. C. (2006). Handbook of physical- chemical properties and environmental fate for organic chemicals. CRC press.	Pence, H. E., & Williams, A. (2010). ChemSpider: an online chemical information resource. Mackay, D., Shiu, W. Y., & Lee, S. C. (2006). Handbook of physical- chemical properties and environmental fate for organic chemicals. CRC press.	Pence, H. E., & Williams, A. (2010). ChemSpider: an online chemical information resource. Mackay, D., Shiu, W. Y., & Lee, S. C. (2006). Handbook of physical- chemical properties and environmental fate for organic chemicals. CRC press.

Apéndice 41. Referencias bibliográficas de la matriz de datos de propiedades fisicoquímicas de herbicidas seleccionados (Continuación).

N°	NOMBRE	Indice de Refracción	coeficiente de partición octanol aire (KOA)	Volatilización desde agua (atm-m ³ /mol)	Toxicología DL50 (mg/Kg) ORAL -RATAS - BIBLIOGRAFÍA
3	Alacloro - CAS: 15972-60-8	Pence, H. E., & Williams, A. (2010). ChemSpider: an online chemical information resource. Mackay, D., Shiu, W. Y., & Lee, S. C. (2006). Handbook of physical-chemical properties and environmental fate for organic chemicals. CRC press.	Pence, H. E., & Williams, A. (2010). ChemSpider: an online chemical information resource. Mackay, D., Shiu, W. Y., & Lee, S. C. (2006). Handbook of physical-chemical properties and environmental fate for organic chemicals. CRC press.	Pence, H. E., & Williams, A. (2010). ChemSpider: an online chemical information resource. Mackay, D., Shiu, W. Y., & Lee, S. C. (2006). Handbook of physical-chemical properties and environmental fate for organic chemicals. CRC press.	ChemIDplus, U. S. 2014. "National Library of Medicine."

Apéndice 41. Referencias bibliográficas de la matriz de datos de propiedades fisicoquímicas de herbicidas seleccionados (Continuación).

N°	NOMBRE	Categoría Toxicológica DL50 (mg/Kg) (SEGÚN RESOLUCIÓN 10834 DE 1992)	Categoría Toxicológica DL50 (mg/Kg) (SEGÚN RESOLUCIÓN 10834 DE 1992)	Categoría Toxicológica Mayor DL50 (mg/Kg) Oral Ratas - Presentación Comercial - (SEGÚN REGISTRO DEL ICA)	Categoría Toxicológica Mayor DL50 (mg/Kg) Oral Ratas - Presentación Comercial - (SEGÚN REGISTRO DEL ICA)
3	Alacloro - CAS: 15972-60-8	Ministerio de Salud de Colombia. (1992). RESOLUCIÓN 10834 DE 1992. Septiembre 07, 2020, de Ministerio de Salud de Colombia Sitio web: https://www.icbf.gov.co/cargues/avance/docs/resolucion_min_salud_10834_1992.htm	Ministerio de Salud de Colombia. (1992). RESOLUCIÓN 10834 DE 1992. Septiembre 07, 2020, de Ministerio de Salud de Colombia Sitio web: https://www.icbf.gov.co/cargues/avance/docs/resolucion_min_salud_10834_1992.htm	ICA. 2020. REGISTROS PLAGUICIDAS REGISTRADOS - 16 DE JULIO 2020. BOGOTA - COLOMBIA.	ICA. 2020. REGISTROS PLAGUICIDAS REGISTRADOS - 16 DE JULIO 2020. BOGOTA - COLOMBIA.

Apéndice 41. Referencias bibliográficas de la matriz de datos de propiedades fisicoquímicas de herbicidas seleccionados (Continuación).

N°	NOMBRE	GRUPO FUNCIONAL IUPAC	FAMILIA QUÍMICA, GRUPO TOXÓFORO	SELECTIVIDAD	MODO DE ACCIÓN	TIPO DE SIEMBRA
3	Alacolor - CAS: 15972-60-8	<p>Velasco, M. A., Y. Caballero Arroyo, and G. Quezad. 2006. Grupos Funcionales. Nomenclatura Y Reacciones Principales. Unam.</p> <p>Fernández, G. 2011. Nomenclatura En Química Orgánica. Germán Fernández.</p>	<p>Diez, P. (2013). Manejo de malezas problema: Modos de acción de herbicidas. Red de conocimiento en malezas resistentes. Rosario, Argentina.</p>	<p>de plaguicidas de Centroamérica, M. Consultado febrero del 2018.</p>	<p>Diez, P. (2013). Manejo de malezas problema: Modos de acción de herbicidas. Red de conocimiento en malezas resistentes. Rosario, Argentina.</p>	<p>Diez, P. (2013). Manejo de malezas problema: Modos de acción de herbicidas. Red de conocimiento en malezas resistentes. Rosario, Argentina.</p>

Apéndice 41. Referencias bibliográficas de la matriz de datos de propiedades fisicoquímicas de herbicidas seleccionados (Continuación).

N°	NOMBRE	ESTRUCTURA MOLECULAR	FORMULA MOLECULAR	MOMENTO DIPOLAR (Debye)	ENERGIA TOTAL (KCAL/MOL)
4	Asulam - CAS: 3337-71-1	Kim, S., Thiessen, P. A., Bolton, E. E., Chen, J., Fu, G., Gindulyte, A., Han, L., He, J., He, S., & Shoemaker, B. A. (2016). PubChem substance and compound databases. Nucleic Acids Research, 44(D1), D1202–D1213.	Kim, S., Thiessen, P. A., Bolton, E. E., Chen, J., Fu, G., Gindulyte, A., Han, L., He, J., He, S., & Shoemaker, B. A. (2016). PubChem substance and compound databases. Nucleic Acids Research, 44(D1), D1202–D1213.	Dennington, R., Keith, T., & Millam, J. (2009). GaussView, version 5 Gaussian09, R. A. (2009). 1, mj frisch, gw trucks, hb schlegel, ge scuseria, ma robb, jr cheeseman, g. Scalmani, v. Barone, b. Mennucci, ga petersson et al., gaussian. Inc., Wallingford CT, 121, 150-166.	Dennington, R., Keith, T., & Millam, J. (2009). GaussView, version 5 Gaussian09, R. A. (2009). 1, mj frisch, gw trucks, hb schlegel, ge scuseria, ma robb, jr cheeseman, g. Scalmani, v. Barone, b. Mennucci, ga petersson et al., gaussian. Inc., Wallingford CT, 121, 150-166.

Apéndice 41. Referencias bibliográficas de la matriz de datos de propiedades fisicoquímicas de herbicidas seleccionados (Continuación).

NOMBRE	ENERGIA TERMICA (KCAL/MOL)	CAPACIDAD CALORIFICA (kcal/mol-K)	ENTROPIA (kcal/mol-K)	POLARIDAD α (C*m2/V)
Asulam - CAS: 3337-71-1	Dennington, R., Keith, T., & Millam, J. (2009). GaussView, version 5 Gaussian09, R. A. (2009). 1, mj frisch, gw trucks, hb schlegel, ge scuseria, ma robb, jr cheeseman, g. Scalmani, v. Barone, b. Mennucci, ga petersson et al., gaussian. Inc., Wallingford CT, 121, 150-166.	Dennington, R., Keith, T., & Millam, J. (2009). GaussView, version 5 Gaussian09, R. A. (2009). 1, mj frisch, gw trucks, hb schlegel, ge scuseria, ma robb, jr cheeseman, g. Scalmani, v. Barone, b. Mennucci, ga petersson et al., gaussian. Inc., Wallingford CT, 121, 150-166.	Dennington, R., Keith, T., & Millam, J. (2009). GaussView, version 5 Gaussian09, R. A. (2009). 1, mj frisch, gw trucks, hb schlegel, ge scuseria, ma robb, jr cheeseman, g. Scalmani, v. Barone, b. Mennucci, ga petersson et al., gaussian. Inc., Wallingford CT, 121, 150-166.	Dennington, R., Keith, T., & Millam, J. (2009). GaussView, version 5 Gaussian09, R. A. (2009). 1, mj frisch, gw trucks, hb schlegel, ge scuseria, ma robb, jr cheeseman, g. Scalmani, v. Barone, b. Mennucci, ga petersson et al., gaussian. Inc., Wallingford CT, 121, 150-166.

Apéndice 41. Referencias bibliográficas de la matriz de datos de propiedades fisicoquímicas de herbicidas seleccionados (Continuación).

N°	NOMBRE	PESO MOLECULAR (g/mol)	TEMPERATURA DE FUSION (K)	PUNTO DE EBULLICION NORMAL (K)	DENSIDAD A 298,15 K - (g/ml)
4	Asulam - CAS: 3337-71-1	Kim, S., Thiessen, P. A., Bolton, E. E., Chen, J., Fu, G., Gindulyte, A., Han, L., He, J., He, S., & Shoemaker, B. A. (2016). PubChem substance and compound databases. Nucleic Acids Research, 44(D1), D1202–D1213.	Santa Cruz Biotechnology. 2020. "Base de Datos." Base de Datos - Productos Químicos. Retrieved September 12, 2020 (https://www.scbt.com/es/home).	Santa Cruz Biotechnology. 2020. "Base de Datos." Base de Datos - Productos Químicos. Retrieved September 12, 2020 (https://www.scbt.com/es/home).	Santa Cruz Biotechnology. 2020. "Base de Datos." Base de Datos - Productos Químicos. Retrieved September 12, 2020 (https://www.scbt.com/es/home).

Apéndice 41. Referencias bibliográficas de la matriz de datos de propiedades fisicoquímicas de herbicidas seleccionados (Continuación).

N°	NOMBRE	Constante de disociación pKa	Coeficiente de Adsorción de carbono orgánico (Log KOC):	Solubilidad en agua (mg/L a 25°C)	Presión de vapor (Pa a 25°C)
4	Asulam - CAS: 3337-71-1	Chemical Book. 2020. "Chemical Search Engine." Base de Datos de Productos Químicos. Retrieved September 12, 2020 (https://www.chemicalbook.com/ProductIndex_EN.aspx).	Pence, H. E., & Williams, A. (2010). ChemSpider: an online chemical information resource. Mackay, D., Shiu, W. Y., & Lee, S. C. (2006). Handbook of physical-chemical properties and environmental fate for organic chemicals. CRC press.	Pence, H. E., & Williams, A. (2010). ChemSpider: an online chemical information resource. Mackay, D., Shiu, W. Y., & Lee, S. C. (2006). Handbook of physical-chemical properties and environmental fate for organic chemicals. CRC press.	Pence, H. E., & Williams, A. (2010). ChemSpider: an online chemical information resource. Mackay, D., Shiu, W. Y., & Lee, S. C. (2006). Handbook of physical-chemical properties and environmental fate for organic chemicals. CRC press.

Apéndice 41. Referencias bibliográficas de la matriz de datos de propiedades fisicoquímicas de herbicidas seleccionados (Continuación).

N°	NOMBRE	coeficiente de partición de octanol agua (Log KOW)	Ley de Henry (Pa·m ³ /mol at 25°C)	Factor de bioconcentraci ón (BCF)	Vida media (Días)
4	Asulam - CAS: 3337-71-1	<p>Pence, H. E., & Williams, A. (2010). ChemSpider: an online chemical information resource.</p> <p>Mackay, D., Shiu, W. Y., & Lee, S. C. (2006). Handbook of physical-chemical properties and environmental fate for organic chemicals. CRC press.</p>	<p>Pence, H. E., & Williams, A. (2010). ChemSpider: an online chemical information resource.</p> <p>Mackay, D., Shiu, W. Y., & Lee, S. C. (2006). Handbook of physical-chemical properties and environmental fate for organic chemicals. CRC press.</p>	<p>Pence, H. E., & Williams, A. (2010). ChemSpider: an online chemical information resource.</p> <p>Mackay, D., Shiu, W. Y., & Lee, S. C. (2006). Handbook of physical-chemical properties and environmental fate for organic chemicals. CRC press.</p>	<p>Pence, H. E., & Williams, A. (2010). ChemSpider: an online chemical information resource.</p> <p>Mackay, D., Shiu, W. Y., & Lee, S. C. (2006). Handbook of physical-chemical properties and environmental fate for organic chemicals. CRC press.</p>

Apéndice 41. Referencias bibliográficas de la matriz de datos de propiedades fisicoquímicas de herbicidas seleccionados (Continuación).

N°	NOMBRE	Indice de Refracción	coeficiente de partición octanol aire (KOA)	Volatilización desde agua (atm-m ³ /mol)	Toxicología DL50 (mg/Kg) ORAL -RATAS - BIBLIOGRAFÍA
4	Asulam - CAS: 3337-71-1	Pence, H. E., & Williams, A. (2010). ChemSpider: an online chemical information resource. Mackay, D., Shiu, W. Y., & Lee, S. C. (2006). Handbook of physical-chemical properties and environmental fate for organic chemicals. CRC press.	Pence, H. E., & Williams, A. (2010). ChemSpider: an online chemical information resource. Mackay, D., Shiu, W. Y., & Lee, S. C. (2006). Handbook of physical-chemical properties and environmental fate for organic chemicals. CRC press.	Pence, H. E., & Williams, A. (2010). ChemSpider: an online chemical information resource. Mackay, D., Shiu, W. Y., & Lee, S. C. (2006). Handbook of physical-chemical properties and environmental fate for organic chemicals. CRC press.	ChemIDplus, U. S. 2014. "National Library of Medicine."

Apéndice 41. Referencias bibliográficas de la matriz de datos de propiedades fisicoquímicas de herbicidas seleccionados (Continuación).

N°	NOMBRE	Categoría Toxicológica DL50 (mg/Kg) (SEGÚN RESOLUCIÓN 10834 DE 1992)	Categoría Toxicológica DL50 (mg/Kg) (SEGÚN RESOLUCIÓN 10834 DE 1992)	Categoría Toxicológica Mayor DL50 (mg/Kg) Oral Ratas - Presentación Comercial - (SEGÚN REGISTRO DEL ICA)	Categoría Toxicológica Mayor DL50 (mg/Kg) Oral Ratas - Presentación Comercial - (SEGÚN REGISTRO DEL ICA)
4	Asulam - CAS: 3337-71-1	Ministerio de Salud de Colombia. (1992). RESOLUCIÓN 10834 DE 1992. Septiembre 07, 2020, de Ministerio de Salud de Colombia Sitio web: https://www.icbf.gov.co/cargues/avance/docs/resolucion_min_salud_10834_1992.htm	Ministerio de Salud de Colombia. (1992). RESOLUCIÓN 10834 DE 1992. Septiembre 07, 2020, de Ministerio de Salud de Colombia Sitio web: https://www.icbf.gov.co/cargues/avance/docs/resolucion_min_salud_10834_1992.htm	ICA. 2020. REGISTROS PLAGUICIDAS REGISTRADOS - 16 DE JULIO 2020. BOGOTA - COLOMBIA.	ICA. 2020. REGISTROS PLAGUICIDAS REGISTRADOS - 16 DE JULIO 2020. BOGOTA - COLOMBIA.

Apéndice 41. Referencias bibliográficas de la matriz de datos de propiedades fisicoquímicas de herbicidas seleccionados (Continuación).

N°	NOMBRE	GRUPO FUNCIONAL IUPAC	FAMILIA QUÍMICA, GRUPO TOXÓFORO	SELECTIVIDAD	MODO DE ACCIÓN	TIPO DE SIEMBRA
4	Asulam - CAS: 3337-71-1	<p>Velasco, M. A., Y. Caballero Arroyo, and G. Quezad. 2006. Grupos Funcionales. Nomenclatura Y Reacciones Principales. Unam.</p> <p>Fernández, G. 2011. Nomenclatura En Química Orgánica. Germán Fernández.</p>	<p>Diez, P. (2013). Manejo de malezas problema: Modos de acción de herbicidas. Red de conocimiento en malezas resistentes. Rosario, Argentina.</p>	<p>de plaguicidas de Centroamérica, M. Consultado febrero del 2018.</p>	<p>Diez, P. (2013). Manejo de malezas problema: Modos de acción de herbicidas. Red de conocimiento en malezas resistentes. Rosario, Argentina.</p>	<p>Diez, P. (2013). Manejo de malezas problema: Modos de acción de herbicidas. Red de conocimiento en malezas resistentes. Rosario, Argentina.</p>

Apéndice 41. Referencias bibliográficas de la matriz de datos de propiedades fisicoquímicas de herbicidas seleccionados (Continuación).

N°	NOMBRE	ESTRUCTURA MOLECULAR	FORMULA MOLECULAR	MOMENTO DIPOLAR (Debye)	ENERGIA TOTAL (KCAL/MOL)
5	Atrazina - CAS: 1912-24-9	Kim, S., Thiessen, P. A., Bolton, E. E., Chen, J., Fu, G., Gindulyte, A., Han, L., He, J., He, S., & Shoemaker, B. A. (2016). PubChem substance and compound databases. Nucleic Acids Research, 44(D1), D1202–D1213.	Bennett, G. (1992). International chemical safety cards: by Commission of the European Communities and International Programme on Chemical Safety, World Health Organization, Geneva, Switzerland, 1990, ISBN 92.	Dennington, R., Keith, T., & Millam, J. (2009). GaussView, version 5 Gaussian09, R. A. (2009). 1, mj frisch, gw trucks, hb schlegel, ge scuseria, ma robb, jr cheeseman, g. Scalmani, v. Barone, b. Mennucci, ga petersson et al., gaussian. Inc., Wallingford CT, 121, 150-166.	Dennington, R., Keith, T., & Millam, J. (2009). GaussView, version 5 Gaussian09, R. A. (2009). 1, mj frisch, gw trucks, hb schlegel, ge scuseria, ma robb, jr cheeseman, g. Scalmani, v. Barone, b. Mennucci, ga petersson et al., gaussian. Inc., Wallingford CT, 121, 150-166.

Apéndice 41. Referencias bibliográficas de la matriz de datos de propiedades fisicoquímicas de herbicidas seleccionados (Continuación).

N°	NOMBRE	ENERGIA TERMICA (KCAL/MOL)	CAPACIDAD CALORIFICA (kcal/mol-K)	ENTROPIA (kcal/mol-K)	POLARIDAD α (C*m2/V)
5	Atrazina - CAS: 1912-24-9	Dennington, R., Keith, T., & Millam, J. (2009). GaussView, version 5 Gaussian09, R. A. (2009). 1, mj frisch, gw trucks, hb schlegel, ge scuseria, ma robb, jr cheeseman, g. Scalmani, v. Barone, b. Mennucci, ga petersson et al., gaussian. Inc., Wallingford CT, 121, 150-166.	Dennington, R., Keith, T., & Millam, J. (2009). GaussView, version 5 Gaussian09, R. A. (2009). 1, mj frisch, gw trucks, hb schlegel, ge scuseria, ma robb, jr cheeseman, g. Scalmani, v. Barone, b. Mennucci, ga petersson et al., gaussian. Inc., Wallingford CT, 121, 150-166.	Dennington, R., Keith, T., & Millam, J. (2009). GaussView, version 5 Gaussian09, R. A. (2009). 1, mj frisch, gw trucks, hb schlegel, ge scuseria, ma robb, jr cheeseman, g. Scalmani, v. Barone, b. Mennucci, ga petersson et al., gaussian. Inc., Wallingford CT, 121, 150-166.	Dennington, R., Keith, T., & Millam, J. (2009). GaussView, version 5 Gaussian09, R. A. (2009). 1, mj frisch, gw trucks, hb schlegel, ge scuseria, ma robb, jr cheeseman, g. Scalmani, v. Barone, b. Mennucci, ga petersson et al., gaussian. Inc., Wallingford CT, 121, 150-166.

Apéndice 41. Referencias bibliográficas de la matriz de datos de propiedades fisicoquímicas de herbicidas seleccionados (Continuación).

N°	NOMBRE	PESO MOLECULAR (g/mol)	TEMPERATURA DE FUSION (K)	PUNTO DE EBULLICION NORMAL (K)	DENSIDAD A 298,15 K - (g/ml)
5	Atrazina - CAS: 1912-24-9	Kim, S., Thiessen, P. A., Bolton, E. E., Chen, J., Fu, G., Gindulyte, A., Han, L., He, J., He, S., & Shoemaker, B. A. (2016). PubChem substance and compound databases. Nucleic Acids Research, 44(D1), D1202–D1213.	Santa Cruz Biotechnology. 2020. "Base de Datos." Base de Datos - Productos Químicos. Retrieved September 12, 2020 (https://www.scbt.com/es/home).	Santa Cruz Biotechnology. 2020. "Base de Datos." Base de Datos - Productos Químicos. Retrieved September 12, 2020 (https://www.scbt.com/es/home).	Santa Cruz Biotechnology. 2020. "Base de Datos." Base de Datos - Productos Químicos. Retrieved September 12, 2020 (https://www.scbt.com/es/home).

Apéndice 41. Referencias bibliográficas de la matriz de datos de propiedades fisicoquímicas de herbicidas seleccionados (Continuación).

N°	NOMBRE	Constante de disociación pKa	Coeficiente de Adsorción de carbono orgánico (Log KOC):	Solubilidad en agua (mg/L a 25°C)	Presión de vapor (Pa a 25°C)
5	Atrazina - CAS: 1912-24-9	Chemical Book. 2020. "Chemical Search Engine." Base de Datos de Productos Químicos. Retrieved September 12, 2020 (https://www.chemicalbook.com/ProductIndex_EN.aspx).	Pence, H. E., & Williams, A. (2010). ChemSpider: an online chemical information resource. Mackay, D., Shiu, W. Y., & Lee, S. C. (2006). Handbook of physical-chemical properties and environmental fate for organic chemicals. CRC press.	Pence, H. E., & Williams, A. (2010). ChemSpider: an online chemical information resource. Mackay, D., Shiu, W. Y., & Lee, S. C. (2006). Handbook of physical-chemical properties and environmental fate for organic chemicals. CRC press.	Pence, H. E., & Williams, A. (2010). ChemSpider: an online chemical information resource. Mackay, D., Shiu, W. Y., & Lee, S. C. (2006). Handbook of physical-chemical properties and environmental fate for organic chemicals. CRC press.

Apéndice 41. Referencias bibliográficas de la matriz de datos de propiedades fisicoquímicas de herbicidas seleccionados (Continuación).

N°	NOMBRE	coeficiente de partición de octanol agua (Log KOW)	Ley de Henry (Pa·m ³ /mol at 25°C)	Factor de bioconcentraci ón (BCF)	Vida media (Días)
5	Atrazina - CAS: 1912-24-9	<p>Pence, H. E., & Williams, A. (2010). ChemSpider: an online chemical information resource.</p> <p>Mackay, D., Shiu, W. Y., & Lee, S. C. (2006). Handbook of physical-chemical properties and environmental fate for organic chemicals. CRC press.</p>	<p>Pence, H. E., & Williams, A. (2010). ChemSpider: an online chemical information resource.</p> <p>Mackay, D., Shiu, W. Y., & Lee, S. C. (2006). Handbook of physical-chemical properties and environmental fate for organic chemicals. CRC press.</p>	<p>Pence, H. E., & Williams, A. (2010). ChemSpider: an online chemical information resource.</p> <p>Mackay, D., Shiu, W. Y., & Lee, S. C. (2006). Handbook of physical-chemical properties and environmental fate for organic chemicals. CRC press.</p>	<p>Pence, H. E., & Williams, A. (2010). ChemSpider: an online chemical information resource.</p> <p>Mackay, D., Shiu, W. Y., & Lee, S. C. (2006). Handbook of physical-chemical properties and environmental fate for organic chemicals. CRC press.</p>

Apéndice 41. Referencias bibliográficas de la matriz de datos de propiedades fisicoquímicas de herbicidas seleccionados (Continuación).

N°	NOMBRE	Indice de Refracción	coeficiente de partición octanol aire (KOA)	Volatilización desde agua (atm-m ³ /mol)	Toxicología DL50 (mg/Kg) ORAL -RATAS - BIBLIOGRAFÍA
5	Atrazina - CAS: 1912-24-9	Pence, H. E., & Williams, A. (2010). ChemSpider: an online chemical information resource. Mackay, D., Shiu, W. Y., & Lee, S. C. (2006). Handbook of physical-chemical properties and environmental fate for organic chemicals. CRC press.	Pence, H. E., & Williams, A. (2010). ChemSpider: an online chemical information resource. Mackay, D., Shiu, W. Y., & Lee, S. C. (2006). Handbook of physical-chemical properties and environmental fate for organic chemicals. CRC press.	Pence, H. E., & Williams, A. (2010). ChemSpider: an online chemical information resource. Mackay, D., Shiu, W. Y., & Lee, S. C. (2006). Handbook of physical-chemical properties and environmental fate for organic chemicals. CRC press.	ChemIDplus, U. S. 2014. "National Library of Medicine."

Apéndice 41. Referencias bibliográficas de la matriz de datos de propiedades fisicoquímicas de herbicidas seleccionados (Continuación).

N°	NOMBRE	Categoría Toxicológica DL50 (mg/Kg) (SEGÚN RESOLUCIÓN 10834 DE 1992)	Categoría Toxicológica DL50 (mg/Kg) (SEGÚN RESOLUCIÓN 10834 DE 1992)	Categoría Toxicológica Mayor DL50 (mg/Kg) Oral Ratas - Presentación Comercial - (SEGÚN REGISTRO DEL ICA)	Categoría Toxicológica Mayor DL50 (mg/Kg) Oral Ratas - Presentación Comercial - (SEGÚN REGISTRO DEL ICA)
5	Atrazina - CAS: 1912-24-9	Ministerio de Salud de Colombia. (1992). RESOLUCIÓN 10834 DE 1992. Septiembre 07, 2020, de Ministerio de Salud de Colombia Sitio web: https://www.icbf.gov.co/cargues/avance/docs/resolucion_min_salud_10834_1992.htm	Ministerio de Salud de Colombia. (1992). RESOLUCIÓN 10834 DE 1992. Septiembre 07, 2020, de Ministerio de Salud de Colombia Sitio web: https://www.icbf.gov.co/cargues/avance/docs/resolucion_min_salud_10834_1992.htm	ICA. 2020. REGISTROS PLAGUICIDAS REGISTRADOS - 16 DE JULIO 2020. BOGOTA - COLOMBIA.	ICA. 2020. REGISTROS PLAGUICIDAS REGISTRADOS - 16 DE JULIO 2020. BOGOTA - COLOMBIA.

Apéndice 41. Referencias bibliográficas de la matriz de datos de propiedades fisicoquímicas de herbicidas seleccionados (Continuación).

N°	NOMBRE	GRUPO FUNCIONAL IUPAC	FAMILIA QUÍMICA, GRUPO TOXÓFORO	SELECTIVIDAD	MODO DE ACCIÓN	TIPO DE SIEMBRA
5	Atrazina - CAS: 1912-24-9	<p>Velasco, M. A., Y. Caballero Arroyo, and G. Quezad. 2006. Grupos Funcionales. Nomenclatura Y Reacciones Principales. Unam.</p> <p>Fernández, G. 2011. Nomenclatura En Química Orgánica. Germán Fernández.</p>	<p>Diez, P. (2013). Manejo de malezas problema: Modos de acción de herbicidas. Red de conocimiento en malezas resistentes. Rosario, Argentina.</p>	<p>de plaguicidas de Centroamérica, M. Consultado febrero del 2018.</p>	<p>Diez, P. (2013). Manejo de malezas problema: Modos de acción de herbicidas. Red de conocimiento en malezas resistentes. Rosario, Argentina.</p>	<p>Diez, P. (2013). Manejo de malezas problema: Modos de acción de herbicidas. Red de conocimiento en malezas resistentes. Rosario, Argentina.</p>

Apéndice 41. Referencias bibliográficas de la matriz de datos de propiedades fisicoquímicas de herbicidas seleccionados (Continuación).

N°	NOMBRE	ESTRUCTURA MOLECULAR	FORMULA MOLECULAR	MOMENTO DIPOLAR (Debye)	ENERGIA TOTAL (KCAL/MOL)
6	Bromoxinil - CAS: 1689-84-5	Kim, S., Thiessen, P. A., Bolton, E. E., Chen, J., Fu, G., Gindulyte, A., Han, L., He, J., He, S., & Shoemaker, B. A. (2016). PubChem substance and compound databases. Nucleic Acids Research, 44(D1), D1202–D1213.	Kim, S., Thiessen, P. A., Bolton, E. E., Chen, J., Fu, G., Gindulyte, A., Han, L., He, J., He, S., & Shoemaker, B. A. (2016). PubChem substance and compound databases. Nucleic Acids Research, 44(D1), D1202–D1213.	Dennington, R., Keith, T., & Millam, J. (2009). GaussView, version 5 Gaussian09, R. A. (2009). 1, mj frisch, gw trucks, hb schlegel, ge scuseria, ma robb, jr cheeseman, g. Scalmani, v. Barone, b. Mennucci, ga petersson et al., gaussian. Inc., Wallingford CT, 121, 150-166.	Dennington, R., Keith, T., & Millam, J. (2009). GaussView, version 5 Gaussian09, R. A. (2009). 1, mj frisch, gw trucks, hb schlegel, ge scuseria, ma robb, jr cheeseman, g. Scalmani, v. Barone, b. Mennucci, ga petersson et al., gaussian. Inc., Wallingford CT, 121, 150-166.

Apéndice 41. Referencias bibliográficas de la matriz de datos de propiedades fisicoquímicas de herbicidas seleccionados (Continuación).

N°	NOMBRE	ENERGIA TERMICA (KCAL/MOL)	CAPACIDAD CALORIFICA (kcal/mol-K)	ENTROPIA (kcal/mol-K)	POLARIDAD α (C*m2/V)
6	Bromoxinil - CAS: 1689-84-5	Dennington, R., Keith, T., & Millam, J. (2009). GaussView, version 5 Gaussian09, R. A. (2009). 1, mj frisch, gw trucks, hb schlegel, ge scuseria, ma robb, jr cheeseman, g. Scalmani, v. Barone, b. Mennucci, ga petersson et al., gaussian. Inc., Wallingford CT, 121, 150-166.	Dennington, R., Keith, T., & Millam, J. (2009). GaussView, version 5 Gaussian09, R. A. (2009). 1, mj frisch, gw trucks, hb schlegel, ge scuseria, ma robb, jr cheeseman, g. Scalmani, v. Barone, b. Mennucci, ga petersson et al., gaussian. Inc., Wallingford CT, 121, 150-166.	Dennington, R., Keith, T., & Millam, J. (2009). GaussView, version 5 Gaussian09, R. A. (2009). 1, mj frisch, gw trucks, hb schlegel, ge scuseria, ma robb, jr cheeseman, g. Scalmani, v. Barone, b. Mennucci, ga petersson et al., gaussian. Inc., Wallingford CT, 121, 150-166.	Dennington, R., Keith, T., & Millam, J. (2009). GaussView, version 5 Gaussian09, R. A. (2009). 1, mj frisch, gw trucks, hb schlegel, ge scuseria, ma robb, jr cheeseman, g. Scalmani, v. Barone, b. Mennucci, ga petersson et al., gaussian. Inc., Wallingford CT, 121, 150-166.

Apéndice 41. Referencias bibliográficas de la matriz de datos de propiedades fisicoquímicas de herbicidas seleccionados (Continuación).

N°	NOMBRE	PESO MOLECULAR (g/mol)	TEMPERATURA DE FUSION (K)	PUNTO DE EBULLICION NORMAL (K)	DENSIDAD A 298,15 K - (g/ml)
6	Bromoxinil - CAS: 1689-84-5	Kim, S., Thiessen, P. A., Bolton, E. E., Chen, J., Fu, G., Gindulyte, A., Han, L., He, J., He, S., & Shoemaker, B. A. (2016). PubChem substance and compound databases. Nucleic Acids Research, 44(D1), D1202–D1213.	Santa Cruz Biotechnology. 2020. "Base de Datos." Base de Datos - Productos Químicos. Retrieved September 12, 2020 (https://www.scbt.com/es/home).	Santa Cruz Biotechnology. 2020. "Base de Datos." Base de Datos - Productos Químicos. Retrieved September 12, 2020 (https://www.scbt.com/es/home).	Santa Cruz Biotechnology. 2020. "Base de Datos." Base de Datos - Productos Químicos. Retrieved September 12, 2020 (https://www.scbt.com/es/home).

Apéndice 41. Referencias bibliográficas de la matriz de datos de propiedades fisicoquímicas de herbicidas seleccionados (Continuación).

N°	NOMBRE	Constante de disociación pKa	Coeficiente de Adsorción de carbono orgánico (Log KOC):	Solubilidad en agua (mg/L a 25°C)	Presión de vapor (Pa a 25°C)
6	Bromoxinil - CAS: 1689-84-5	Chemical Book. 2020. "Chemical Search Engine." Base de Datos de Productos Químicos. Retrieved September 12, 2020 (https://www.chemicalbook.com/ProductIndex_EN.aspx).	Pence, H. E., & Williams, A. (2010). ChemSpider: an online chemical information resource. Mackay, D., Shiu, W. Y., & Lee, S. C. (2006). Handbook of physical-chemical properties and environmental fate for organic chemicals. CRC press.	Pence, H. E., & Williams, A. (2010). ChemSpider: an online chemical information resource. Mackay, D., Shiu, W. Y., & Lee, S. C. (2006). Handbook of physical-chemical properties and environmental fate for organic chemicals. CRC press.	Pence, H. E., & Williams, A. (2010). ChemSpider: an online chemical information resource. Mackay, D., Shiu, W. Y., & Lee, S. C. (2006). Handbook of physical-chemical properties and environmental fate for organic chemicals. CRC press.

Apéndice 41. Referencias bibliográficas de la matriz de datos de propiedades fisicoquímicas de herbicidas seleccionados (Continuación).

N°	NOMBRE	coeficiente de partición de octanol agua (Log KOW)	Ley de Henry (Pa·m ³ /mol at 25°C)	Factor de bioconcentración (BCF)	Vida media (Días)
6	Bromoxinil - CAS: 1689-84-5	<p>Pence, H. E., & Williams, A. (2010). ChemSpider: an online chemical information resource.</p> <p>Mackay, D., Shiu, W. Y., & Lee, S. C. (2006). Handbook of physical-chemical properties and environmental fate for organic chemicals. CRC press.</p>	<p>Pence, H. E., & Williams, A. (2010). ChemSpider: an online chemical information resource.</p> <p>Mackay, D., Shiu, W. Y., & Lee, S. C. (2006). Handbook of physical-chemical properties and environmental fate for organic chemicals. CRC press.</p>	<p>Pence, H. E., & Williams, A. (2010). ChemSpider: an online chemical information resource.</p> <p>Mackay, D., Shiu, W. Y., & Lee, S. C. (2006). Handbook of physical-chemical properties and environmental fate for organic chemicals. CRC press.</p>	<p>Pence, H. E., & Williams, A. (2010). ChemSpider: an online chemical information resource.</p> <p>Mackay, D., Shiu, W. Y., & Lee, S. C. (2006). Handbook of physical-chemical properties and environmental fate for organic chemicals. CRC press.</p>

Apéndice 41. Referencias bibliográficas de la matriz de datos de propiedades fisicoquímicas de herbicidas seleccionados (Continuación).

N°	NOMBRE	Indice de Refracción	coeficiente de partición octanol aire (KOA)	Volatilización desde agua (atm-m ³ /mol)	Toxicología DL50 (mg/Kg) ORAL -RATAS - BIBLIOGRAFÍA
6	Bromoxinil - CAS: 1689-84-5	Pence, H. E., & Williams, A. (2010). ChemSpider: an online chemical information resource. Mackay, D., Shiu, W. Y., & Lee, S. C. (2006). Handbook of physical-chemical properties and environmental fate for organic chemicals. CRC press.	Pence, H. E., & Williams, A. (2010). ChemSpider: an online chemical information resource. Mackay, D., Shiu, W. Y., & Lee, S. C. (2006). Handbook of physical-chemical properties and environmental fate for organic chemicals. CRC press.	Pence, H. E., & Williams, A. (2010). ChemSpider: an online chemical information resource. Mackay, D., Shiu, W. Y., & Lee, S. C. (2006). Handbook of physical-chemical properties and environmental fate for organic chemicals. CRC press.	ChemIDplus, U. S. 2014. "National Library of Medicine."

Apéndice 41. Referencias bibliográficas de la matriz de datos de propiedades fisicoquímicas de herbicidas seleccionados (Continuación).

N°	NOMBRE	Categoría Toxicológica DL50 (mg/Kg) (SEGÚN RESOLUCIÓN 10834 DE 1992)	Categoría Toxicológica DL50 (mg/Kg) (SEGÚN RESOLUCIÓN 10834 DE 1992)	Categoría Toxicológica Mayor DL50 (mg/Kg) Oral Ratas - Presentación Comercial - (SEGÚN REGISTRO DEL ICA)	Categoría Toxicológica Mayor DL50 (mg/Kg) Oral Ratas - Presentación Comercial - (SEGÚN REGISTRO DEL ICA)
6	Bromoxinil - CAS: 1689-84-5	Ministerio de Salud de Colombia. (1992). RESOLUCIÓN 10834 DE 1992. Septiembre 07, 2020, de Ministerio de Salud de Colombia Sitio web: https://www.icbf.gov.co/cargues/avance/docs/resolucion_min_salud_10834_1992.htm	Ministerio de Salud de Colombia. (1992). RESOLUCIÓN 10834 DE 1992. Septiembre 07, 2020, de Ministerio de Salud de Colombia Sitio web: https://www.icbf.gov.co/cargues/avance/docs/resolucion_min_salud_10834_1992.htm	ICA. 2020. REGISTROS PLAGUICIDAS REGISTRADOS - 16 DE JULIO 2020. BOGOTA - COLOMBIA.	ICA. 2020. REGISTROS PLAGUICIDAS REGISTRADOS - 16 DE JULIO 2020. BOGOTA - COLOMBIA.

Apéndice 41. Referencias bibliográficas de la matriz de datos de propiedades fisicoquímicas de herbicidas seleccionados (Continuación).

N°	NOMBRE	GRUPO FUNCIONAL IUPAC	FAMILIA QUÍMICA, GRUPO TOXÓFORO	SELECTIVIDAD	MODO DE ACCIÓN	TIPO DE SIEMBRA
6	Bromoxinil - CAS: 1689-84-5	<p>Velasco, M. A., Y. Caballero Arroyo, and G. Quezad. 2006. Grupos Funcionales. Nomenclatura Y Reacciones Principales. Unam.</p> <p>Fernández, G. 2011. Nomenclatura En Química Orgánica. Germán Fernández.</p>	<p>Diez, P. (2013). Manejo de malezas problema: Modos de acción de herbicidas. Red de conocimiento en malezas resistentes. Rosario, Argentina.</p>	<p>de plaguicidas de Centroamérica, M. Consultado febrero del 2018.</p>	<p>Diez, P. (2013). Manejo de malezas problema: Modos de acción de herbicidas. Red de conocimiento en malezas resistentes. Rosario, Argentina.</p>	<p>Diez, P. (2013). Manejo de malezas problema: Modos de acción de herbicidas. Red de conocimiento en malezas resistentes. Rosario, Argentina.</p>

Apéndice 41. Referencias bibliográficas de la matriz de datos de propiedades fisicoquímicas de herbicidas seleccionados (Continuación).

N°	NOMBRE	ESTRUCTURA MOLECULAR	FORMULA MOLECULAR	MOMENTO DIPOLAR (Debye)	ENERGIA TOTAL (KCAL/MOL)
7	Dalapón - CAS: 75-99-0	Kim, S., Thiessen, P. A., Bolton, E. E., Chen, J., Fu, G., Gindulyte, A., Han, L., He, J., He, S., & Shoemaker, B. A. (2016). PubChem substance and compound databases. Nucleic Acids Research, 44(D1), D1202–D1213.	Kim, S., Thiessen, P. A., Bolton, E. E., Chen, J., Fu, G., Gindulyte, A., Han, L., He, J., He, S., & Shoemaker, B. A. (2016). PubChem substance and compound databases. Nucleic Acids Research, 44(D1), D1202–D1213.	Dennington, R., Keith, T., & Millam, J. (2009). GaussView, version 5 Gaussian09, R. A. (2009). 1, mj frisch, gw trucks, hb schlegel, ge scuseria, ma robb, jr cheeseman, g. Scalmani, v. Barone, b. Mennucci, ga petersson et al., gaussian. Inc., Wallingford CT, 121, 150-166.	Dennington, R., Keith, T., & Millam, J. (2009). GaussView, version 5 Gaussian09, R. A. (2009). 1, mj frisch, gw trucks, hb schlegel, ge scuseria, ma robb, jr cheeseman, g. Scalmani, v. Barone, b. Mennucci, ga petersson et al., gaussian. Inc., Wallingford CT, 121, 150-166.

Apéndice 41. Referencias bibliográficas de la matriz de datos de propiedades fisicoquímicas de herbicidas seleccionados (Continuación).

N°	NOMBRE	ENERGIA TERMICA (KCAL/MOL)	CAPACIDAD CALORIFICA (kcal/mol-K)	ENTROPIA (kcal/mol-K)	POLARIDAD α (C*m2/V)
7	Dalapón - CAS: 75-99-0	<p>Dennington, R., Keith, T., & Millam, J. (2009). GaussView, version 5</p> <p>Gaussian09, R. A. (2009). 1, mj frisch, gw trucks, hb schlegel, ge scuseria, ma robb, jr cheeseman, g. Scalmani, v. Barone, b. Mennucci, ga petersson et al., gaussian. Inc., Wallingford CT, 121, 150-166.</p>	<p>Dennington, R., Keith, T., & Millam, J. (2009). GaussView, version 5</p> <p>Gaussian09, R. A. (2009). 1, mj frisch, gw trucks, hb schlegel, ge scuseria, ma robb, jr cheeseman, g. Scalmani, v. Barone, b. Mennucci, ga petersson et al., gaussian. Inc., Wallingford CT, 121, 150-166.</p>	<p>Dennington, R., Keith, T., & Millam, J. (2009). GaussView, version 5</p> <p>Gaussian09, R. A. (2009). 1, mj frisch, gw trucks, hb schlegel, ge scuseria, ma robb, jr cheeseman, g. Scalmani, v. Barone, b. Mennucci, ga petersson et al., gaussian. Inc., Wallingford CT, 121, 150-166.</p>	<p>Dennington, R., Keith, T., & Millam, J. (2009). GaussView, version 5</p> <p>Gaussian09, R. A. (2009). 1, mj frisch, gw trucks, hb schlegel, ge scuseria, ma robb, jr cheeseman, g. Scalmani, v. Barone, b. Mennucci, ga petersson et al., gaussian. Inc., Wallingford CT, 121, 150-166.</p>

Apéndice 41. Referencias bibliográficas de la matriz de datos de propiedades fisicoquímicas de herbicidas seleccionados (Continuación).

N°	NOMBRE	PESO MOLECULAR (g/mol)	TEMPERATURA DE FUSION (K)	PUNTO DE EBULLICION NORMAL (K)	DENSIDAD A 298,15 K - (g/ml)
7	Dalapón - CAS: 75-99-0	Kim, S., Thiessen, P. A., Bolton, E. E., Chen, J., Fu, G., Gindulyte, A., Han, L., He, J., He, S., & Shoemaker, B. A. (2016). PubChem substance and compound databases. Nucleic Acids Research, 44(D1), D1202–D1213.	Bennett, G. (1992). International chemical safety cards: by Commission of the European Communities and International Programme on Chemical Safety, World Health Organization, Geneva, Switzerland, 1990, ISBN 92. Elsevier. https://www.ilo.org/safework/info/publications/WCMS_113134/lang--en/index.htm	Bennett, G. (1992). International chemical safety cards: by Commission of the European Communities and International Programme on Chemical Safety, World Health Organization, Geneva, Switzerland, 1990, ISBN 92. Elsevier. https://www.ilo.org/safework/info/publications/WCMS_113134/lang--en/index.htm	Bennett, G. (1992). International chemical safety cards: by Commission of the European Communities and International Programme on Chemical Safety, World Health Organization, Geneva, Switzerland, 1990, ISBN 92. Elsevier. https://www.ilo.org/safework/info/publications/WCMS_113134/lang--en/index.htm

Apéndice 41. Referencias bibliográficas de la matriz de datos de propiedades fisicoquímicas de herbicidas seleccionados (Continuación).

N°	NOMBRE	Constante de disociación pKa	Coeficiente de Adsorción de carbono orgánico (Log KOC):	Solubilidad en agua (mg/L a 25°C)	Presión de vapor (Pa a 25°C)
7	Dalapón - CAS: 75-99-0	<p>Chemical Book. 2020. "Chemical Search Engine." Base de Datos de Productos Químicos. Retrieved September 12, 2020 (https://www.chemicalbook.com/ProductIndex_EN.aspx).</p>	<p>Pence, H. E., & Williams, A. (2010). ChemSpider: an online chemical information resource.</p> <p>Mackay, D., Shiu, W. Y., & Lee, S. C. (2006). Handbook of physical-chemical properties and environmental fate for organic chemicals. CRC press.</p>	<p>Pence, H. E., & Williams, A. (2010). ChemSpider: an online chemical information resource.</p> <p>Mackay, D., Shiu, W. Y., & Lee, S. C. (2006). Handbook of physical-chemical properties and environmental fate for organic chemicals. CRC press.</p>	<p>Pence, H. E., & Williams, A. (2010). ChemSpider: an online chemical information resource.</p> <p>Mackay, D., Shiu, W. Y., & Lee, S. C. (2006). Handbook of physical-chemical properties and environmental fate for organic chemicals. CRC press.</p>

Apéndice 41. Referencias bibliográficas de la matriz de datos de propiedades fisicoquímicas de herbicidas seleccionados (Continuación).

N°	NOMBRE	coeficiente de partición de octanol agua (Log KOW)	Ley de Henry (Pa·m ³ /mol at 25°C)	Factor de bioconcentraci ón (BCF)	Vida media (Días)
7	Dalapón - CAS: 75-99-0	<p>Pence, H. E., & Williams, A. (2010). ChemSpider: an online chemical information resource.</p> <p>Mackay, D., Shiu, W. Y., & Lee, S. C. (2006). Handbook of physical-chemical properties and environmental fate for organic chemicals. CRC press.</p>	<p>Pence, H. E., & Williams, A. (2010). ChemSpider: an online chemical information resource.</p> <p>Mackay, D., Shiu, W. Y., & Lee, S. C. (2006). Handbook of physical-chemical properties and environmental fate for organic chemicals. CRC press.</p>	<p>Pence, H. E., & Williams, A. (2010). ChemSpider: an online chemical information resource.</p> <p>Mackay, D., Shiu, W. Y., & Lee, S. C. (2006). Handbook of physical-chemical properties and environmental fate for organic chemicals. CRC press.</p>	<p>Pence, H. E., & Williams, A. (2010). ChemSpider: an online chemical information resource.</p> <p>Mackay, D., Shiu, W. Y., & Lee, S. C. (2006). Handbook of physical-chemical properties and environmental fate for organic chemicals. CRC press.</p>

Apéndice 41. Referencias bibliográficas de la matriz de datos de propiedades fisicoquímicas de herbicidas seleccionados (Continuación).

N°	NOMBRE	Indice de Refracción	coeficiente de partición octanol aire (KOA)	Volatilización desde agua (atm-m ³ /mol)	Toxicología DL50 (mg/Kg) ORAL -RATAS - BIBLIOGRAFÍA
7	Dalapón - CAS: 75-99-0	Pence, H. E., & Williams, A. (2010). ChemSpider: an online chemical information resource. Mackay, D., Shiu, W. Y., & Lee, S. C. (2006). Handbook of physical-chemical properties and environmental fate for organic chemicals. CRC press.	Pence, H. E., & Williams, A. (2010). ChemSpider: an online chemical information resource. Mackay, D., Shiu, W. Y., & Lee, S. C. (2006). Handbook of physical-chemical properties and environmental fate for organic chemicals. CRC press.	Pence, H. E., & Williams, A. (2010). ChemSpider: an online chemical information resource. Mackay, D., Shiu, W. Y., & Lee, S. C. (2006). Handbook of physical-chemical properties and environmental fate for organic chemicals. CRC press.	de plaguicidas de Centroamérica, M. Consultado febrero del 2018.

Apéndice 41. Referencias bibliográficas de la matriz de datos de propiedades fisicoquímicas de herbicidas seleccionados (Continuación).

N°	NOMBRE	Categoría Toxicológica DL50 (mg/Kg) (SEGÚN RESOLUCIÓN 10834 DE 1992)	Categoría Toxicológica DL50 (mg/Kg) (SEGÚN RESOLUCIÓN 10834 DE 1992)	Categoría Toxicológica Mayor DL50 (mg/Kg) Oral Ratas - Presentación Comercial - (SEGÚN REGISTRO DEL ICA)	Categoría Toxicológica Mayor DL50 (mg/Kg) Oral Ratas - Presentación Comercial - (SEGÚN REGISTRO DEL ICA)
7	Dalapón - CAS: 75-99-0	Ministerio de Salud de Colombia. (1992). RESOLUCIÓN 10834 DE 1992. Septiembre 07, 2020, de Ministerio de Salud de Colombia Sitio web: https://www.icbf.gov.co/cargues/avance/docs/resolucion_min_salud_10834_1992.htm	Ministerio de Salud de Colombia. (1992). RESOLUCIÓN 10834 DE 1992. Septiembre 07, 2020, de Ministerio de Salud de Colombia Sitio web: https://www.icbf.gov.co/cargues/avance/docs/resolucion_min_salud_10834_1992.htm	ICA. 2020. REGISTROS PLAGUICIDAS REGISTRADOS - 16 DE JULIO 2020. BOGOTA - COLOMBIA.	ICA. 2020. REGISTROS PLAGUICIDAS REGISTRADOS - 16 DE JULIO 2020. BOGOTA - COLOMBIA.

Apéndice 41. Referencias bibliográficas de la matriz de datos de propiedades fisicoquímicas de herbicidas seleccionados (Continuación).

N°	NOMBRE	GRUPO FUNCIONAL IUPAC	FAMILIA QUÍMICA, GRUPO TOXÓFORO	SELECTIVIDAD	MODO DE ACCIÓN	TIPO DE SIEMBRA
7	Dalapón - CAS: 75-99-0	<p>Velasco, M. A., Y. Caballero Arroyo, and G. Quezad. 2006. Grupos Funcionales. Nomenclatura Y Reacciones Principales. Unam.</p> <p>Fernández, G. 2011. Nomenclatura En Química Orgánica. Germán Fernández.</p>	<p>Diez, P. (2013). Manejo de malezas problema: Modos de acción de herbicidas. Red de conocimiento en malezas resistentes. Rosario, Argentina.</p>	<p>de plaguicidas de Centroamérica, M. Consultado febrero del 2018.</p>	<p>Diez, P. (2013). Manejo de malezas problema: Modos de acción de herbicidas. Red de conocimiento en malezas resistentes. Rosario, Argentina.</p>	<p>Diez, P. (2013). Manejo de malezas problema: Modos de acción de herbicidas. Red de conocimiento en malezas resistentes. Rosario, Argentina.</p>

Apéndice 41. Referencias bibliográficas de la matriz de datos de propiedades fisicoquímicas de herbicidas seleccionados (Continuación).

N°	NOMBRE	ESTRUCTURA MOLECULAR	FORMULA MOLECULAR	MOMENTO DIPOLAR (Debye)	ENERGIA TOTAL (KCAL/MOL)
8	Dicamba - CAS: 1918-00-9	Kim, S., Thiessen, P. A., Bolton, E. E., Chen, J., Fu, G., Gindulyte, A., Han, L., He, J., He, S., & Shoemaker, B. A. (2016). PubChem substance and compound databases. Nucleic Acids Research, 44(D1), D1202–D1213.	Kim, S., Thiessen, P. A., Bolton, E. E., Chen, J., Fu, G., Gindulyte, A., Han, L., He, J., He, S., & Shoemaker, B. A. (2016). PubChem substance and compound databases. Nucleic Acids Research, 44(D1), D1202–D1213.	Dennington, R., Keith, T., & Millam, J. (2009). GaussView, version 5 Gaussian09, R. A. (2009). 1, mj frisch, gw trucks, hb schlegel, ge scuseria, ma robb, jr cheeseman, g. Scalmani, v. Barone, b. Mennucci, ga petersson et al., gaussian. Inc., Wallingford CT, 121, 150-166.	Dennington, R., Keith, T., & Millam, J. (2009). GaussView, version 5 Gaussian09, R. A. (2009). 1, mj frisch, gw trucks, hb schlegel, ge scuseria, ma robb, jr cheeseman, g. Scalmani, v. Barone, b. Mennucci, ga petersson et al., gaussian. Inc., Wallingford CT, 121, 150-166.

Apéndice 41. Referencias bibliográficas de la matriz de datos de propiedades fisicoquímicas de herbicidas seleccionados (Continuación).

N°	NOMBRE	ENERGIA TERMICA (KCAL/MOL)	CAPACIDAD CALORIFICA (kcal/mol-K)	ENTROPIA (kcal/mol-K)	POLARIDAD α (C*m2/V)
8	Dicamba - CAS: 1918-00-9	Dennington, R., Keith, T., & Millam, J. (2009). GaussView, version 5 Gaussian09, R. A. (2009). 1, mj frisch, gw trucks, hb schlegel, ge scuseria, ma robb, jr cheeseman, g. Scalmani, v. Barone, b. Mennucci, ga petersson et al., gaussian. Inc., Wallingford CT, 121, 150-166.	Dennington, R., Keith, T., & Millam, J. (2009). GaussView, version 5 Gaussian09, R. A. (2009). 1, mj frisch, gw trucks, hb schlegel, ge scuseria, ma robb, jr cheeseman, g. Scalmani, v. Barone, b. Mennucci, ga petersson et al., gaussian. Inc., Wallingford CT, 121, 150-166.	Dennington, R., Keith, T., & Millam, J. (2009). GaussView, version 5 Gaussian09, R. A. (2009). 1, mj frisch, gw trucks, hb schlegel, ge scuseria, ma robb, jr cheeseman, g. Scalmani, v. Barone, b. Mennucci, ga petersson et al., gaussian. Inc., Wallingford CT, 121, 150-166.	Dennington, R., Keith, T., & Millam, J. (2009). GaussView, version 5 Gaussian09, R. A. (2009). 1, mj frisch, gw trucks, hb schlegel, ge scuseria, ma robb, jr cheeseman, g. Scalmani, v. Barone, b. Mennucci, ga petersson et al., gaussian. Inc., Wallingford CT, 121, 150-166.

Apéndice 41. Referencias bibliográficas de la matriz de datos de propiedades fisicoquímicas de herbicidas seleccionados (Continuación).

N°	NOMBRE	PESO MOLECULAR (g/mol)	TEMPERATURA DE FUSION (K)	PUNTO DE EBULLICION NORMAL (K)	DENSIDAD A 298,15 K - (g/ml)
8	Dicamba - CAS: 1918-00-9	Kim, S., Thiessen, P. A., Bolton, E. E., Chen, J., Fu, G., Gindulyte, A., Han, L., He, J., He, S., & Shoemaker, B. A. (2016). PubChem substance and compound databases. Nucleic Acids Research, 44(D1), D1202–D1213.	Bennett, G. (1992). International chemical safety cards: by Commission of the European Communities and International Programme on Chemical Safety, World Health Organization, Geneva, Switzerland, 1990, ISBN 92. Elsevier. https://www.ilo.org/safework/info/publications/WCMS_113134/lang--en/index.htm	Santa Cruz Biotechnology. 2020. "Base de Datos." Base de Datos - Productos Químicos. Retrieved September 12, 2020 (https://www.scbt.com/es/home).	Bennett, G. (1992). International chemical safety cards: by Commission of the European Communities and International Programme on Chemical Safety, World Health Organization, Geneva, Switzerland, 1990, ISBN 92. Elsevier. https://www.ilo.org/safework/info/publications/WCMS_113134/lang--en/index.htm

Apéndice 41. Referencias bibliográficas de la matriz de datos de propiedades fisicoquímicas de herbicidas seleccionados (Continuación).

N°	NOMBRE	Constante de disociación pKa	Coeficiente de Adsorción de carbono orgánico (Log KOC):	Solubilidad en agua (mg/L a 25°C)	Presión de vapor (Pa a 25°C)
8	Dicamba - CAS: 1918-00-9	Chemical Book. 2020. "Chemical Search Engine." Base de Datos de Productos Químicos. Retrieved September 12, 2020 (https://www.chemicalbook.com/ProductIndex_EN.aspx).	Pence, H. E., & Williams, A. (2010). ChemSpider: an online chemical information resource. Mackay, D., Shiu, W. Y., & Lee, S. C. (2006). Handbook of physical-chemical properties and environmental fate for organic chemicals. CRC press.	Pence, H. E., & Williams, A. (2010). ChemSpider: an online chemical information resource. Mackay, D., Shiu, W. Y., & Lee, S. C. (2006). Handbook of physical-chemical properties and environmental fate for organic chemicals. CRC press.	Pence, H. E., & Williams, A. (2010). ChemSpider: an online chemical information resource. Mackay, D., Shiu, W. Y., & Lee, S. C. (2006). Handbook of physical-chemical properties and environmental fate for organic chemicals. CRC press.

Apéndice 41. Referencias bibliográficas de la matriz de datos de propiedades fisicoquímicas de herbicidas seleccionados (Continuación).

N°	NOMBRE	coeficiente de partición de octanol agua (Log KOW)	Ley de Henry (Pa·m ³ /mol at 25°C)	Factor de bioconcentraci ón (BCF)	Vida media (Días)
8	Dicamba - CAS: 1918-00-9	Pence, H. E., & Williams, A. (2010). ChemSpider: an online chemical information resource. Mackay, D., Shiu, W. Y., & Lee, S. C. (2006). Handbook of physical- chemical properties and environmental fate for organic chemicals. CRC press.	Pence, H. E., & Williams, A. (2010). ChemSpider: an online chemical information resource. Mackay, D., Shiu, W. Y., & Lee, S. C. (2006). Handbook of physical- chemical properties and environmental fate for organic chemicals. CRC press.	Pence, H. E., & Williams, A. (2010). ChemSpider: an online chemical information resource. Mackay, D., Shiu, W. Y., & Lee, S. C. (2006). Handbook of physical- chemical properties and environmental fate for organic chemicals. CRC press.	Pence, H. E., & Williams, A. (2010). ChemSpider: an online chemical information resource. Mackay, D., Shiu, W. Y., & Lee, S. C. (2006). Handbook of physical- chemical properties and environmental fate for organic chemicals. CRC press.

Apéndice 41. Referencias bibliográficas de la matriz de datos de propiedades fisicoquímicas de herbicidas seleccionados (Continuación).

N°	NOMBRE	Indice de Refracción	coeficiente de partición octanol aire (KOA)	Volatilización desde agua (atm-m ³ /mol)	Toxicología DL50 (mg/Kg) ORAL -RATAS - BIBLIOGRAFÍA
8	Dicamba - CAS: 1918-00-9	Pence, H. E., & Williams, A. (2010). ChemSpider: an online chemical information resource. Mackay, D., Shiu, W. Y., & Lee, S. C. (2006). Handbook of physical-chemical properties and environmental fate for organic chemicals. CRC press.	Pence, H. E., & Williams, A. (2010). ChemSpider: an online chemical information resource. Mackay, D., Shiu, W. Y., & Lee, S. C. (2006). Handbook of physical-chemical properties and environmental fate for organic chemicals. CRC press.	Pence, H. E., & Williams, A. (2010). ChemSpider: an online chemical information resource. Mackay, D., Shiu, W. Y., & Lee, S. C. (2006). Handbook of physical-chemical properties and environmental fate for organic chemicals. CRC press.	ChemIDplus, U. S. 2014. "National Library of Medicine."

Apéndice 41. Referencias bibliográficas de la matriz de datos de propiedades fisicoquímicas de herbicidas seleccionados (Continuación).

N°	NOMBRE	Categoría Toxicológica DL50 (mg/Kg) (SEGÚN RESOLUCIÓN 10834 DE 1992)	Categoría Toxicológica DL50 (mg/Kg) (SEGÚN RESOLUCIÓN 10834 DE 1992)	Categoría Toxicológica Mayor DL50 (mg/Kg) Oral Ratas - Presentación Comercial - (SEGÚN REGISTRO DEL ICA)	Categoría Toxicológica Mayor DL50 (mg/Kg) Oral Ratas - Presentación Comercial - (SEGÚN REGISTRO DEL ICA)
8	Dicamba - CAS: 1918-00-9	Ministerio de Salud de Colombia. (1992). RESOLUCIÓN 10834 DE 1992. Septiembre 07, 2020, de Ministerio de Salud de Colombia Sitio web: https://www.icbf.gov.co/cargues/avance/docs/resolucion_min_salud_10834_1992.htm	Ministerio de Salud de Colombia. (1992). RESOLUCIÓN 10834 DE 1992. Septiembre 07, 2020, de Ministerio de Salud de Colombia Sitio web: https://www.icbf.gov.co/cargues/avance/docs/resolucion_min_salud_10834_1992.htm	ICA. 2020. REGISTROS PLAGUICIDAS REGISTRADOS - 16 DE JULIO 2020. BOGOTA - COLOMBIA.	ICA. 2020. REGISTROS PLAGUICIDAS REGISTRADOS - 16 DE JULIO 2020. BOGOTA - COLOMBIA.

Apéndice 41. Referencias bibliográficas de la matriz de datos de propiedades fisicoquímicas de herbicidas seleccionados (Continuación).

N°	NOMBRE	GRUPO FUNCIONAL IUPAC	FAMILIA QUÍMICA, GRUPO TOXÓFORO	SELECTIVIDAD	MODO DE ACCIÓN	TIPO DE SIEMBRA
8	Dicamba - CAS: 1918-00-9	<p>Velasco, M. A., Y. Caballero Arroyo, and G. Quezad. 2006. Grupos Funcionales. Nomenclatura Y Reacciones Principales. Unam.</p> <p>Fernández, G. 2011. Nomenclatura En Química Orgánica. Germán Fernández.</p>	<p>Diez, P. (2013). Manejo de malezas problema: Modos de acción de herbicidas. Red de conocimiento en malezas resistentes. Rosario, Argentina.</p>	<p>de plaguicidas de Centroamérica, M. Consultado febrero del 2018.</p>	<p>Diez, P. (2013). Manejo de malezas problema: Modos de acción de herbicidas. Red de conocimiento en malezas resistentes. Rosario, Argentina.</p>	<p>Diez, P. (2013). Manejo de malezas problema: Modos de acción de herbicidas. Red de conocimiento en malezas resistentes. Rosario, Argentina.</p>

Apéndice 41. Referencias bibliográficas de la matriz de datos de propiedades fisicoquímicas de herbicidas seleccionados (Continuación).

N°	NOMBRE	ESTRUCTURA MOLECULAR	FORMULA MOLECULAR	MOMENTO DIPOLAR (Debye)	ENERGIA TOTAL (KCAL/MOL)
9	Diclofop-metil - CAS: 51338-27-3	Kim, S., Thiessen, P. A., Bolton, E. E., Chen, J., Fu, G., Gindulyte, A., Han, L., He, J., He, S., & Shoemaker, B. A. (2016). PubChem substance and compound databases. Nucleic Acids Research, 44(D1), D1202–D1213.	Kim, S., Thiessen, P. A., Bolton, E. E., Chen, J., Fu, G., Gindulyte, A., Han, L., He, J., He, S., & Shoemaker, B. A. (2016). PubChem substance and compound databases. Nucleic Acids Research, 44(D1), D1202–D1213.	Dennington, R., Keith, T., & Millam, J. (2009). GaussView, version 5 Gaussian09, R. A. (2009). 1, mj frisch, gw trucks, hb schlegel, ge scuseria, ma robb, jr cheeseman, g. Scalmani, v. Barone, b. Mennucci, ga petersson et al., gaussian. Inc., Wallingford CT, 121, 150-166.	Dennington, R., Keith, T., & Millam, J. (2009). GaussView, version 5 Gaussian09, R. A. (2009). 1, mj frisch, gw trucks, hb schlegel, ge scuseria, ma robb, jr cheeseman, g. Scalmani, v. Barone, b. Mennucci, ga petersson et al., gaussian. Inc., Wallingford CT, 121, 150-166.

Apéndice 41. Referencias bibliográficas de la matriz de datos de propiedades fisicoquímicas de herbicidas seleccionados (Continuación).

N°	NOMBRE	ENERGIA TERMICA (KCAL/MOL)	CAPACIDAD CALORIFICA (kcal/mol-K)	ENTROPIA (kcal/mol-K)	POLARIDAD α (C*m2/V)
9	Diclofop-metil - CAS: 51338-27-3	Dennington, R., Keith, T., & Millam, J. (2009). GaussView, version 5 Gaussian09, R. A. (2009). 1, mj frisch, gw trucks, hb schlegel, ge scuseria, ma robb, jr cheeseman, g. Scalmani, v. Barone, b. Mennucci, ga petersson et al., gaussian. Inc., Wallingford CT, 121, 150-166.	Dennington, R., Keith, T., & Millam, J. (2009). GaussView, version 5 Gaussian09, R. A. (2009). 1, mj frisch, gw trucks, hb schlegel, ge scuseria, ma robb, jr cheeseman, g. Scalmani, v. Barone, b. Mennucci, ga petersson et al., gaussian. Inc., Wallingford CT, 121, 150-166.	Dennington, R., Keith, T., & Millam, J. (2009). GaussView, version 5 Gaussian09, R. A. (2009). 1, mj frisch, gw trucks, hb schlegel, ge scuseria, ma robb, jr cheeseman, g. Scalmani, v. Barone, b. Mennucci, ga petersson et al., gaussian. Inc., Wallingford CT, 121, 150-166.	Dennington, R., Keith, T., & Millam, J. (2009). GaussView, version 5 Gaussian09, R. A. (2009). 1, mj frisch, gw trucks, hb schlegel, ge scuseria, ma robb, jr cheeseman, g. Scalmani, v. Barone, b. Mennucci, ga petersson et al., gaussian. Inc., Wallingford CT, 121, 150-166.

Apéndice 41. Referencias bibliográficas de la matriz de datos de propiedades fisicoquímicas de herbicidas seleccionados (Continuación).

N°	NOMBRE	PESO MOLECULAR (g/mol)	TEMPERATURA DE FUSION (K)	PUNTO DE EBULLICION NORMAL (K)	DENSIDAD A 298,15 K - (g/ml)
9	Diclofop-metil - CAS: 51338-27-3	Kim, S., Thiessen, P. A., Bolton, E. E., Chen, J., Fu, G., Gindulyte, A., Han, L., He, J., He, S., & Shoemaker, B. A. (2016). PubChem substance and compound databases. Nucleic Acids Research, 44(D1), D1202–D1213.	Santa Cruz Biotechnology. 2020. "Base de Datos." Base de Datos - Productos Químicos. Retrieved September 12, 2020 (https://www.scbt.com/es/home).	Santa Cruz Biotechnology. 2020. "Base de Datos." Base de Datos - Productos Químicos. Retrieved September 12, 2020 (https://www.scbt.com/es/home).	Santa Cruz Biotechnology. 2020. "Base de Datos." Base de Datos - Productos Químicos. Retrieved September 12, 2020 (https://www.scbt.com/es/home).

Apéndice 41. Referencias bibliográficas de la matriz de datos de propiedades fisicoquímicas de herbicidas seleccionados (Continuación).

N°	NOMBRE	Constante de disociación pKa	Coeficiente de Adsorción de carbono orgánico (Log KOC):	Solubilidad en agua (mg/L a 25°C)	Presión de vapor (Pa a 25°C)
9	Diclofop-metil - CAS: 51338-27-3	WISHART, David S., et al. DrugBank: a knowledgebase for drugs, drug actions and drug targets. Nucleic acids research, 2008, vol. 36, no suppl_1, p. D901-D906.	Pence, H. E., & Williams, A. (2010). ChemSpider: an online chemical information resource. Mackay, D., Shiu, W. Y., & Lee, S. C. (2006). Handbook of physical-chemical properties and environmental fate for organic chemicals. CRC press.	Pence, H. E., & Williams, A. (2010). ChemSpider: an online chemical information resource. Mackay, D., Shiu, W. Y., & Lee, S. C. (2006). Handbook of physical-chemical properties and environmental fate for organic chemicals. CRC press.	Pence, H. E., & Williams, A. (2010). ChemSpider: an online chemical information resource. Mackay, D., Shiu, W. Y., & Lee, S. C. (2006). Handbook of physical-chemical properties and environmental fate for organic chemicals. CRC press.

Apéndice 41. Referencias bibliográficas de la matriz de datos de propiedades fisicoquímicas de herbicidas seleccionados (Continuación).

N°	NOMBRE	coeficiente de partición de octanol agua (Log KOW)	Ley de Henry (Pa·m ³ /mol at 25°C)	Factor de bioconcentraci ón (BCF)	Vida media (Días)
9	Diclofop-metil - CAS: 51338-27-3	Pence, H. E., & Williams, A. (2010). ChemSpider: an online chemical information resource. Mackay, D., Shiu, W. Y., & Lee, S. C. (2006). Handbook of physical- chemical properties and environmental fate for organic chemicals. CRC press.	Pence, H. E., & Williams, A. (2010). ChemSpider: an online chemical information resource. Mackay, D., Shiu, W. Y., & Lee, S. C. (2006). Handbook of physical- chemical properties and environmental fate for organic chemicals. CRC press.	Pence, H. E., & Williams, A. (2010). ChemSpider: an online chemical information resource. Mackay, D., Shiu, W. Y., & Lee, S. C. (2006). Handbook of physical- chemical properties and environmental fate for organic chemicals. CRC press.	Pence, H. E., & Williams, A. (2010). ChemSpider: an online chemical information resource. Mackay, D., Shiu, W. Y., & Lee, S. C. (2006). Handbook of physical- chemical properties and environmental fate for organic chemicals. CRC press.

Apéndice 41. Referencias bibliográficas de la matriz de datos de propiedades fisicoquímicas de herbicidas seleccionados (Continuación).

N°	NOMBRE	Indice de Refracción	coeficiente de partición octanol aire (KOA)	Volatilización desde agua (atm-m ³ /mol)	Toxicología DL50 (mg/Kg) ORAL -RATAS - BIBLIOGRAFÍA
9	Diclofop-metil - CAS: 51338-27-3	Pence, H. E., & Williams, A. (2010). ChemSpider: an online chemical information resource. Mackay, D., Shiu, W. Y., & Lee, S. C. (2006). Handbook of physical-chemical properties and environmental fate for organic chemicals. CRC press.	Pence, H. E., & Williams, A. (2010). ChemSpider: an online chemical information resource. Mackay, D., Shiu, W. Y., & Lee, S. C. (2006). Handbook of physical-chemical properties and environmental fate for organic chemicals. CRC press.	Pence, H. E., & Williams, A. (2010). ChemSpider: an online chemical information resource. Mackay, D., Shiu, W. Y., & Lee, S. C. (2006). Handbook of physical-chemical properties and environmental fate for organic chemicals. CRC press.	ChemIDplus, U. S. 2014. "National Library of Medicine."

Apéndice 41. Referencias bibliográficas de la matriz de datos de propiedades fisicoquímicas de herbicidas seleccionados (Continuación).

N°	NOMBRE	Categoría Toxicológica DL50 (mg/Kg) (SEGÚN RESOLUCIÓN 10834 DE 1992)	Categoría Toxicológica DL50 (mg/Kg) (SEGÚN RESOLUCIÓN 10834 DE 1992)	Categoría Toxicológica Mayor DL50 (mg/Kg) Oral Ratas - Presentación Comercial - (SEGÚN REGISTRO DEL ICA)	Categoría Toxicológica Mayor DL50 (mg/Kg) Oral Ratas - Presentación Comercial - (SEGÚN REGISTRO DEL ICA)
9	Diclofop-metil - CAS: 51338-27-3	Ministerio de Salud de Colombia. (1992). RESOLUCIÓN 10834 DE 1992. Septiembre 07, 2020, de Ministerio de Salud de Colombia Sitio web: https://www.icbf.gov.co/cargues/avance/docs/resolucion_min_salud_10834_1992.htm	Ministerio de Salud de Colombia. (1992). RESOLUCIÓN 10834 DE 1992. Septiembre 07, 2020, de Ministerio de Salud de Colombia Sitio web: https://www.icbf.gov.co/cargues/avance/docs/resolucion_min_salud_10834_1992.htm	ICA. 2020. REGISTROS PLAGUICIDAS REGISTRADOS - 16 DE JULIO 2020. BOGOTA - COLOMBIA.	ICA. 2020. REGISTROS PLAGUICIDAS REGISTRADOS - 16 DE JULIO 2020. BOGOTA - COLOMBIA.

Apéndice 41. Referencias bibliográficas de la matriz de datos de propiedades fisicoquímicas de herbicidas seleccionados (Continuación).

N°	NOMBRE	GRUPO FUNCIONAL IUPAC	FAMILIA QUÍMICA, GRUPO TOXÓFORO	SELECTIVIDAD	MODO DE ACCIÓN	TIPO DE SIEMBRA
9	Diclofop-metil - CAS: 51338-27-3	<p>Velasco, M. A., Y. Caballero Arroyo, and G. Quezad. 2006. Grupos Funcionales. Nomenclatura Y Reacciones Principales. Unam.</p> <p>Fernández, G. 2011. Nomenclatura En Química Orgánica. Germán Fernández.</p>	<p>Diez, P. (2013). Manejo de malezas problema: Modos de acción de herbicidas. Red de conocimiento en malezas resistentes. Rosario, Argentina.</p>	<p>de plaguicidas de Centroamérica, M. Consultado febrero del 2018.</p>	<p>Diez, P. (2013). Manejo de malezas problema: Modos de acción de herbicidas. Red de conocimiento en malezas resistentes. Rosario, Argentina.</p>	<p>Diez, P. (2013). Manejo de malezas problema: Modos de acción de herbicidas. Red de conocimiento en malezas resistentes. Rosario, Argentina.</p>

Apéndice 41. Referencias bibliográficas de la matriz de datos de propiedades fisicoquímicas de herbicidas seleccionados (Continuación).

N°	NOMBRE	ESTRUCTURA MOLECULAR	FORMULA MOLECULAR	MOMENTO DIPOLAR (Debye)	ENERGIA TOTAL (KCAL/MOL)
10	Difenamida - CAS: 957-51-7	Kim, S., Thiessen, P. A., Bolton, E. E., Chen, J., Fu, G., Gindulyte, A., Han, L., He, J., He, S., & Shoemaker, B. A. (2016). PubChem substance and compound databases. Nucleic Acids Research, 44(D1), D1202–D1213.	Kim, S., Thiessen, P. A., Bolton, E. E., Chen, J., Fu, G., Gindulyte, A., Han, L., He, J., He, S., & Shoemaker, B. A. (2016). PubChem substance and compound databases. Nucleic Acids Research, 44(D1), D1202–D1213.	Dennington, R., Keith, T., & Millam, J. (2009). GaussView, version 5 Gaussian09, R. A. (2009). 1, mj frisch, gw trucks, hb schlegel, ge scuseria, ma robb, jr cheeseman, g. Scalmani, v. Barone, b. Mennucci, ga petersson et al., gaussian. Inc., Wallingford CT, 121, 150-166.	Dennington, R., Keith, T., & Millam, J. (2009). GaussView, version 5 Gaussian09, R. A. (2009). 1, mj frisch, gw trucks, hb schlegel, ge scuseria, ma robb, jr cheeseman, g. Scalmani, v. Barone, b. Mennucci, ga petersson et al., gaussian. Inc., Wallingford CT, 121, 150-166.

Apéndice 41. Referencias bibliográficas de la matriz de datos de propiedades fisicoquímicas de herbicidas seleccionados (Continuación).

N°	NOMBRE	ENERGIA TERMICA (KCAL/MOL)	CAPACIDAD CALORIFICA (kcal/mol-K)	ENTROPIA (kcal/mol-K)	POLARIDAD α (C*m2/V)
10	Difenamida - CAS: 957-51-7	Dennington, R., Keith, T., & Millam, J. (2009). GaussView, version 5 Gaussian09, R. A. (2009). 1, mj frisch, gw trucks, hb schlegel, ge scuseria, ma robb, jr cheeseman, g. Scalmani, v. Barone, b. Mennucci, ga petersson et al., gaussian. Inc., Wallingford CT, 121, 150-166.	Dennington, R., Keith, T., & Millam, J. (2009). GaussView, version 5 Gaussian09, R. A. (2009). 1, mj frisch, gw trucks, hb schlegel, ge scuseria, ma robb, jr cheeseman, g. Scalmani, v. Barone, b. Mennucci, ga petersson et al., gaussian. Inc., Wallingford CT, 121, 150-166.	Dennington, R., Keith, T., & Millam, J. (2009). GaussView, version 5 Gaussian09, R. A. (2009). 1, mj frisch, gw trucks, hb schlegel, ge scuseria, ma robb, jr cheeseman, g. Scalmani, v. Barone, b. Mennucci, ga petersson et al., gaussian. Inc., Wallingford CT, 121, 150-166.	Dennington, R., Keith, T., & Millam, J. (2009). GaussView, version 5 Gaussian09, R. A. (2009). 1, mj frisch, gw trucks, hb schlegel, ge scuseria, ma robb, jr cheeseman, g. Scalmani, v. Barone, b. Mennucci, ga petersson et al., gaussian. Inc., Wallingford CT, 121, 150-166.

Apéndice 41. Referencias bibliográficas de la matriz de datos de propiedades fisicoquímicas de herbicidas seleccionados (Continuación).

N°	NOMBRE	PESO MOLECULAR (g/mol)	TEMPERATURA DE FUSION (K)	PUNTO DE EBULLICION NORMAL (K)	DENSIDAD A 298,15 K - (g/ml)
10	Difenamida - CAS: 957-51-7	Kim, S., Thiessen, P. A., Bolton, E. E., Chen, J., Fu, G., Gindulyte, A., Han, L., He, J., He, S., & Shoemaker, B. A. (2016). PubChem substance and compound databases. Nucleic Acids Research, 44(D1), D1202–D1213.	Bennett, G. (1992). International chemical safety cards: by Commission of the European Communities and International Programme on Chemical Safety, World Health Organization, Geneva, Switzerland, 1990, ISBN 92. Elsevier. https://www.ilo.org/safework/info/publications/WCMS_113134/lang--en/index.htm	Bennett, G. (1992). International chemical safety cards: by Commission of the European Communities and International Programme on Chemical Safety, World Health Organization, Geneva, Switzerland, 1990, ISBN 92. Elsevier. https://www.ilo.org/safework/info/publications/WCMS_113134/lang--en/index.htm	Bennett, G. (1992). International chemical safety cards: by Commission of the European Communities and International Programme on Chemical Safety, World Health Organization, Geneva, Switzerland, 1990, ISBN 92. Elsevier. https://www.ilo.org/safework/info/publications/WCMS_113134/lang--en/index.htm

Apéndice 41. Referencias bibliográficas de la matriz de datos de propiedades fisicoquímicas de herbicidas seleccionados (Continuación).

N°	NOMBRE	Constante de disociación pKa	Coeficiente de Adsorción de carbono orgánico (Log KOC):	Solubilidad en agua (mg/L a 25°C)	Presión de vapor (Pa a 25°C)
10	Difenamida - CAS: 957-51-7	Chemical Book. 2020. "Chemical Search Engine." Base de Datos de Productos Químicos. Retrieved September 12, 2020 (https://www.chemicalbook.com/ProductIndex_EN.aspx).	Pence, H. E., & Williams, A. (2010). ChemSpider: an online chemical information resource. Mackay, D., Shiu, W. Y., & Lee, S. C. (2006). Handbook of physical-chemical properties and environmental fate for organic chemicals. CRC press.	Pence, H. E., & Williams, A. (2010). ChemSpider: an online chemical information resource. Mackay, D., Shiu, W. Y., & Lee, S. C. (2006). Handbook of physical-chemical properties and environmental fate for organic chemicals. CRC press.	Pence, H. E., & Williams, A. (2010). ChemSpider: an online chemical information resource. Mackay, D., Shiu, W. Y., & Lee, S. C. (2006). Handbook of physical-chemical properties and environmental fate for organic chemicals. CRC press.

Apéndice 41. Referencias bibliográficas de la matriz de datos de propiedades fisicoquímicas de herbicidas seleccionados (Continuación).

N°	NOMBRE	coeficiente de partición de octanol agua (Log KOW)	Ley de Henry (Pa·m ³ /mol at 25°C)	Factor de bioconcentraci ón (BCF)	Vida media (Días)
10	Difenamida - CAS: 957-51-7	Pence, H. E., & Williams, A. (2010). ChemSpider: an online chemical information resource. Mackay, D., Shiu, W. Y., & Lee, S. C. (2006). Handbook of physical- chemical properties and environmental fate for organic chemicals. CRC press.	Pence, H. E., & Williams, A. (2010). ChemSpider: an online chemical information resource. Mackay, D., Shiu, W. Y., & Lee, S. C. (2006). Handbook of physical- chemical properties and environmental fate for organic chemicals. CRC press.	Pence, H. E., & Williams, A. (2010). ChemSpider: an online chemical information resource. Mackay, D., Shiu, W. Y., & Lee, S. C. (2006). Handbook of physical- chemical properties and environmental fate for organic chemicals. CRC press.	Pence, H. E., & Williams, A. (2010). ChemSpider: an online chemical information resource. Mackay, D., Shiu, W. Y., & Lee, S. C. (2006). Handbook of physical- chemical properties and environmental fate for organic chemicals. CRC press.

Apéndice 41. Referencias bibliográficas de la matriz de datos de propiedades fisicoquímicas de herbicidas seleccionados (Continuación).

N°	NOMBRE	Indice de Refracción	coeficiente de partición octanol aire (KOA)	Volatilización desde agua (atm-m ³ /mol)	Toxicología DL50 (mg/Kg) ORAL -RATAS - BIBLIOGRAFÍA
10	Difenamida - CAS: 957-51-7	Pence, H. E., & Williams, A. (2010). ChemSpider: an online chemical information resource. Mackay, D., Shiu, W. Y., & Lee, S. C. (2006). Handbook of physical-chemical properties and environmental fate for organic chemicals. CRC press.	Pence, H. E., & Williams, A. (2010). ChemSpider: an online chemical information resource. Mackay, D., Shiu, W. Y., & Lee, S. C. (2006). Handbook of physical-chemical properties and environmental fate for organic chemicals. CRC press.	Pence, H. E., & Williams, A. (2010). ChemSpider: an online chemical information resource. Mackay, D., Shiu, W. Y., & Lee, S. C. (2006). Handbook of physical-chemical properties and environmental fate for organic chemicals. CRC press.	ChemIDplus, U. S. 2014. "National Library of Medicine."

Apéndice 41. Referencias bibliográficas de la matriz de datos de propiedades fisicoquímicas de herbicidas seleccionados (Continuación).

N°	NOMBRE	Categoría Toxicológica DL50 (mg/Kg) (SEGÚN RESOLUCIÓN 10834 DE 1992)	Categoría Toxicológica DL50 (mg/Kg) (SEGÚN RESOLUCIÓN 10834 DE 1992)	Categoría Toxicológica Mayor DL50 (mg/Kg) Oral Ratas - Presentación Comercial - (SEGÚN REGISTRO DEL ICA)	Categoría Toxicológica Mayor DL50 (mg/Kg) Oral Ratas - Presentación Comercial - (SEGÚN REGISTRO DEL ICA)
10	Difenamida - CAS: 957-51-7	Ministerio de Salud de Colombia. (1992). RESOLUCIÓN 10834 DE 1992. Septiembre 07, 2020, de Ministerio de Salud de Colombia Sitio web: https://www.icbf.gov.co/cargues/avance/docs/resolucion_min_salud_10834_1992.htm	Ministerio de Salud de Colombia. (1992). RESOLUCIÓN 10834 DE 1992. Septiembre 07, 2020, de Ministerio de Salud de Colombia Sitio web: https://www.icbf.gov.co/cargues/avance/docs/resolucion_min_salud_10834_1992.htm	ICA. 2020. REGISTROS PLAGUICIDAS REGISTRADOS - 16 DE JULIO 2020. BOGOTA - COLOMBIA.	ICA. 2020. REGISTROS PLAGUICIDAS REGISTRADOS - 16 DE JULIO 2020. BOGOTA - COLOMBIA.

Apéndice 41. Referencias bibliográficas de la matriz de datos de propiedades fisicoquímicas de herbicidas seleccionados (Continuación).

N°	NOMBRE	GRUPO FUNCIONAL IUPAC	FAMILIA QUÍMICA, GRUPO TOXÓFORO	SELECTIVIDAD	MODO DE ACCIÓN	TIPO DE SIEMBRA
10	Difenamida - CAS: 957-51-7	<p>Velasco, M. A., Y. Caballero Arroyo, and G. Quezad. 2006. Grupos Funcionales. Nomenclatura Y Reacciones Principales. Unam.</p> <p>Fernández, G. 2011. Nomenclatura En Química Orgánica. Germán Fernández.</p>	<p>Diez, P. (2013). Manejo de malezas problema: Modos de acción de herbicidas. Red de conocimiento en malezas resistentes. Rosario, Argentina.</p>	<p>de plaguicidas de Centroamérica, M. Consultado febrero del 2018.</p>	<p>Diez, P. (2013). Manejo de malezas problema: Modos de acción de herbicidas. Red de conocimiento en malezas resistentes. Rosario, Argentina.</p>	<p>Diez, P. (2013). Manejo de malezas problema: Modos de acción de herbicidas. Red de conocimiento en malezas resistentes. Rosario, Argentina.</p>

Apéndice 41. Referencias bibliográficas de la matriz de datos de propiedades fisicoquímicas de herbicidas seleccionados (Continuación).

N°	NOMBRE	ESTRUCTURA MOLECULAR	FORMULA MOLECULAR	MOMENTO DIPOLAR (Debye)	ENERGIA TOTAL (KCAL/MOL)
11	Diflufenican CAS: 83164-33-4	Kim, S., Thiessen, P. A., Bolton, E. E., Chen, J., Fu, G., Gindulyte, A., Han, L., He, J., He, S., & Shoemaker, B. A. (2016). PubChem substance and compound databases. Nucleic Acids Research, 44(D1), D1202–D1213.	Kim, S., Thiessen, P. A., Bolton, E. E., Chen, J., Fu, G., Gindulyte, A., Han, L., He, J., He, S., & Shoemaker, B. A. (2016). PubChem substance and compound databases. Nucleic Acids Research, 44(D1), D1202–D1213.	Dennington, R., Keith, T., & Millam, J. (2009). GaussView, version 5 Gaussian09, R. A. (2009). 1, mj frisch, gw trucks, hb schlegel, ge scuseria, ma robb, jr cheeseman, g. Scalmani, v. Barone, b. Mennucci, ga petersson et al., gaussian. Inc., Wallingford CT, 121, 150-166.	Dennington, R., Keith, T., & Millam, J. (2009). GaussView, version 5 Gaussian09, R. A. (2009). 1, mj frisch, gw trucks, hb schlegel, ge scuseria, ma robb, jr cheeseman, g. Scalmani, v. Barone, b. Mennucci, ga petersson et al., gaussian. Inc., Wallingford CT, 121, 150-166.

Apéndice 41. Referencias bibliográficas de la matriz de datos de propiedades fisicoquímicas de herbicidas seleccionados (Continuación).

N°	NOMBRE	ENERGIA TERMICA (KCAL/MOL)	CAPACIDAD CALORIFICA (kcal/mol-K)	ENTROPIA (kcal/mol-K)	POLARIDAD α (C*m2/V)
11	Diflufenican CAS: 83164-33-4	Dennington, R., Keith, T., & Millam, J. (2009). GaussView, version 5 Gaussian09, R. A. (2009). 1, mj frisch, gw trucks, hb schlegel, ge scuseria, ma robb, jr cheeseman, g. Scalmani, v. Barone, b. Mennucci, ga petersson et al., gaussian. Inc., Wallingford CT, 121, 150-166.	Dennington, R., Keith, T., & Millam, J. (2009). GaussView, version 5 Gaussian09, R. A. (2009). 1, mj frisch, gw trucks, hb schlegel, ge scuseria, ma robb, jr cheeseman, g. Scalmani, v. Barone, b. Mennucci, ga petersson et al., gaussian. Inc., Wallingford CT, 121, 150-166.	Dennington, R., Keith, T., & Millam, J. (2009). GaussView, version 5 Gaussian09, R. A. (2009). 1, mj frisch, gw trucks, hb schlegel, ge scuseria, ma robb, jr cheeseman, g. Scalmani, v. Barone, b. Mennucci, ga petersson et al., gaussian. Inc., Wallingford CT, 121, 150-166.	Dennington, R., Keith, T., & Millam, J. (2009). GaussView, version 5 Gaussian09, R. A. (2009). 1, mj frisch, gw trucks, hb schlegel, ge scuseria, ma robb, jr cheeseman, g. Scalmani, v. Barone, b. Mennucci, ga petersson et al., gaussian. Inc., Wallingford CT, 121, 150-166.

Apéndice 41. Referencias bibliográficas de la matriz de datos de propiedades fisicoquímicas de herbicidas seleccionados (Continuación).

N°	NOMBRE	PESO MOLECULAR (g/mol)	TEMPERATURA DE FUSION (K)	PUNTO DE EBULLICION NORMAL (K)	DENSIDAD A 298,15 K - (g/ml)
11	Diflufenican CAS: 83164-33-4	Kim, S., Thiessen, P. A., Bolton, E. E., Chen, J., Fu, G., Gindulyte, A., Han, L., He, J., He, S., & Shoemaker, B. A. (2016). PubChem substance and compound databases. Nucleic Acids Research, 44(D1), D1202–D1213.	Santa Cruz Biotechnology. 2020. "Base de Datos." Base de Datos - Productos Químicos. Retrieved September 12, 2020 (https://www.scbt.com/es/home).	Santa Cruz Biotechnology. 2020. "Base de Datos." Base de Datos - Productos Químicos. Retrieved September 12, 2020 (https://www.scbt.com/es/home).	Santa Cruz Biotechnology. 2020. "Base de Datos." Base de Datos - Productos Químicos. Retrieved September 12, 2020 (https://www.scbt.com/es/home).

Apéndice 41. Referencias bibliográficas de la matriz de datos de propiedades fisicoquímicas de herbicidas seleccionados (Continuación).

N°	NOMBRE	Constante de disociación pKa	Coeficiente de Adsorción de carbono orgánico (Log KOC):	Solubilidad en agua (mg/L a 25°C)	Presión de vapor (Pa a 25°C)
11	Diflufenican CAS: 83164-33-4	Chemical Book. 2020. "Chemical Search Engine." Base de Datos de Productos Químicos. Retrieved September 12, 2020 (https://www.chemicalbook.com/ProductIndex_EN.aspx).	Pence, H. E., & Williams, A. (2010). ChemSpider: an online chemical information resource. Mackay, D., Shiu, W. Y., & Lee, S. C. (2006). Handbook of physical-chemical properties and environmental fate for organic chemicals. CRC press.	Pence, H. E., & Williams, A. (2010). ChemSpider: an online chemical information resource. Mackay, D., Shiu, W. Y., & Lee, S. C. (2006). Handbook of physical-chemical properties and environmental fate for organic chemicals. CRC press.	Pence, H. E., & Williams, A. (2010). ChemSpider: an online chemical information resource. Mackay, D., Shiu, W. Y., & Lee, S. C. (2006). Handbook of physical-chemical properties and environmental fate for organic chemicals. CRC press.

Apéndice 41. Referencias bibliográficas de la matriz de datos de propiedades fisicoquímicas de herbicidas seleccionados (Continuación).

N°	NOMBRE	coeficiente de partición de octanol agua (Log KOW)	Ley de Henry (Pa·m ³ /mol at 25°C)	Factor de bioconcentración (BCF)	Vida media (Días)
11	Diflufenican CAS: 83164-33-4	Pence, H. E., & Williams, A. (2010). ChemSpider: an online chemical information resource. Mackay, D., Shiu, W. Y., & Lee, S. C. (2006). Handbook of physical-chemical properties and environmental fate for organic chemicals. CRC press.	Pence, H. E., & Williams, A. (2010). ChemSpider: an online chemical information resource. Mackay, D., Shiu, W. Y., & Lee, S. C. (2006). Handbook of physical-chemical properties and environmental fate for organic chemicals. CRC press.	Pence, H. E., & Williams, A. (2010). ChemSpider: an online chemical information resource. Mackay, D., Shiu, W. Y., & Lee, S. C. (2006). Handbook of physical-chemical properties and environmental fate for organic chemicals. CRC press.	Pence, H. E., & Williams, A. (2010). ChemSpider: an online chemical information resource. Mackay, D., Shiu, W. Y., & Lee, S. C. (2006). Handbook of physical-chemical properties and environmental fate for organic chemicals. CRC press.

Apéndice 41. Referencias bibliográficas de la matriz de datos de propiedades fisicoquímicas de herbicidas seleccionados (Continuación).

N°	NOMBRE	Indice de Refracción	coeficiente de partición octanol aire (KOA)	Volatilización desde agua (atm-m ³ /mol)	Toxicología DL50 (mg/Kg) ORAL -RATAS - BIBLIOGRAFÍA
11	Diflufenican CAS: 83164-33-4	Pence, H. E., & Williams, A. (2010). ChemSpider: an online chemical information resource. Mackay, D., Shiu, W. Y., & Lee, S. C. (2006). Handbook of physical-chemical properties and environmental fate for organic chemicals. CRC press.	Pence, H. E., & Williams, A. (2010). ChemSpider: an online chemical information resource. Mackay, D., Shiu, W. Y., & Lee, S. C. (2006). Handbook of physical-chemical properties and environmental fate for organic chemicals. CRC press.	Pence, H. E., & Williams, A. (2010). ChemSpider: an online chemical information resource. Mackay, D., Shiu, W. Y., & Lee, S. C. (2006). Handbook of physical-chemical properties and environmental fate for organic chemicals. CRC press.	ChemIDplus, U. S. 2014. "National Library of Medicine."

Apéndice 41. Referencias bibliográficas de la matriz de datos de propiedades fisicoquímicas de herbicidas seleccionados (Continuación).

N°	NOMBRE	Categoría Toxicológica DL50 (mg/Kg) (SEGÚN RESOLUCIÓN 10834 DE 1992)	Categoría Toxicológica DL50 (mg/Kg) (SEGÚN RESOLUCIÓN 10834 DE 1992)	Categoría Toxicológica Mayor DL50 (mg/Kg) Oral Ratas - Presentación Comercial - (SEGÚN REGISTRO DEL ICA)	Categoría Toxicológica Mayor DL50 (mg/Kg) Oral Ratas - Presentación Comercial - (SEGÚN REGISTRO DEL ICA)
11	Diflufenican CAS: 83164-33-4	Ministerio de Salud de Colombia. (1992). RESOLUCIÓN 10834 DE 1992. Septiembre 07, 2020, de Ministerio de Salud de Colombia Sitio web: https://www.icbf.gov.co/cargues/avance/docs/resolucion_min_salud_10834_1992.htm	Ministerio de Salud de Colombia. (1992). RESOLUCIÓN 10834 DE 1992. Septiembre 07, 2020, de Ministerio de Salud de Colombia Sitio web: https://www.icbf.gov.co/cargues/avance/docs/resolucion_min_salud_10834_1992.htm	ICA. 2020. REGISTROS PLAGUICIDAS REGISTRADOS - 16 DE JULIO 2020. BOGOTA - COLOMBIA.	ICA. 2020. REGISTROS PLAGUICIDAS REGISTRADOS - 16 DE JULIO 2020. BOGOTA - COLOMBIA.

Apéndice 41. Referencias bibliográficas de la matriz de datos de propiedades fisicoquímicas de herbicidas seleccionados (Continuación).

N°	NOMBRE	GRUPO FUNCIONAL IUPAC	FAMILIA QUÍMICA, GRUPO TOXÓFORO	SELECTIVIDAD	MODO DE ACCIÓN	TIPO DE SIEMBRA
11	Diflufenican CAS: 83164-33-4	<p>Velasco, M. A., Y. Caballero Arroyo, and G. Quezad. 2006. Grupos Funcionales. Nomenclatura Y Reacciones Principales. Unam.</p> <p>Fernández, G. 2011. Nomenclatura En Química Orgánica. Germán Fernández.</p>	<p>Diez, P. (2013). Manejo de malezas problema: Modos de acción de herbicidas. Red de conocimiento en malezas resistentes. Rosario, Argentina.</p>	<p>de plaguicidas de Centroamérica, M. Consultado febrero del 2018.</p>	<p>Diez, P. (2013). Manejo de malezas problema: Modos de acción de herbicidas. Red de conocimiento en malezas resistentes. Rosario, Argentina.</p>	<p>Diez, P. (2013). Manejo de malezas problema: Modos de acción de herbicidas. Red de conocimiento en malezas resistentes. Rosario, Argentina.</p>

Apéndice 41. Referencias bibliográficas de la matriz de datos de propiedades fisicoquímicas de herbicidas seleccionados (Continuación).

N°	NOMBRE	ESTRUCTURA MOLECULAR	FORMULA MOLECULAR	MOMENTO DIPOLAR (Debye)	ENERGIA TOTAL (KCAL/MOL)
12	Diuron - CAS: 330-54-1	Kim, S., Thiessen, P. A., Bolton, E. E., Chen, J., Fu, G., Gindulyte, A., Han, L., He, J., He, S., & Shoemaker, B. A. (2016). PubChem substance and compound databases. Nucleic Acids Research, 44(D1), D1202–D1213.	Kim, S., Thiessen, P. A., Bolton, E. E., Chen, J., Fu, G., Gindulyte, A., Han, L., He, J., He, S., & Shoemaker, B. A. (2016). PubChem substance and compound databases. Nucleic Acids Research, 44(D1), D1202–D1213.	Dennington, R., Keith, T., & Millam, J. (2009). GaussView, version 5 Gaussian09, R. A. (2009). 1, mj frisch, gw trucks, hb schlegel, ge scuseria, ma robb, jr cheeseman, g. Scalmani, v. Barone, b. Mennucci, ga petersson et al., gaussian. Inc., Wallingford CT, 121, 150-166.	Dennington, R., Keith, T., & Millam, J. (2009). GaussView, version 5 Gaussian09, R. A. (2009). 1, mj frisch, gw trucks, hb schlegel, ge scuseria, ma robb, jr cheeseman, g. Scalmani, v. Barone, b. Mennucci, ga petersson et al., gaussian. Inc., Wallingford CT, 121, 150-166.

Apéndice 41. Referencias bibliográficas de la matriz de datos de propiedades fisicoquímicas de herbicidas seleccionados (Continuación).

N°	NOMBRE	ENERGIA TERMICA (KCAL/MOL)	CAPACIDAD CALORIFICA (kcal/mol-K)	ENTROPIA (kcal/mol-K)	POLARIDAD α (C*m2/V)
12	Diuron - CAS: 330-54-1	<p>Dennington, R., Keith, T., & Millam, J. (2009). GaussView, version 5</p> <p>Gaussian09, R. A. (2009). 1, mj frisch, gw trucks, hb schlegel, ge scuseria, ma robb, jr cheeseman, g. Scalmani, v. Barone, b. Mennucci, ga petersson et al., gaussian. Inc., Wallingford CT, 121, 150-166.</p>	<p>Dennington, R., Keith, T., & Millam, J. (2009). GaussView, version 5</p> <p>Gaussian09, R. A. (2009). 1, mj frisch, gw trucks, hb schlegel, ge scuseria, ma robb, jr cheeseman, g. Scalmani, v. Barone, b. Mennucci, ga petersson et al., gaussian. Inc., Wallingford CT, 121, 150-166.</p>	<p>Dennington, R., Keith, T., & Millam, J. (2009). GaussView, version 5</p> <p>Gaussian09, R. A. (2009). 1, mj frisch, gw trucks, hb schlegel, ge scuseria, ma robb, jr cheeseman, g. Scalmani, v. Barone, b. Mennucci, ga petersson et al., gaussian. Inc., Wallingford CT, 121, 150-166.</p>	<p>Dennington, R., Keith, T., & Millam, J. (2009). GaussView, version 5</p> <p>Gaussian09, R. A. (2009). 1, mj frisch, gw trucks, hb schlegel, ge scuseria, ma robb, jr cheeseman, g. Scalmani, v. Barone, b. Mennucci, ga petersson et al., gaussian. Inc., Wallingford CT, 121, 150-166.</p>

Apéndice 41. Referencias bibliográficas de la matriz de datos de propiedades fisicoquímicas de herbicidas seleccionados (Continuación).

N°	NOMBRE	PESO MOLECULAR (g/mol)	TEMPERATURA DE FUSION (K)	PUNTO DE EBULLICION NORMAL (K)	DENSIDAD A 298,15 K - (g/ml)
12	Diuron - CAS: 330-54-1	Kim, S., Thiessen, P. A., Bolton, E. E., Chen, J., Fu, G., Gindulyte, A., Han, L., He, J., He, S., & Shoemaker, B. A. (2016). PubChem substance and compound databases. Nucleic Acids Research, 44(D1), D1202–D1213.	Santa Cruz Biotechnology. 2020. "Base de Datos." Base de Datos - Productos Químicos. Retrieved September 12, 2020 (https://www.scbt.com/es/home).	Santa Cruz Biotechnology. 2020. "Base de Datos." Base de Datos - Productos Químicos. Retrieved September 12, 2020 (https://www.scbt.com/es/home).	Santa Cruz Biotechnology. 2020. "Base de Datos." Base de Datos - Productos Químicos. Retrieved September 12, 2020 (https://www.scbt.com/es/home).

Apéndice 41. Referencias bibliográficas de la matriz de datos de propiedades fisicoquímicas de herbicidas seleccionados (Continuación).

N°	NOMBRE	Constante de disociación pKa	Coeficiente de Adsorción de carbono orgánico (Log KOC):	Solubilidad en agua (mg/L a 25°C)	Presión de vapor (Pa a 25°C)
12	Diuron - CAS: 330-54-1	Chemical Book. 2020. "Chemical Search Engine." Base de Datos de Productos Químicos. Retrieved September 12, 2020 (https://www.chemicalbook.com/ProductIndex_EN.aspx).	Pence, H. E., & Williams, A. (2010). ChemSpider: an online chemical information resource. Mackay, D., Shiu, W. Y., & Lee, S. C. (2006). Handbook of physical-chemical properties and environmental fate for organic chemicals. CRC press.	Pence, H. E., & Williams, A. (2010). ChemSpider: an online chemical information resource. Mackay, D., Shiu, W. Y., & Lee, S. C. (2006). Handbook of physical-chemical properties and environmental fate for organic chemicals. CRC press.	Pence, H. E., & Williams, A. (2010). ChemSpider: an online chemical information resource. Mackay, D., Shiu, W. Y., & Lee, S. C. (2006). Handbook of physical-chemical properties and environmental fate for organic chemicals. CRC press.

Apéndice 41. Referencias bibliográficas de la matriz de datos de propiedades fisicoquímicas de herbicidas seleccionados (Continuación).

N°	NOMBRE	coeficiente de partición de octanol agua (Log KOW)	Ley de Henry (Pa·m ³ /mol at 25°C)	Factor de bioconcentraci ón (BCF)	Vida media (Días)
12	Diuron - CAS: 330-54-1	<p>Pence, H. E., & Williams, A. (2010). ChemSpider: an online chemical information resource.</p> <p>Mackay, D., Shiu, W. Y., & Lee, S. C. (2006). Handbook of physical-chemical properties and environmental fate for organic chemicals. CRC press.</p>	<p>Pence, H. E., & Williams, A. (2010). ChemSpider: an online chemical information resource.</p> <p>Mackay, D., Shiu, W. Y., & Lee, S. C. (2006). Handbook of physical-chemical properties and environmental fate for organic chemicals. CRC press.</p>	<p>Pence, H. E., & Williams, A. (2010). ChemSpider: an online chemical information resource.</p> <p>Mackay, D., Shiu, W. Y., & Lee, S. C. (2006). Handbook of physical-chemical properties and environmental fate for organic chemicals. CRC press.</p>	<p>Pence, H. E., & Williams, A. (2010). ChemSpider: an online chemical information resource.</p> <p>Mackay, D., Shiu, W. Y., & Lee, S. C. (2006). Handbook of physical-chemical properties and environmental fate for organic chemicals. CRC press.</p>

Apéndice 41. Referencias bibliográficas de la matriz de datos de propiedades fisicoquímicas de herbicidas seleccionados (Continuación).

N°	NOMBRE	Indice de Refracción	coeficiente de partición octanol aire (KOA)	Volatilización desde agua (atm-m ³ /mol)	Toxicología DL50 (mg/Kg) ORAL -RATAS - BIBLIOGRAFÍA
12	Diuron - CAS: 330-54-1	Pence, H. E., & Williams, A. (2010). ChemSpider: an online chemical information resource. Mackay, D., Shiu, W. Y., & Lee, S. C. (2006). Handbook of physical-chemical properties and environmental fate for organic chemicals. CRC press.	Pence, H. E., & Williams, A. (2010). ChemSpider: an online chemical information resource. Mackay, D., Shiu, W. Y., & Lee, S. C. (2006). Handbook of physical-chemical properties and environmental fate for organic chemicals. CRC press.	Pence, H. E., & Williams, A. (2010). ChemSpider: an online chemical information resource. Mackay, D., Shiu, W. Y., & Lee, S. C. (2006). Handbook of physical-chemical properties and environmental fate for organic chemicals. CRC press.	ChemIDplus, U. S. 2014. "National Library of Medicine."

Apéndice 41. Referencias bibliográficas de la matriz de datos de propiedades fisicoquímicas de herbicidas seleccionados (Continuación).

N°	NOMBRE	Categoría Toxicológica DL50 (mg/Kg) (SEGÚN RESOLUCIÓN 10834 DE 1992)	Categoría Toxicológica DL50 (mg/Kg) (SEGÚN RESOLUCIÓN 10834 DE 1992)	Categoría Toxicológica Mayor DL50 (mg/Kg) Oral Ratas - Presentación Comercial - (SEGÚN REGISTRO DEL ICA)	Categoría Toxicológica Mayor DL50 (mg/Kg) Oral Ratas - Presentación Comercial - (SEGÚN REGISTRO DEL ICA)
12	Diuron - CAS: 330- 54- 1	Ministerio de Salud de Colombia. (1992). RESOLUCIÓN 10834 DE 1992. Septiembre 07, 2020, de Ministerio de Salud de Colombia Sitio web: https://www.icbf.gov.co/cargues/avance/docs/resolucion_min_salud_10834_1992.htm	Ministerio de Salud de Colombia. (1992). RESOLUCIÓN 10834 DE 1992. Septiembre 07, 2020, de Ministerio de Salud de Colombia Sitio web: https://www.icbf.gov.co/cargues/avance/docs/resolucion_min_salud_10834_1992.htm	ICA. 2020. REGISTROS PLAGUICIDAS REGISTRADOS - 16 DE JULIO 2020. BOGOTA - COLOMBIA.	ICA. 2020. REGISTROS PLAGUICIDAS REGISTRADOS - 16 DE JULIO 2020. BOGOTA - COLOMBIA.

Apéndice 41. Referencias bibliográficas de la matriz de datos de propiedades fisicoquímicas de herbicidas seleccionados (Continuación).

N°	NOMBRE	GRUPO FUNCIONAL IUPAC	FAMILIA QUÍMICA, GRUPO TOXÓFORO	SELECTIVIDAD	MODO DE ACCIÓN	TIPO DE SIEMBRA
12	Diuron - CAS: 330-54-1	<p>Velasco, M. A., Y. Caballero Arroyo, and G. Quezad. 2006. Grupos Funcionales. Nomenclatura Y Reacciones Principales. Unam.</p> <p>Fernández, G. 2011. Nomenclatura En Química Orgánica. Germán Fernández.</p>	<p>Diez, P. (2013). Manejo de malezas problema: Modos de acción de herbicidas. Red de conocimiento en malezas resistentes. Rosario, Argentina.</p>	<p>de plaguicidas de Centroamérica, M. Consultado febrero del 2018.</p>	<p>Diez, P. (2013). Manejo de malezas problema: Modos de acción de herbicidas. Red de conocimiento en malezas resistentes. Rosario, Argentina.</p>	<p>Diez, P. (2013). Manejo de malezas problema: Modos de acción de herbicidas. Red de conocimiento en malezas resistentes. Rosario, Argentina.</p>

Apéndice 41. Referencias bibliográficas de la matriz de datos de propiedades fisicoquímicas de herbicidas seleccionados (Continuación).

N°	NOMBRE	ESTRUCTURA MOLECULAR	FORMULA MOLECULAR	MOMENTO DIPOLAR (Debye)	ENERGIA TOTAL (KCAL/MOL)
13	EPTC (S-etil dipropiltiocarbamato) - CAS: 759-94-4	Kim, S., Thiessen, P. A., Bolton, E. E., Chen, J., Fu, G., Gindulyte, A., Han, L., He, J., He, S., & Shoemaker, B. A. (2016). PubChem substance and compound databases. Nucleic Acids Research, 44(D1), D1202–D1213.	Kim, S., Thiessen, P. A., Bolton, E. E., Chen, J., Fu, G., Gindulyte, A., Han, L., He, J., He, S., & Shoemaker, B. A. (2016). PubChem substance and compound databases. Nucleic Acids Research, 44(D1), D1202–D1213.	Dennington, R., Keith, T., & Millam, J. (2009). GaussView, version 5 Gaussian09, R. A. (2009). 1, mj frisch, gw trucks, hb schlegel, ge scuseria, ma robb, jr cheeseman, g. Scalmani, v. Barone, b. Mennucci, ga petersson et al., gaussian. Inc., Wallingford CT, 121, 150-166.	Dennington, R., Keith, T., & Millam, J. (2009). GaussView, version 5 Gaussian09, R. A. (2009). 1, mj frisch, gw trucks, hb schlegel, ge scuseria, ma robb, jr cheeseman, g. Scalmani, v. Barone, b. Mennucci, ga petersson et al., gaussian. Inc., Wallingford CT, 121, 150-166.

Apéndice 41. Referencias bibliográficas de la matriz de datos de propiedades fisicoquímicas de herbicidas seleccionados (Continuación).

N°	NOMBRE	ENERGIA TERMICA (KCAL/MOL)	CAPACIDAD CALORIFICA (kcal/mol-K)	ENTROPIA (kcal/mol-K)	POLARIDAD α (C*m2/V)
13	EPTC (S-etil dipropiltiocarbam ato) - CAS: 759-94- 4	Dennington, R., Keith, T., & Millam, J. (2009). GaussView, version 5 Gaussian09, R. A. (2009). 1, mj frisch, gw trucks, hb schlegel, ge scuseria, ma robb, jr cheeseman, g. Scalmani, v. Barone, b. Mennucci, ga petersson et al., gaussian. Inc., Wallingford CT, 121, 150-166.	Dennington, R., Keith, T., & Millam, J. (2009). GaussView, version 5 Gaussian09, R. A. (2009). 1, mj frisch, gw trucks, hb schlegel, ge scuseria, ma robb, jr cheeseman, g. Scalmani, v. Barone, b. Mennucci, ga petersson et al., gaussian. Inc., Wallingford CT, 121, 150-166.	Dennington, R., Keith, T., & Millam, J. (2009). GaussView, version 5 Gaussian09, R. A. (2009). 1, mj frisch, gw trucks, hb schlegel, ge scuseria, ma robb, jr cheeseman, g. Scalmani, v. Barone, b. Mennucci, ga petersson et al., gaussian. Inc., Wallingford CT, 121, 150-166.	Dennington, R., Keith, T., & Millam, J. (2009). GaussView, version 5 Gaussian09, R. A. (2009). 1, mj frisch, gw trucks, hb schlegel, ge scuseria, ma robb, jr cheeseman, g. Scalmani, v. Barone, b. Mennucci, ga petersson et al., gaussian. Inc., Wallingford CT, 121, 150-166.

Apéndice 41. Referencias bibliográficas de la matriz de datos de propiedades fisicoquímicas de herbicidas seleccionados (Continuación).

N°	NOMBRE	PESO MOLECULAR (g/mol)	TEMPERATURA DE FUSION (K)	PUNTO DE EBULLICION NORMAL (K)	DENSIDAD A 298,15 K - (g/ml)
13	EPTC (S-etil dipropiltiocarbam ato) - CAS: 759-94- 4	Kim, S., Thiessen, P. A., Bolton, E. E., Chen, J., Fu, G., Gindulyte, A., Han, L., He, J., He, S., & Shoemaker, B. A. (2016). PubChem substance and compound databases. Nucleic Acids Research, 44(D1), D1202–D1213.	Santa Cruz Biotechnology. 2020. “Base de Datos.” Base de Datos - Productos Químicos. Retrieved September 12, 2020 (https://www.scbt.com/es/home).	Santa Cruz Biotechnology. 2020. “Base de Datos.” Base de Datos - Productos Químicos. Retrieved September 12, 2020 (https://www.scbt.com/es/home).	Santa Cruz Biotechnology. 2020. “Base de Datos.” Base de Datos - Productos Químicos. Retrieved September 12, 2020 (https://www.scbt.com/es/home).

Apéndice 41. Referencias bibliográficas de la matriz de datos de propiedades fisicoquímicas de herbicidas seleccionados (Continuación).

N°	NOMBRE	Constante de disociación pKa	Coeficiente de Adsorción de carbono orgánico (Log KOC):	Solubilidad en agua (mg/L a 25°C)	Presión de vapor (Pa a 25°C)
13	EPTC (S-etil dipropiltiocarbamato) - CAS: 759-94-4	Chemical Book. 2020. "Chemical Search Engine." Base de Datos de Productos Químicos. Retrieved September 12, 2020 (https://www.chemicalbook.com/ProductIndex_EN.aspx).	Pence, H. E., & Williams, A. (2010). ChemSpider: an online chemical information resource. Mackay, D., Shiu, W. Y., & Lee, S. C. (2006). Handbook of physical-chemical properties and environmental fate for organic chemicals. CRC press.	Pence, H. E., & Williams, A. (2010). ChemSpider: an online chemical information resource. Mackay, D., Shiu, W. Y., & Lee, S. C. (2006). Handbook of physical-chemical properties and environmental fate for organic chemicals. CRC press.	Pence, H. E., & Williams, A. (2010). ChemSpider: an online chemical information resource. Mackay, D., Shiu, W. Y., & Lee, S. C. (2006). Handbook of physical-chemical properties and environmental fate for organic chemicals. CRC press.

Apéndice 41. Referencias bibliográficas de la matriz de datos de propiedades fisicoquímicas de herbicidas seleccionados (Continuación).

N°	NOMBRE	coeficiente de partición de octanol agua (Log KOW)	Ley de Henry (Pa·m ³ /mol at 25°C)	Factor de bioconcentraci ón (BCF)	Vida media (Días)
13	EPTC (S-etil dipropiltiocarbam ato) - CAS: 759-94- 4	Pence, H. E., & Williams, A. (2010). ChemSpider: an online chemical information resource. Mackay, D., Shiu, W. Y., & Lee, S. C. (2006). Handbook of physical- chemical properties and environmental fate for organic chemicals. CRC press.	Pence, H. E., & Williams, A. (2010). ChemSpider: an online chemical information resource. Mackay, D., Shiu, W. Y., & Lee, S. C. (2006). Handbook of physical- chemical properties and environmental fate for organic chemicals. CRC press.	Pence, H. E., & Williams, A. (2010). ChemSpider: an online chemical information resource. Mackay, D., Shiu, W. Y., & Lee, S. C. (2006). Handbook of physical- chemical properties and environmental fate for organic chemicals. CRC press.	Pence, H. E., & Williams, A. (2010). ChemSpider: an online chemical information resource. Mackay, D., Shiu, W. Y., & Lee, S. C. (2006). Handbook of physical- chemical properties and environmental fate for organic chemicals. CRC press.

Apéndice 41. Referencias bibliográficas de la matriz de datos de propiedades fisicoquímicas de herbicidas seleccionados (Continuación).

N°	NOMBRE	Indice de Refracción	coeficiente de partición octanol aire (KOA)	Volatilización desde agua (atm-m ³ /mol)	Toxicología DL50 (mg/Kg) ORAL -RATAS - BIBLIOGRAFÍA
13	EPTC (S-etil dipropiltiocarbamato) - CAS: 759-94-4	Pence, H. E., & Williams, A. (2010). ChemSpider: an online chemical information resource. Mackay, D., Shiu, W. Y., & Lee, S. C. (2006). Handbook of physical-chemical properties and environmental fate for organic chemicals. CRC press.	Pence, H. E., & Williams, A. (2010). ChemSpider: an online chemical information resource. Mackay, D., Shiu, W. Y., & Lee, S. C. (2006). Handbook of physical-chemical properties and environmental fate for organic chemicals. CRC press.	Pence, H. E., & Williams, A. (2010). ChemSpider: an online chemical information resource. Mackay, D., Shiu, W. Y., & Lee, S. C. (2006). Handbook of physical-chemical properties and environmental fate for organic chemicals. CRC press.	ChemIDplus, U. S. 2014. "National Library of Medicine."

Apéndice 41. Referencias bibliográficas de la matriz de datos de propiedades fisicoquímicas de herbicidas seleccionados (Continuación).

N°	NOMBRE	Categoría Toxicológica DL50 (mg/Kg) (SEGÚN RESOLUCIÓN 10834 DE 1992)	Categoría Toxicológica DL50 (mg/Kg) (SEGÚN RESOLUCIÓN 10834 DE 1992)	Categoría Toxicológica Mayor DL50 (mg/Kg) Oral Ratas - Presentación Comercial - (SEGÚN REGISTRO DEL ICA)	Categoría Toxicológica Mayor DL50 (mg/Kg) Oral Ratas - Presentación Comercial - (SEGÚN REGISTRO DEL ICA)
13	EPTC (S-etil dipropiltiocarbamato) - CAS: 759-94-4	Ministerio de Salud de Colombia. (1992). RESOLUCIÓN 10834 DE 1992. Septiembre 07, 2020, de Ministerio de Salud de Colombia Sitio web: https://www.icbf.gov.co/cargues/avance/docs/resolucion_min_salud_10834_1992.htm	Ministerio de Salud de Colombia. (1992). RESOLUCIÓN 10834 DE 1992. Septiembre 07, 2020, de Ministerio de Salud de Colombia Sitio web: https://www.icbf.gov.co/cargues/avance/docs/resolucion_min_salud_10834_1992.htm	ICA. 2020. REGISTROS PLAGUICIDAS REGISTRADOS - 16 DE JULIO 2020. BOGOTA - COLOMBIA.	ICA. 2020. REGISTROS PLAGUICIDAS REGISTRADOS - 16 DE JULIO 2020. BOGOTA - COLOMBIA.

Apéndice 41. Referencias bibliográficas de la matriz de datos de propiedades fisicoquímicas de herbicidas seleccionados (Continuación).

N°	NOMBRE	GRUPO FUNCIONAL IUPAC	FAMILIA QUÍMICA, GRUPO TOXÓFORO	SELECTIVIDAD	MODO DE ACCIÓN	TIPO DE SIEMBRA
13	EPTC (S-etil dipropiltiocarbamato) - CAS: 759-94-4	<p>Velasco, M. A., Y. Caballero Arroyo, and G. Quezad. 2006. Grupos Funcionales. Nomenclatura Y Reacciones Principales. Unam.</p> <p>Fernández, G. 2011. Nomenclatura En Química Orgánica. Germán Fernández.</p>	<p>Diez, P. (2013). Manejo de malezas problema: Modos de acción de herbicidas. Red de conocimiento en malezas resistentes. Rosario, Argentina.</p>	<p>de plaguicidas de Centroamérica, M. Consultado febrero del 2018.</p>	<p>Diez, P. (2013). Manejo de malezas problema: Modos de acción de herbicidas. Red de conocimiento en malezas resistentes. Rosario, Argentina.</p>	<p>Diez, P. (2013). Manejo de malezas problema: Modos de acción de herbicidas. Red de conocimiento en malezas resistentes. Rosario, Argentina.</p>

Apéndice 41. Referencias bibliográficas de la matriz de datos de propiedades fisicoquímicas de herbicidas seleccionados (Continuación).

N°	NOMBRE	ESTRUCTURA MOLECULAR	FORMULA MOLECULAR	MOMENTO DIPOLAR (Debye)	ENERGIA TOTAL (KCAL/MOL)
14	Glifosato - CAS: 1071-83-6	Kim, S., Thiessen, P. A., Bolton, E. E., Chen, J., Fu, G., Gindulyte, A., Han, L., He, J., He, S., & Shoemaker, B. A. (2016). PubChem substance and compound databases. Nucleic Acids Research, 44(D1), D1202–D1213.	Kim, S., Thiessen, P. A., Bolton, E. E., Chen, J., Fu, G., Gindulyte, A., Han, L., He, J., He, S., & Shoemaker, B. A. (2016). PubChem substance and compound databases. Nucleic Acids Research, 44(D1), D1202–D1213.	Dennington, R., Keith, T., & Millam, J. (2009). GaussView, version 5 Gaussian09, R. A. (2009). 1, mj frisch, gw trucks, hb schlegel, ge scuseria, ma robb, jr cheeseman, g. Scalmani, v. Barone, b. Mennucci, ga petersson et al., gaussian. Inc., Wallingford CT, 121, 150-166.	Dennington, R., Keith, T., & Millam, J. (2009). GaussView, version 5 Gaussian09, R. A. (2009). 1, mj frisch, gw trucks, hb schlegel, ge scuseria, ma robb, jr cheeseman, g. Scalmani, v. Barone, b. Mennucci, ga petersson et al., gaussian. Inc., Wallingford CT, 121, 150-166.

Apéndice 41. Referencias bibliográficas de la matriz de datos de propiedades fisicoquímicas de herbicidas seleccionados (Continuación).

N°	NOMBRE	ENERGIA TERMICA (KCAL/MOL)	CAPACIDAD CALORIFICA (kcal/mol-K)	ENTROPIA (kcal/mol-K)	POLARIDAD α (C*m2/V)
14	Glifosato - CAS: 1071-83-6	Dennington, R., Keith, T., & Millam, J. (2009). GaussView, version 5 Gaussian09, R. A. (2009). 1, mj frisch, gw trucks, hb schlegel, ge scuseria, ma robb, jr cheeseman, g. Scalmani, v. Barone, b. Mennucci, ga petersson et al., gaussian. Inc., Wallingford CT, 121, 150-166.	Dennington, R., Keith, T., & Millam, J. (2009). GaussView, version 5 Gaussian09, R. A. (2009). 1, mj frisch, gw trucks, hb schlegel, ge scuseria, ma robb, jr cheeseman, g. Scalmani, v. Barone, b. Mennucci, ga petersson et al., gaussian. Inc., Wallingford CT, 121, 150-166.	Dennington, R., Keith, T., & Millam, J. (2009). GaussView, version 5 Gaussian09, R. A. (2009). 1, mj frisch, gw trucks, hb schlegel, ge scuseria, ma robb, jr cheeseman, g. Scalmani, v. Barone, b. Mennucci, ga petersson et al., gaussian. Inc., Wallingford CT, 121, 150-166.	Dennington, R., Keith, T., & Millam, J. (2009). GaussView, version 5 Gaussian09, R. A. (2009). 1, mj frisch, gw trucks, hb schlegel, ge scuseria, ma robb, jr cheeseman, g. Scalmani, v. Barone, b. Mennucci, ga petersson et al., gaussian. Inc., Wallingford CT, 121, 150-166.

Apéndice 41. Referencias bibliográficas de la matriz de datos de propiedades fisicoquímicas de herbicidas seleccionados (Continuación).

N°	NOMBRE	PESO MOLECULAR (g/mol)	TEMPERATURA DE FUSION (K)	PUNTO DE EBULLICION NORMAL (K)	DENSIDAD A 298,15 K - (g/ml)
14	Glifosato - CAS: 1071-83-6	Kim, S., Thiessen, P. A., Bolton, E. E., Chen, J., Fu, G., Gindulyte, A., Han, L., He, J., He, S., & Shoemaker, B. A. (2016). PubChem substance and compound databases. Nucleic Acids Research, 44(D1), D1202–D1213.	Kim, S., Thiessen, P. A., Bolton, E. E., Chen, J., Fu, G., Gindulyte, A., Han, L., He, J., He, S., & Shoemaker, B. A. (2016). PubChem substance and compound databases. Nucleic Acids Research, 44(D1), D1202–D1213.	Santa Cruz Biotechnology. 2020. "Base de Datos." Base de Datos - Productos Químicos. Retrieved September 12, 2020 (https://www.scbt.com/es/home).	Santa Cruz Biotechnology. 2020. "Base de Datos." Base de Datos - Productos Químicos. Retrieved September 12, 2020 (https://www.scbt.com/es/home).

Apéndice 41. Referencias bibliográficas de la matriz de datos de propiedades fisicoquímicas de herbicidas seleccionados (Continuación).

N°	NOMBRE	Constante de disociación pKa	Coeficiente de Adsorción de carbono orgánico (Log KOC):	Solubilidad en agua (mg/L a 25°C)	Presión de vapor (Pa a 25°C)
14	Glifosato - CAS: 1071-83-6	Chemical Book. 2020. "Chemical Search Engine." Base de Datos de Productos Químicos. Retrieved September 12, 2020 (https://www.chemicalbook.com/ProductIndex_EN.aspx).	Pence, H. E., & Williams, A. (2010). ChemSpider: an online chemical information resource. Mackay, D., Shiu, W. Y., & Lee, S. C. (2006). Handbook of physical-chemical properties and environmental fate for organic chemicals. CRC press.	Pence, H. E., & Williams, A. (2010). ChemSpider: an online chemical information resource. Mackay, D., Shiu, W. Y., & Lee, S. C. (2006). Handbook of physical-chemical properties and environmental fate for organic chemicals. CRC press.	Pence, H. E., & Williams, A. (2010). ChemSpider: an online chemical information resource. Mackay, D., Shiu, W. Y., & Lee, S. C. (2006). Handbook of physical-chemical properties and environmental fate for organic chemicals. CRC press.

Apéndice 41. Referencias bibliográficas de la matriz de datos de propiedades fisicoquímicas de herbicidas seleccionados (Continuación).

N°	NOMBRE	coeficiente de partición de octanol agua (Log KOW)	Ley de Henry (Pa·m ³ /mol at 25°C)	Factor de bioconcentraci ón (BCF)	Vida media (Días)
14	Glifosato - CAS: 1071-83-6	<p>Pence, H. E., & Williams, A. (2010). ChemSpider: an online chemical information resource.</p> <p>Mackay, D., Shiu, W. Y., & Lee, S. C. (2006). Handbook of physical-chemical properties and environmental fate for organic chemicals. CRC press.</p>	<p>Pence, H. E., & Williams, A. (2010). ChemSpider: an online chemical information resource.</p> <p>Mackay, D., Shiu, W. Y., & Lee, S. C. (2006). Handbook of physical-chemical properties and environmental fate for organic chemicals. CRC press.</p>	<p>Pence, H. E., & Williams, A. (2010). ChemSpider: an online chemical information resource.</p> <p>Mackay, D., Shiu, W. Y., & Lee, S. C. (2006). Handbook of physical-chemical properties and environmental fate for organic chemicals. CRC press.</p>	<p>Pence, H. E., & Williams, A. (2010). ChemSpider: an online chemical information resource.</p> <p>Mackay, D., Shiu, W. Y., & Lee, S. C. (2006). Handbook of physical-chemical properties and environmental fate for organic chemicals. CRC press.</p>

Apéndice 41. Referencias bibliográficas de la matriz de datos de propiedades fisicoquímicas de herbicidas seleccionados (Continuación).

N°	NOMBRE	Indice de Refracción	coeficiente de partición octanol aire (KOA)	Volatilización desde agua (atm-m ³ /mol)	Toxicología DL50 (mg/Kg) ORAL -RATAS - BIBLIOGRAFÍA
14	Glifosato - CAS: 1071-83-6	Pence, H. E., & Williams, A. (2010). ChemSpider: an online chemical information resource. Mackay, D., Shiu, W. Y., & Lee, S. C. (2006). Handbook of physical-chemical properties and environmental fate for organic chemicals. CRC press.	Pence, H. E., & Williams, A. (2010). ChemSpider: an online chemical information resource. Mackay, D., Shiu, W. Y., & Lee, S. C. (2006). Handbook of physical-chemical properties and environmental fate for organic chemicals. CRC press.	Pence, H. E., & Williams, A. (2010). ChemSpider: an online chemical information resource. Mackay, D., Shiu, W. Y., & Lee, S. C. (2006). Handbook of physical-chemical properties and environmental fate for organic chemicals. CRC press.	Ayres, D. C., & Hellier, D. G. (1997). Dictionary of environmentally important chemicals. CRC Press.

Apéndice 41. Referencias bibliográficas de la matriz de datos de propiedades fisicoquímicas de herbicidas seleccionados (Continuación).

N°	NOMBRE	Categoría Toxicológica DL50 (mg/Kg) (SEGÚN RESOLUCIÓN 10834 DE 1992)	Categoría Toxicológica DL50 (mg/Kg) (SEGÚN RESOLUCIÓN 10834 DE 1992)	Categoría Toxicológica Mayor DL50 (mg/Kg) Oral Ratas - Presentación Comercial - (SEGÚN REGISTRO DEL ICA)	Categoría Toxicológica Mayor DL50 (mg/Kg) Oral Ratas - Presentación Comercial - (SEGÚN REGISTRO DEL ICA)
14	Glifosato - CAS: 1071-83-6	Ministerio de Salud de Colombia. (1992). RESOLUCIÓN 10834 DE 1992. Septiembre 07, 2020, de Ministerio de Salud de Colombia Sitio web: https://www.icbf.gov.co/cargues/avance/docs/resolucion_min_salud_10834_1992.htm	Ministerio de Salud de Colombia. (1992). RESOLUCIÓN 10834 DE 1992. Septiembre 07, 2020, de Ministerio de Salud de Colombia Sitio web: https://www.icbf.gov.co/cargues/avance/docs/resolucion_min_salud_10834_1992.htm	ICA. 2020. REGISTROS PLAGUICIDAS REGISTRADOS - 16 DE JULIO 2020. BOGOTA - COLOMBIA.	ICA. 2020. REGISTROS PLAGUICIDAS REGISTRADOS - 16 DE JULIO 2020. BOGOTA - COLOMBIA.

Apéndice 41. Referencias bibliográficas de la matriz de datos de propiedades fisicoquímicas de herbicidas seleccionados (Continuación).

N°	NOMBRE	GRUPO FUNCIONAL IUPAC	FAMILIA QUÍMICA, GRUPO TOXÓFORO	SELECTIVIDAD	MODO DE ACCIÓN	TIPO DE SIEMBRA
14	Glifosato - CAS: 1071-83-6	<p>Velasco, M. A., Y. Caballero Arroyo, and G. Quezad. 2006. Grupos Funcionales. Nomenclatura Y Reacciones Principales. Unam.</p> <p>Fernández, G. 2011. Nomenclatura En Química Orgánica. Germán Fernández.</p>	<p>Diez, P. (2013). Manejo de malezas problema: Modos de acción de herbicidas. Red de conocimiento en malezas resistentes. Rosario, Argentina.</p>	<p>de plaguicidas de Centroamérica, M. Consultado febrero del 2018.</p>	<p>Diez, P. (2013). Manejo de malezas problema: Modos de acción de herbicidas. Red de conocimiento en malezas resistentes. Rosario, Argentina.</p>	<p>Diez, P. (2013). Manejo de malezas problema: Modos de acción de herbicidas. Red de conocimiento en malezas resistentes. Rosario, Argentina.</p>

Apéndice 41. Referencias bibliográficas de la matriz de datos de propiedades fisicoquímicas de herbicidas seleccionados (Continuación).

N°	NOMBRE	ESTRUCTURA MOLECULAR	FORMULA MOLECULAR	MOMENTO DIPOLAR (Debye)	ENERGIA TOTAL (KCAL/MOL)
15	Glufosinato - CAS: 53369-07-6	Kim, S., Thiessen, P. A., Bolton, E. E., Chen, J., Fu, G., Gindulyte, A., Han, L., He, J., He, S., & Shoemaker, B. A. (2016). PubChem substance and compound databases. Nucleic Acids Research, 44(D1), D1202–D1213.	Kim, S., Thiessen, P. A., Bolton, E. E., Chen, J., Fu, G., Gindulyte, A., Han, L., He, J., He, S., & Shoemaker, B. A. (2016). PubChem substance and compound databases. Nucleic Acids Research, 44(D1), D1202–D1213.	Dennington, R., Keith, T., & Millam, J. (2009). GaussView, version 5 Gaussian09, R. A. (2009). 1, mj frisch, gw trucks, hb schlegel, ge scuseria, ma robb, jr cheeseman, g. Scalmani, v. Barone, b. Mennucci, ga petersson et al., gaussian. Inc., Wallingford CT, 121, 150-166.	Dennington, R., Keith, T., & Millam, J. (2009). GaussView, version 5 Gaussian09, R. A. (2009). 1, mj frisch, gw trucks, hb schlegel, ge scuseria, ma robb, jr cheeseman, g. Scalmani, v. Barone, b. Mennucci, ga petersson et al., gaussian. Inc., Wallingford CT, 121, 150-166.

Apéndice 41. Referencias bibliográficas de la matriz de datos de propiedades fisicoquímicas de herbicidas seleccionados (Continuación).

N°	NOMBRE	ENERGIA TERMICA (KCAL/MOL)	CAPACIDAD CALORIFICA (kcal/mol-K)	ENTROPIA (kcal/mol-K)	POLARIDAD α (C*m2/V)
15	Glufosinato - CAS: 53369-07-6	Dennington, R., Keith, T., & Millam, J. (2009). GaussView, version 5 Gaussian09, R. A. (2009). 1, mj frisch, gw trucks, hb schlegel, ge scuseria, ma robb, jr cheeseman, g. Scalmani, v. Barone, b. Mennucci, ga petersson et al., gaussian. Inc., Wallingford CT, 121, 150-166.	Dennington, R., Keith, T., & Millam, J. (2009). GaussView, version 5 Gaussian09, R. A. (2009). 1, mj frisch, gw trucks, hb schlegel, ge scuseria, ma robb, jr cheeseman, g. Scalmani, v. Barone, b. Mennucci, ga petersson et al., gaussian. Inc., Wallingford CT, 121, 150-166.	Dennington, R., Keith, T., & Millam, J. (2009). GaussView, version 5 Gaussian09, R. A. (2009). 1, mj frisch, gw trucks, hb schlegel, ge scuseria, ma robb, jr cheeseman, g. Scalmani, v. Barone, b. Mennucci, ga petersson et al., gaussian. Inc., Wallingford CT, 121, 150-166.	Dennington, R., Keith, T., & Millam, J. (2009). GaussView, version 5 Gaussian09, R. A. (2009). 1, mj frisch, gw trucks, hb schlegel, ge scuseria, ma robb, jr cheeseman, g. Scalmani, v. Barone, b. Mennucci, ga petersson et al., gaussian. Inc., Wallingford CT, 121, 150-166.

Apéndice 41. Referencias bibliográficas de la matriz de datos de propiedades fisicoquímicas de herbicidas seleccionados (Continuación).

N°	NOMBRE	PESO MOLECULAR (g/mol)	TEMPERATURA DE FUSION (K)	PUNTO DE EBULLICION NORMAL (K)	DENSIDAD A 298,15 K - (g/ml)
15	Glufosinato - CAS: 53369-07-6	Kim, S., Thiessen, P. A., Bolton, E. E., Chen, J., Fu, G., Gindulyte, A., Han, L., He, J., He, S., & Shoemaker, B. A. (2016). PubChem substance and compound databases. Nucleic Acids Research, 44(D1), D1202–D1213.	Santa Cruz Biotechnology. 2020. "Base de Datos." Base de Datos - Productos Químicos. Retrieved September 12, 2020 (https://www.scbt.com/es/home).	Santa Cruz Biotechnology. 2020. "Base de Datos." Base de Datos - Productos Químicos. Retrieved September 12, 2020 (https://www.scbt.com/es/home).	Santa Cruz Biotechnology. 2020. "Base de Datos." Base de Datos - Productos Químicos. Retrieved September 12, 2020 (https://www.scbt.com/es/home).

Apéndice 41. Referencias bibliográficas de la matriz de datos de propiedades fisicoquímicas de herbicidas seleccionados (Continuación).

N°	NOMBRE	Constante de disociación pKa	Coeficiente de Adsorción de carbono orgánico (Log KOC):	Solubilidad en agua (mg/L a 25°C)	Presión de vapor (Pa a 25°C)
15	Glufosinato - CAS: 53369-07-6	Chemical Book. 2020. "Chemical Search Engine." Base de Datos de Productos Químicos. Retrieved September 12, 2020 (https://www.chemicalbook.com/ProductIndex_EN.aspx).	Pence, H. E., & Williams, A. (2010). ChemSpider: an online chemical information resource. Mackay, D., Shiu, W. Y., & Lee, S. C. (2006). Handbook of physical-chemical properties and environmental fate for organic chemicals. CRC press.	Pence, H. E., & Williams, A. (2010). ChemSpider: an online chemical information resource. Mackay, D., Shiu, W. Y., & Lee, S. C. (2006). Handbook of physical-chemical properties and environmental fate for organic chemicals. CRC press.	Pence, H. E., & Williams, A. (2010). ChemSpider: an online chemical information resource. Mackay, D., Shiu, W. Y., & Lee, S. C. (2006). Handbook of physical-chemical properties and environmental fate for organic chemicals. CRC press.

Apéndice 41. Referencias bibliográficas de la matriz de datos de propiedades fisicoquímicas de herbicidas seleccionados (Continuación).

N°	NOMBRE	coeficiente de partición de octanol agua (Log KOW)	Ley de Henry (Pa·m ³ /mol at 25°C)	Factor de bioconcentraci ón (BCF)	Vida media (Días)
15	Glufosinato - CAS: 53369-07-6	Pence, H. E., & Williams, A. (2010). ChemSpider: an online chemical information resource. Mackay, D., Shiu, W. Y., & Lee, S. C. (2006). Handbook of physical- chemical properties and environmental fate for organic chemicals. CRC press.	Pence, H. E., & Williams, A. (2010). ChemSpider: an online chemical information resource. Mackay, D., Shiu, W. Y., & Lee, S. C. (2006). Handbook of physical- chemical properties and environmental fate for organic chemicals. CRC press.	Pence, H. E., & Williams, A. (2010). ChemSpider: an online chemical information resource. Mackay, D., Shiu, W. Y., & Lee, S. C. (2006). Handbook of physical- chemical properties and environmental fate for organic chemicals. CRC press.	Pence, H. E., & Williams, A. (2010). ChemSpider: an online chemical information resource. Mackay, D., Shiu, W. Y., & Lee, S. C. (2006). Handbook of physical- chemical properties and environmental fate for organic chemicals. CRC press.

Apéndice 41. Referencias bibliográficas de la matriz de datos de propiedades fisicoquímicas de herbicidas seleccionados (Continuación).

N°	NOMBRE	Indice de Refracción	coeficiente de partición octanol aire (KOA)	Volatilización desde agua (atm-m ³ /mol)	Toxicología DL50 (mg/Kg) ORAL -RATAS - BIBLIOGRAFÍA
15	Glufosinato - CAS: 53369-07-6	Pence, H. E., & Williams, A. (2010). ChemSpider: an online chemical information resource. Mackay, D., Shiu, W. Y., & Lee, S. C. (2006). Handbook of physical-chemical properties and environmental fate for organic chemicals. CRC press.	Pence, H. E., & Williams, A. (2010). ChemSpider: an online chemical information resource. Mackay, D., Shiu, W. Y., & Lee, S. C. (2006). Handbook of physical-chemical properties and environmental fate for organic chemicals. CRC press.	Pence, H. E., & Williams, A. (2010). ChemSpider: an online chemical information resource. Mackay, D., Shiu, W. Y., & Lee, S. C. (2006). Handbook of physical-chemical properties and environmental fate for organic chemicals. CRC press.	de plaguicidas de Centroamérica, M. Consultado febrero del 2018.

Apéndice 41. Referencias bibliográficas de la matriz de datos de propiedades fisicoquímicas de herbicidas seleccionados (Continuación).

N°	NOMBRE	Categoría Toxicológica DL50 (mg/Kg) (SEGÚN RESOLUCIÓN 10834 DE 1992)	Categoría Toxicológica DL50 (mg/Kg) (SEGÚN RESOLUCIÓN 10834 DE 1992)	Categoría Toxicológica Mayor DL50 (mg/Kg) Oral Ratas - Presentación Comercial - (SEGÚN REGISTRO DEL ICA)	Categoría Toxicológica Mayor DL50 (mg/Kg) Oral Ratas - Presentación Comercial - (SEGÚN REGISTRO DEL ICA)
15	Glufosinato - CAS: 53369-07-6	Ministerio de Salud de Colombia. (1992). RESOLUCIÓN 10834 DE 1992. Septiembre 07, 2020, de Ministerio de Salud de Colombia Sitio web: https://www.icbf.gov.co/cargues/avance/docs/resolucion_min_salud_10834_1992.htm	Ministerio de Salud de Colombia. (1992). RESOLUCIÓN 10834 DE 1992. Septiembre 07, 2020, de Ministerio de Salud de Colombia Sitio web: https://www.icbf.gov.co/cargues/avance/docs/resolucion_min_salud_10834_1992.htm	ICA. 2020. REGISTROS PLAGUICIDAS REGISTRADOS - 16 DE JULIO 2020. BOGOTA - COLOMBIA.	ICA. 2020. REGISTROS PLAGUICIDAS REGISTRADOS - 16 DE JULIO 2020. BOGOTA - COLOMBIA.

Apéndice 41. Referencias bibliográficas de la matriz de datos de propiedades fisicoquímicas de herbicidas seleccionados (Continuación).

N°	NOMBRE	GRUPO FUNCIONAL IUPAC	FAMILIA QUÍMICA, GRUPO TOXÓFORO	SELECTIVIDAD	MODO DE ACCIÓN	TIPO DE SIEMBRA
15	Glufosinato - CAS: 53369-07-6	<p>Velasco, M. A., Y. Caballero Arroyo, and G. Quezad. 2006. Grupos Funcionales. Nomenclatura Y Reacciones Principales. Unam.</p> <p>Fernández, G. 2011. Nomenclatura En Química Orgánica. Germán Fernández.</p>	<p>Diez, P. (2013). Manejo de malezas problema: Modos de acción de herbicidas. Red de conocimiento en malezas resistentes. Rosario, Argentina.</p>	<p>de plaguicidas de Centroamérica, M. Consultado febrero del 2018.</p>	<p>Diez, P. (2013). Manejo de malezas problema: Modos de acción de herbicidas. Red de conocimiento en malezas resistentes. Rosario, Argentina.</p>	<p>Diez, P. (2013). Manejo de malezas problema: Modos de acción de herbicidas. Red de conocimiento en malezas resistentes. Rosario, Argentina.</p>

Apéndice 41. Referencias bibliográficas de la matriz de datos de propiedades fisicoquímicas de herbicidas seleccionados (Continuación).

N°	NOMBRE	ESTRUCTURA MOLECULAR	FORMULA MOLECULAR	MOMENTO DIPOLAR (Debye)	ENERGIA TOTAL (KCAL/MOL)
16	Imazetapir - CAS: 81335-77-5	Kim, S., Thiessen, P. A., Bolton, E. E., Chen, J., Fu, G., Gindulyte, A., Han, L., He, J., He, S., & Shoemaker, B. A. (2016). PubChem substance and compound databases. Nucleic Acids Research, 44(D1), D1202–D1213.	Kim, S., Thiessen, P. A., Bolton, E. E., Chen, J., Fu, G., Gindulyte, A., Han, L., He, J., He, S., & Shoemaker, B. A. (2016). PubChem substance and compound databases. Nucleic Acids Research, 44(D1), D1202–D1213.	Dennington, R., Keith, T., & Millam, J. (2009). GaussView, version 5 Gaussian09, R. A. (2009). 1, mj frisch, gw trucks, hb schlegel, ge scuseria, ma robb, jr cheeseman, g. Scalmani, v. Barone, b. Mennucci, ga petersson et al., gaussian. Inc., Wallingford CT, 121, 150-166.	Dennington, R., Keith, T., & Millam, J. (2009). GaussView, version 5 Gaussian09, R. A. (2009). 1, mj frisch, gw trucks, hb schlegel, ge scuseria, ma robb, jr cheeseman, g. Scalmani, v. Barone, b. Mennucci, ga petersson et al., gaussian. Inc., Wallingford CT, 121, 150-166.

Apéndice 41. Referencias bibliográficas de la matriz de datos de propiedades fisicoquímicas de herbicidas seleccionados (Continuación).

N°	NOMBRE	ENERGIA TERMICA (KCAL/MOL)	CAPACIDAD CALORIFICA (kcal/mol-K)	ENTROPIA (kcal/mol-K)	POLARIDAD α (C*m2/V)
16	Imazetapir - CAS: 81335-77-5	Dennington, R., Keith, T., & Millam, J. (2009). GaussView, version 5 Gaussian09, R. A. (2009). 1, mj frisch, gw trucks, hb schlegel, ge scuseria, ma robb, jr cheeseman, g. Scalmani, v. Barone, b. Mennucci, ga petersson et al., gaussian. Inc., Wallingford CT, 121, 150-166.	Dennington, R., Keith, T., & Millam, J. (2009). GaussView, version 5 Gaussian09, R. A. (2009). 1, mj frisch, gw trucks, hb schlegel, ge scuseria, ma robb, jr cheeseman, g. Scalmani, v. Barone, b. Mennucci, ga petersson et al., gaussian. Inc., Wallingford CT, 121, 150-166.	Dennington, R., Keith, T., & Millam, J. (2009). GaussView, version 5 Gaussian09, R. A. (2009). 1, mj frisch, gw trucks, hb schlegel, ge scuseria, ma robb, jr cheeseman, g. Scalmani, v. Barone, b. Mennucci, ga petersson et al., gaussian. Inc., Wallingford CT, 121, 150-166.	Dennington, R., Keith, T., & Millam, J. (2009). GaussView, version 5 Gaussian09, R. A. (2009). 1, mj frisch, gw trucks, hb schlegel, ge scuseria, ma robb, jr cheeseman, g. Scalmani, v. Barone, b. Mennucci, ga petersson et al., gaussian. Inc., Wallingford CT, 121, 150-166.

Apéndice 41. Referencias bibliográficas de la matriz de datos de propiedades fisicoquímicas de herbicidas seleccionados (Continuación).

N°	NOMBRE	PESO MOLECULAR (g/mol)	TEMPERATURA DE FUSION (K)	PUNTO DE EBULLICION NORMAL (K)	DENSIDAD A 298,15 K - (g/ml)
16	Imazetapir - CAS: 81335-77-5	Kim, S., Thiessen, P. A., Bolton, E. E., Chen, J., Fu, G., Gindulyte, A., Han, L., He, J., He, S., & Shoemaker, B. A. (2016). PubChem substance and compound databases. Nucleic Acids Research, 44(D1), D1202–D1213.	Santa Cruz Biotechnology. 2020. "Base de Datos." Base de Datos - Productos Químicos. Retrieved September 12, 2020 (https://www.scbt.com/es/home).	Kim, S., Thiessen, P. A., Bolton, E. E., Chen, J., Fu, G., Gindulyte, A., Han, L., He, J., He, S., & Shoemaker, B. A. (2016). PubChem substance and compound databases. Nucleic Acids Research, 44(D1), D1202–D1213.	Santa Cruz Biotechnology. 2020. "Base de Datos." Base de Datos - Productos Químicos. Retrieved September 12, 2020 (https://www.scbt.com/es/home).

Apéndice 41. Referencias bibliográficas de la matriz de datos de propiedades fisicoquímicas de herbicidas seleccionados (Continuación).

N°	NOMBRE	Constante de disociación pKa	Coeficiente de Adsorción de carbono orgánico (Log KOC):	Solubilidad en agua (mg/L a 25°C)	Presión de vapor (Pa a 25°C)
16	Imazetapir - CAS: 81335-77-5	Chemical Book. 2020. "Chemical Search Engine." Base de Datos de Productos Químicos. Retrieved September 12, 2020 (https://www.chemicalbook.com/ProductIndex_EN.aspx).	Pence, H. E., & Williams, A. (2010). ChemSpider: an online chemical information resource. Mackay, D., Shiu, W. Y., & Lee, S. C. (2006). Handbook of physical-chemical properties and environmental fate for organic chemicals. CRC press.	Pence, H. E., & Williams, A. (2010). ChemSpider: an online chemical information resource. Mackay, D., Shiu, W. Y., & Lee, S. C. (2006). Handbook of physical-chemical properties and environmental fate for organic chemicals. CRC press.	Pence, H. E., & Williams, A. (2010). ChemSpider: an online chemical information resource. Mackay, D., Shiu, W. Y., & Lee, S. C. (2006). Handbook of physical-chemical properties and environmental fate for organic chemicals. CRC press.

Apéndice 41. Referencias bibliográficas de la matriz de datos de propiedades fisicoquímicas de herbicidas seleccionados (Continuación).

N°	NOMBRE	coeficiente de partición de octanol agua (Log KOW)	Ley de Henry (Pa·m ³ /mol at 25°C)	Factor de bioconcentraci ón (BCF)	Vida media (Días)
16	Imazetapir - CAS: 81335-77-5	Pence, H. E., & Williams, A. (2010). ChemSpider: an online chemical information resource. Mackay, D., Shiu, W. Y., & Lee, S. C. (2006). Handbook of physical- chemical properties and environmental fate for organic chemicals. CRC press.	Pence, H. E., & Williams, A. (2010). ChemSpider: an online chemical information resource. Mackay, D., Shiu, W. Y., & Lee, S. C. (2006). Handbook of physical- chemical properties and environmental fate for organic chemicals. CRC press.	Pence, H. E., & Williams, A. (2010). ChemSpider: an online chemical information resource. Mackay, D., Shiu, W. Y., & Lee, S. C. (2006). Handbook of physical- chemical properties and environmental fate for organic chemicals. CRC press.	Pence, H. E., & Williams, A. (2010). ChemSpider: an online chemical information resource. Mackay, D., Shiu, W. Y., & Lee, S. C. (2006). Handbook of physical- chemical properties and environmental fate for organic chemicals. CRC press.

Apéndice 41. Referencias bibliográficas de la matriz de datos de propiedades fisicoquímicas de herbicidas seleccionados (Continuación).

N°	NOMBRE	Indice de Refracción	coeficiente de partición octanol aire (KOA)	Volatilización desde agua (atm-m ³ /mol)	Toxicología DL50 (mg/Kg) ORAL -RATAS - BIBLIOGRAFÍA
16	Imazetapir - CAS: 81335-77-5	Pence, H. E., & Williams, A. (2010). ChemSpider: an online chemical information resource. Mackay, D., Shiu, W. Y., & Lee, S. C. (2006). Handbook of physical-chemical properties and environmental fate for organic chemicals. CRC press.	Pence, H. E., & Williams, A. (2010). ChemSpider: an online chemical information resource. Mackay, D., Shiu, W. Y., & Lee, S. C. (2006). Handbook of physical-chemical properties and environmental fate for organic chemicals. CRC press.	Pence, H. E., & Williams, A. (2010). ChemSpider: an online chemical information resource. Mackay, D., Shiu, W. Y., & Lee, S. C. (2006). Handbook of physical-chemical properties and environmental fate for organic chemicals. CRC press.	ChemIDplus, U. S. 2014. "National Library of Medicine."

Apéndice 41. Referencias bibliográficas de la matriz de datos de propiedades fisicoquímicas de herbicidas seleccionados (Continuación).

N°	NOMBRE	Categoría Toxicológica DL50 (mg/Kg) (SEGÚN RESOLUCIÓN 10834 DE 1992)	Categoría Toxicológica DL50 (mg/Kg) (SEGÚN RESOLUCIÓN 10834 DE 1992)	Categoría Toxicológica Mayor DL50 (mg/Kg) Oral Ratas - Presentación Comercial - (SEGÚN REGISTRO DEL ICA)	Categoría Toxicológica Mayor DL50 (mg/Kg) Oral Ratas - Presentación Comercial - (SEGÚN REGISTRO DEL ICA)
16	Imazetapir - CAS: 81335-77-5	Ministerio de Salud de Colombia. (1992). RESOLUCIÓN 10834 DE 1992. Septiembre 07, 2020, de Ministerio de Salud de Colombia Sitio web: https://www.icbf.gov.co/cargues/avance/docs/resolucion_min_salud_10834_1992.htm	Ministerio de Salud de Colombia. (1992). RESOLUCIÓN 10834 DE 1992. Septiembre 07, 2020, de Ministerio de Salud de Colombia Sitio web: https://www.icbf.gov.co/cargues/avance/docs/resolucion_min_salud_10834_1992.htm	ICA. 2020. REGISTROS PLAGUICIDAS REGISTRADOS - 16 DE JULIO 2020. BOGOTA - COLOMBIA.	ICA. 2020. REGISTROS PLAGUICIDAS REGISTRADOS - 16 DE JULIO 2020. BOGOTA - COLOMBIA.

Apéndice 41. Referencias bibliográficas de la matriz de datos de propiedades fisicoquímicas de herbicidas seleccionados (Continuación).

N°	NOMBRE	GRUPO FUNCIONAL IUPAC	FAMILIA QUÍMICA, GRUPO TOXÓFORO	SELECTIVIDAD	MODO DE ACCIÓN	TIPO DE SIEMBRA
16	Imazetapir - CAS: 81335-77-5	<p>Velasco, M. A., Y. Caballero Arroyo, and G. Quezad. 2006. Grupos Funcionales. Nomenclatura Y Reacciones Principales. Unam.</p> <p>Fernández, G. 2011. Nomenclatura En Química Orgánica. Germán Fernández.</p>	<p>Diez, P. (2013). Manejo de malezas problema: Modos de acción de herbicidas. Red de conocimiento en malezas resistentes. Rosario, Argentina.</p>	<p>de plaguicidas de Centroamérica, M. Consultado febrero del 2018.</p>	<p>Diez, P. (2013). Manejo de malezas problema: Modos de acción de herbicidas. Red de conocimiento en malezas resistentes. Rosario, Argentina.</p>	<p>Diez, P. (2013). Manejo de malezas problema: Modos de acción de herbicidas. Red de conocimiento en malezas resistentes. Rosario, Argentina.</p>

Apéndice 41. Referencias bibliográficas de la matriz de datos de propiedades fisicoquímicas de herbicidas seleccionados (Continuación).

N°	NOMBRE	ESTRUCTURA MOLECULAR	FORMULA MOLECULAR	MOMENTO DIPOLAR (Debye)	ENERGIA TOTAL (KCAL/MOL)
17	Lenacil - CAS: 2164-08-1	Kim, S., Thiessen, P. A., Bolton, E. E., Chen, J., Fu, G., Gindulyte, A., Han, L., He, J., He, S., & Shoemaker, B. A. (2016). PubChem substance and compound databases. Nucleic Acids Research, 44(D1), D1202–D1213.	Kim, S., Thiessen, P. A., Bolton, E. E., Chen, J., Fu, G., Gindulyte, A., Han, L., He, J., He, S., & Shoemaker, B. A. (2016). PubChem substance and compound databases. Nucleic Acids Research, 44(D1), D1202–D1213.	Dennington, R., Keith, T., & Millam, J. (2009). GaussView, version 5 Gaussian09, R. A. (2009). 1, mj frisch, gw trucks, hb schlegel, ge scuseria, ma robb, jr cheeseman, g. Scalmani, v. Barone, b. Mennucci, ga petersson et al., gaussian. Inc., Wallingford CT, 121, 150-166.	Dennington, R., Keith, T., & Millam, J. (2009). GaussView, version 5 Gaussian09, R. A. (2009). 1, mj frisch, gw trucks, hb schlegel, ge scuseria, ma robb, jr cheeseman, g. Scalmani, v. Barone, b. Mennucci, ga petersson et al., gaussian. Inc., Wallingford CT, 121, 150-166.

Apéndice 41. Referencias bibliográficas de la matriz de datos de propiedades fisicoquímicas de herbicidas seleccionados (Continuación).

N°	NOMBRE	ENERGIA TERMICA (KCAL/MOL)	CAPACIDAD CALORIFICA (kcal/mol-K)	ENTROPIA (kcal/mol-K)	POLARIDAD α (C*m2/V)
17	Lenacil - CAS: 2164-08-1	Dennington, R., Keith, T., & Millam, J. (2009). GaussView, version 5 Gaussian09, R. A. (2009). 1, mj frisch, gw trucks, hb schlegel, ge scuseria, ma robb, jr cheeseman, g. Scalmani, v. Barone, b. Mennucci, ga petersson et al., gaussian. Inc., Wallingford CT, 121, 150-166.	Dennington, R., Keith, T., & Millam, J. (2009). GaussView, version 5 Gaussian09, R. A. (2009). 1, mj frisch, gw trucks, hb schlegel, ge scuseria, ma robb, jr cheeseman, g. Scalmani, v. Barone, b. Mennucci, ga petersson et al., gaussian. Inc., Wallingford CT, 121, 150-166.	Dennington, R., Keith, T., & Millam, J. (2009). GaussView, version 5 Gaussian09, R. A. (2009). 1, mj frisch, gw trucks, hb schlegel, ge scuseria, ma robb, jr cheeseman, g. Scalmani, v. Barone, b. Mennucci, ga petersson et al., gaussian. Inc., Wallingford CT, 121, 150-166.	Dennington, R., Keith, T., & Millam, J. (2009). GaussView, version 5 Gaussian09, R. A. (2009). 1, mj frisch, gw trucks, hb schlegel, ge scuseria, ma robb, jr cheeseman, g. Scalmani, v. Barone, b. Mennucci, ga petersson et al., gaussian. Inc., Wallingford CT, 121, 150-166.

Apéndice 41. Referencias bibliográficas de la matriz de datos de propiedades fisicoquímicas de herbicidas seleccionados (Continuación).

N°	NOMBRE	PESO MOLECULAR (g/mol)	TEMPERATURA DE FUSION (K)	PUNTO DE EBULLICION NORMAL (K)	DENSIDAD A 298,15 K - (g/ml)
17	Lenacil - CAS: 2164-08-1	Kim, S., Thiessen, P. A., Bolton, E. E., Chen, J., Fu, G., Gindulyte, A., Han, L., He, J., He, S., & Shoemaker, B. A. (2016). PubChem substance and compound databases. Nucleic Acids Research, 44(D1), D1202–D1213.	Chemical Book. 2020. "Chemical Search Engine." Base de Datos de Productos Químicos. Retrieved September 12, 2020 (https://www.chemicalbook.com/ProductIndex_EN.aspx).	Chemical Book. 2020. "Chemical Search Engine." Base de Datos de Productos Químicos. Retrieved September 12, 2020 (https://www.chemicalbook.com/ProductIndex_EN.aspx).	Chemical Book. 2020. "Chemical Search Engine." Base de Datos de Productos Químicos. Retrieved September 12, 2020 (https://www.chemicalbook.com/ProductIndex_EN.aspx).

Apéndice 41. Referencias bibliográficas de la matriz de datos de propiedades fisicoquímicas de herbicidas seleccionados (Continuación).

N°	NOMBRE	Constante de disociación pKa	Coeficiente de Adsorción de carbono orgánico (Log KOC):	Solubilidad en agua (mg/L a 25°C)	Presión de vapor (Pa a 25°C)
17	Lenacil - CAS: 2164-08-1	Chemical Book. 2020. "Chemical Search Engine." Base de Datos de Productos Químicos. Retrieved September 12, 2020 (https://www.chemicalbook.com/ProductIndex_EN.aspx).	Pence, H. E., & Williams, A. (2010). ChemSpider: an online chemical information resource. Mackay, D., Shiu, W. Y., & Lee, S. C. (2006). Handbook of physical-chemical properties and environmental fate for organic chemicals. CRC press.	Pence, H. E., & Williams, A. (2010). ChemSpider: an online chemical information resource. Mackay, D., Shiu, W. Y., & Lee, S. C. (2006). Handbook of physical-chemical properties and environmental fate for organic chemicals. CRC press.	Pence, H. E., & Williams, A. (2010). ChemSpider: an online chemical information resource. Mackay, D., Shiu, W. Y., & Lee, S. C. (2006). Handbook of physical-chemical properties and environmental fate for organic chemicals. CRC press.

Apéndice 41. Referencias bibliográficas de la matriz de datos de propiedades fisicoquímicas de herbicidas seleccionados (Continuación).

N°	NOMBRE	coeficiente de partición de octanol agua (Log KOW)	Ley de Henry (Pa·m ³ /mol at 25°C)	Factor de bioconcentraci ón (BCF)	Vida media (Días)
17	Lenacil - CAS: 2164-08-1	<p>Pence, H. E., & Williams, A. (2010). ChemSpider: an online chemical information resource.</p> <p>Mackay, D., Shiu, W. Y., & Lee, S. C. (2006). Handbook of physical-chemical properties and environmental fate for organic chemicals. CRC press.</p>	<p>Pence, H. E., & Williams, A. (2010). ChemSpider: an online chemical information resource.</p> <p>Mackay, D., Shiu, W. Y., & Lee, S. C. (2006). Handbook of physical-chemical properties and environmental fate for organic chemicals. CRC press.</p>	<p>Pence, H. E., & Williams, A. (2010). ChemSpider: an online chemical information resource.</p> <p>Mackay, D., Shiu, W. Y., & Lee, S. C. (2006). Handbook of physical-chemical properties and environmental fate for organic chemicals. CRC press.</p>	<p>Pence, H. E., & Williams, A. (2010). ChemSpider: an online chemical information resource.</p> <p>Mackay, D., Shiu, W. Y., & Lee, S. C. (2006). Handbook of physical-chemical properties and environmental fate for organic chemicals. CRC press.</p>

Apéndice 41. Referencias bibliográficas de la matriz de datos de propiedades fisicoquímicas de herbicidas seleccionados (Continuación).

N°	NOMBRE	Indice de Refracción	coeficiente de partición octanol aire (KOA)	Volatilización desde agua (atm-m ³ /mol)	Toxicología DL50 (mg/Kg) ORAL -RATAS - BIBLIOGRAFÍA
17	Lenacil - CAS: 2164-08-1	Pence, H. E., & Williams, A. (2010). ChemSpider: an online chemical information resource. Mackay, D., Shiu, W. Y., & Lee, S. C. (2006). Handbook of physical-chemical properties and environmental fate for organic chemicals. CRC press.	Pence, H. E., & Williams, A. (2010). ChemSpider: an online chemical information resource. Mackay, D., Shiu, W. Y., & Lee, S. C. (2006). Handbook of physical-chemical properties and environmental fate for organic chemicals. CRC press.	Pence, H. E., & Williams, A. (2010). ChemSpider: an online chemical information resource. Mackay, D., Shiu, W. Y., & Lee, S. C. (2006). Handbook of physical-chemical properties and environmental fate for organic chemicals. CRC press.	ChemIDplus, U. S. 2014. "National Library of Medicine."

Apéndice 41. Referencias bibliográficas de la matriz de datos de propiedades fisicoquímicas de herbicidas seleccionados (Continuación).

N°	NOMBRE	Categoría Toxicológica DL50 (mg/Kg) (SEGÚN RESOLUCIÓN 10834 DE 1992)	Categoría Toxicológica DL50 (mg/Kg) (SEGÚN RESOLUCIÓN 10834 DE 1992)	Categoría Toxicológica Mayor DL50 (mg/Kg) Oral Ratas - Presentación Comercial - (SEGÚN REGISTRO DEL ICA)	Categoría Toxicológica Mayor DL50 (mg/Kg) Oral Ratas - Presentación Comercial - (SEGÚN REGISTRO DEL ICA)
17	Lenacil - CAS: 2164-08-1	Ministerio de Salud de Colombia. (1992). RESOLUCIÓN 10834 DE 1992. Septiembre 07, 2020, de Ministerio de Salud de Colombia Sitio web: https://www.icbf.gov.co/cargues/avance/docs/resolucion_min_salud_10834_1992.htm	Ministerio de Salud de Colombia. (1992). RESOLUCIÓN 10834 DE 1992. Septiembre 07, 2020, de Ministerio de Salud de Colombia Sitio web: https://www.icbf.gov.co/cargues/avance/docs/resolucion_min_salud_10834_1992.htm	ICA. 2020. REGISTROS PLAGUICIDAS REGISTRADOS - 16 DE JULIO 2020. BOGOTA - COLOMBIA.	ICA. 2020. REGISTROS PLAGUICIDAS REGISTRADOS - 16 DE JULIO 2020. BOGOTA - COLOMBIA.

Apéndice 41. Referencias bibliográficas de la matriz de datos de propiedades fisicoquímicas de herbicidas seleccionados (Continuación).

N°	NOMBRE	GRUPO FUNCIONAL IUPAC	FAMILIA QUÍMICA, GRUPO TOXÓFORO	SELECTIVIDAD	MODO DE ACCIÓN	TIPO DE SIEMBRA
17	Lenacil - CAS: 2164-08-1	<p>Velasco, M. A., Y. Caballero Arroyo, and G. Quezad. 2006. Grupos Funcionales. Nomenclatura Y Reacciones Principales. Unam.</p> <p>Fernández, G. 2011. Nomenclatura En Química Orgánica. Germán Fernández.</p>	<p>Diez, P. (2013). Manejo de malezas problema: Modos de acción de herbicidas. Red de conocimiento en malezas resistentes. Rosario, Argentina.</p>	<p>de plaguicidas de Centroamérica, M. Consultado febrero del 2018.</p>	<p>Diez, P. (2013). Manejo de malezas problema: Modos de acción de herbicidas. Red de conocimiento en malezas resistentes. Rosario, Argentina.</p>	<p>Diez, P. (2013). Manejo de malezas problema: Modos de acción de herbicidas. Red de conocimiento en malezas resistentes. Rosario, Argentina.</p>

Apéndice 41. Referencias bibliográficas de la matriz de datos de propiedades fisicoquímicas de herbicidas seleccionados (Continuación).

N°	NOMBRE	ESTRUCTURA MOLECULAR	FORMULA MOLECULAR	MOMENTO DIPOLAR (Debye)	ENERGIA TOTAL (KCAL/MOL)
18	Metribuzina - CAS: 21087-64-9	Kim, S., Thiessen, P. A., Bolton, E. E., Chen, J., Fu, G., Gindulyte, A., Han, L., He, J., He, S., & Shoemaker, B. A. (2016). PubChem substance and compound databases. Nucleic Acids Research, 44(D1), D1202–D1213.	Kim, S., Thiessen, P. A., Bolton, E. E., Chen, J., Fu, G., Gindulyte, A., Han, L., He, J., He, S., & Shoemaker, B. A. (2016). PubChem substance and compound databases. Nucleic Acids Research, 44(D1), D1202–D1213.	Dennington, R., Keith, T., & Millam, J. (2009). GaussView, version 5 Gaussian09, R. A. (2009). 1, mj frisch, gw trucks, hb schlegel, ge scuseria, ma robb, jr cheeseman, g. Scalmani, v. Barone, b. Mennucci, ga petersson et al., gaussian. Inc., Wallingford CT, 121, 150-166.	Dennington, R., Keith, T., & Millam, J. (2009). GaussView, version 5 Gaussian09, R. A. (2009). 1, mj frisch, gw trucks, hb schlegel, ge scuseria, ma robb, jr cheeseman, g. Scalmani, v. Barone, b. Mennucci, ga petersson et al., gaussian. Inc., Wallingford CT, 121, 150-166.

Apéndice 41. Referencias bibliográficas de la matriz de datos de propiedades fisicoquímicas de herbicidas seleccionados (Continuación).

N°	NOMBRE	ENERGIA TERMICA (KCAL/MOL)	CAPACIDAD CALORIFICA (kcal/mol-K)	ENTROPIA (kcal/mol-K)	POLARIDAD α (C*m2/V)
18	Metribuzina - CAS: 21087-64-9	Dennington, R., Keith, T., & Millam, J. (2009). GaussView, version 5 Gaussian09, R. A. (2009). 1, mj frisch, gw trucks, hb schlegel, ge scuseria, ma robb, jr cheeseman, g. Scalmani, v. Barone, b. Mennucci, ga petersson et al., gaussian. Inc., Wallingford CT, 121, 150-166.	Dennington, R., Keith, T., & Millam, J. (2009). GaussView, version 5 Gaussian09, R. A. (2009). 1, mj frisch, gw trucks, hb schlegel, ge scuseria, ma robb, jr cheeseman, g. Scalmani, v. Barone, b. Mennucci, ga petersson et al., gaussian. Inc., Wallingford CT, 121, 150-166.	Dennington, R., Keith, T., & Millam, J. (2009). GaussView, version 5 Gaussian09, R. A. (2009). 1, mj frisch, gw trucks, hb schlegel, ge scuseria, ma robb, jr cheeseman, g. Scalmani, v. Barone, b. Mennucci, ga petersson et al., gaussian. Inc., Wallingford CT, 121, 150-166.	Dennington, R., Keith, T., & Millam, J. (2009). GaussView, version 5 Gaussian09, R. A. (2009). 1, mj frisch, gw trucks, hb schlegel, ge scuseria, ma robb, jr cheeseman, g. Scalmani, v. Barone, b. Mennucci, ga petersson et al., gaussian. Inc., Wallingford CT, 121, 150-166.

Apéndice 41. Referencias bibliográficas de la matriz de datos de propiedades fisicoquímicas de herbicidas seleccionados (Continuación).

N°	NOMBRE	PESO MOLECULAR (g/mol)	TEMPERATURA DE FUSION (K)	PUNTO DE EBULLICION NORMAL (K)	DENSIDAD A 298,15 K - (g/ml)
18	Metribuzina - CAS: 21087-64-9	Kim, S., Thiessen, P. A., Bolton, E. E., Chen, J., Fu, G., Gindulyte, A., Han, L., He, J., He, S., & Shoemaker, B. A. (2016). PubChem substance and compound databases. Nucleic Acids Research, 44(D1), D1202–D1213.	Chemical Book. 2020. "Chemical Search Engine." Base de Datos de Productos Químicos. Retrieved September 12, 2020 (https://www.chemicalbook.com/ProductIndex_EN.aspx).	Chemical Book. 2020. "Chemical Search Engine." Base de Datos de Productos Químicos. Retrieved September 12, 2020 (https://www.chemicalbook.com/ProductIndex_EN.aspx).	Chemical Book. 2020. "Chemical Search Engine." Base de Datos de Productos Químicos. Retrieved September 12, 2020 (https://www.chemicalbook.com/ProductIndex_EN.aspx).

Apéndice 41. Referencias bibliográficas de la matriz de datos de propiedades fisicoquímicas de herbicidas seleccionados (Continuación).

N°	NOMBRE	Constante de disociación pKa	Coeficiente de Adsorción de carbono orgánico (Log KOC):	Solubilidad en agua (mg/L a 25°C)	Presión de vapor (Pa a 25°C)
18	Metribuzina - CAS: 21087-64-9	Chemical Book. 2020. "Chemical Search Engine." Base de Datos de Productos Químicos. Retrieved September 12, 2020 (https://www.chemicalbook.com/ProductIndex_EN.aspx).	Pence, H. E., & Williams, A. (2010). ChemSpider: an online chemical information resource. Mackay, D., Shiu, W. Y., & Lee, S. C. (2006). Handbook of physical-chemical properties and environmental fate for organic chemicals. CRC press.	Pence, H. E., & Williams, A. (2010). ChemSpider: an online chemical information resource. Mackay, D., Shiu, W. Y., & Lee, S. C. (2006). Handbook of physical-chemical properties and environmental fate for organic chemicals. CRC press.	Pence, H. E., & Williams, A. (2010). ChemSpider: an online chemical information resource. Mackay, D., Shiu, W. Y., & Lee, S. C. (2006). Handbook of physical-chemical properties and environmental fate for organic chemicals. CRC press.

Apéndice 41. Referencias bibliográficas de la matriz de datos de propiedades fisicoquímicas de herbicidas seleccionados (Continuación).

N°	NOMBRE	coeficiente de partición de octanol agua (Log KOW)	Ley de Henry (Pa·m ³ /mol at 25°C)	Factor de bioconcentraci ón (BCF)	Vida media (Días)
18	Metribuzina - CAS: 21087-64-9	Pence, H. E., & Williams, A. (2010). ChemSpider: an online chemical information resource. Mackay, D., Shiu, W. Y., & Lee, S. C. (2006). Handbook of physical- chemical properties and environmental fate for organic chemicals. CRC press.	Pence, H. E., & Williams, A. (2010). ChemSpider: an online chemical information resource. Mackay, D., Shiu, W. Y., & Lee, S. C. (2006). Handbook of physical- chemical properties and environmental fate for organic chemicals. CRC press.	Pence, H. E., & Williams, A. (2010). ChemSpider: an online chemical information resource. Mackay, D., Shiu, W. Y., & Lee, S. C. (2006). Handbook of physical- chemical properties and environmental fate for organic chemicals. CRC press.	Pence, H. E., & Williams, A. (2010). ChemSpider: an online chemical information resource. Mackay, D., Shiu, W. Y., & Lee, S. C. (2006). Handbook of physical- chemical properties and environmental fate for organic chemicals. CRC press.

Apéndice 41. Referencias bibliográficas de la matriz de datos de propiedades fisicoquímicas de herbicidas seleccionados (Continuación).

N°	NOMBRE	Indice de Refracción	coeficiente de partición octanol aire (KOA)	Volatilización desde agua (atm-m ³ /mol)	Toxicología DL50 (mg/Kg) ORAL -RATAS - BIBLIOGRAFÍA
18	Metribuzina - CAS: 21087-64-9	Pence, H. E., & Williams, A. (2010). ChemSpider: an online chemical information resource. Mackay, D., Shiu, W. Y., & Lee, S. C. (2006). Handbook of physical-chemical properties and environmental fate for organic chemicals. CRC press.	Pence, H. E., & Williams, A. (2010). ChemSpider: an online chemical information resource. Mackay, D., Shiu, W. Y., & Lee, S. C. (2006). Handbook of physical-chemical properties and environmental fate for organic chemicals. CRC press.	Pence, H. E., & Williams, A. (2010). ChemSpider: an online chemical information resource. Mackay, D., Shiu, W. Y., & Lee, S. C. (2006). Handbook of physical-chemical properties and environmental fate for organic chemicals. CRC press.	ChemIDplus, U. S. 2014. "National Library of Medicine."

Apéndice 41. Referencias bibliográficas de la matriz de datos de propiedades fisicoquímicas de herbicidas seleccionados (Continuación).

N°	NOMBRE	Categoría Toxicológica DL50 (mg/Kg) (SEGÚN RESOLUCIÓN 10834 DE 1992)	Categoría Toxicológica DL50 (mg/Kg) (SEGÚN RESOLUCIÓN 10834 DE 1992)	Categoría Toxicológica Mayor DL50 (mg/Kg) Oral Ratas - Presentación Comercial - (SEGÚN REGISTRO DEL ICA)	Categoría Toxicológica Mayor DL50 (mg/Kg) Oral Ratas - Presentación Comercial - (SEGÚN REGISTRO DEL ICA)
18	Metribuzina - CAS: 21087-64-9	Ministerio de Salud de Colombia. (1992). RESOLUCIÓN 10834 DE 1992. Septiembre 07, 2020, de Ministerio de Salud de Colombia Sitio web: https://www.icbf.gov.co/cargues/avance/docs/resolucion_min_salud_10834_1992.htm	Ministerio de Salud de Colombia. (1992). RESOLUCIÓN 10834 DE 1992. Septiembre 07, 2020, de Ministerio de Salud de Colombia Sitio web: https://www.icbf.gov.co/cargues/avance/docs/resolucion_min_salud_10834_1992.htm	ICA. 2020. REGISTROS PLAGUICIDAS REGISTRADOS - 16 DE JULIO 2020. BOGOTA - COLOMBIA.	ICA. 2020. REGISTROS PLAGUICIDAS REGISTRADOS - 16 DE JULIO 2020. BOGOTA - COLOMBIA.

Apéndice 41. Referencias bibliográficas de la matriz de datos de propiedades fisicoquímicas de herbicidas seleccionados (Continuación).

N°	NOMBRE	GRUPO FUNCIONAL IUPAC	FAMILIA QUÍMICA, GRUPO TOXÓFORO	SELECTIVIDAD	MODO DE ACCIÓN	TIPO DE SIEMBRA
18	Metribuzina - CAS: 21087-64-9	<p>Velasco, M. A., Y. Caballero Arroyo, and G. Quezad. 2006. Grupos Funcionales. Nomenclatura Y Reacciones Principales. Unam.</p> <p>Fernández, G. 2011. Nomenclatura En Química Orgánica. Germán Fernández.</p>	<p>Diez, P. (2013). Manejo de malezas problema: Modos de acción de herbicidas. Red de conocimiento en malezas resistentes. Rosario, Argentina.</p>	<p>de plaguicidas de Centroamérica, M. Consultado febrero del 2018.</p>	<p>Diez, P. (2013). Manejo de malezas problema: Modos de acción de herbicidas. Red de conocimiento en malezas resistentes. Rosario, Argentina.</p>	<p>Diez, P. (2013). Manejo de malezas problema: Modos de acción de herbicidas. Red de conocimiento en malezas resistentes. Rosario, Argentina.</p>

Apéndice 41. Referencias bibliográficas de la matriz de datos de propiedades fisicoquímicas de herbicidas seleccionados (Continuación).

N°	NOMBRE	ESTRUCTURA MOLECULAR	FORMULA MOLECULAR	MOMENTO DIPOLAR (Debye)	ENERGIA TOTAL (KCAL/MOL)
19	Metsulfuron (Metsulfuron metil) - CAS: 74223-64-6	Kim, S., Thiessen, P. A., Bolton, E. E., Chen, J., Fu, G., Gindulyte, A., Han, L., He, J., He, S., & Shoemaker, B. A. (2016). PubChem substance and compound databases. Nucleic Acids Research, 44(D1), D1202–D1213.	Kim, S., Thiessen, P. A., Bolton, E. E., Chen, J., Fu, G., Gindulyte, A., Han, L., He, J., He, S., & Shoemaker, B. A. (2016). PubChem substance and compound databases. Nucleic Acids Research, 44(D1), D1202–D1213.	Dennington, R., Keith, T., & Millam, J. (2009). GaussView, version 5 Gaussian09, R. A. (2009). 1, mj frisch, gw trucks, hb schlegel, ge scuseria, ma robb, jr cheeseman, g. Scalmani, v. Barone, b. Mennucci, ga petersson et al., gaussian. Inc., Wallingford CT, 121, 150-166.	Dennington, R., Keith, T., & Millam, J. (2009). GaussView, version 5 Gaussian09, R. A. (2009). 1, mj frisch, gw trucks, hb schlegel, ge scuseria, ma robb, jr cheeseman, g. Scalmani, v. Barone, b. Mennucci, ga petersson et al., gaussian. Inc., Wallingford CT, 121, 150-166.

Apéndice 41. Referencias bibliográficas de la matriz de datos de propiedades fisicoquímicas de herbicidas seleccionados (Continuación).

N°	NOMBRE	ENERGIA TERMICA (KCAL/MOL)	CAPACIDAD CALORIFICA (kcal/mol-K)	ENTROPIA (kcal/mol-K)	POLARIDAD α (C*m2/V)
19	Metsulfuron (Metsulfuron metil) - CAS: 74223-64-6	Dennington, R., Keith, T., & Millam, J. (2009). GaussView, version 5 Gaussian09, R. A. (2009). 1, mj frisch, gw trucks, hb schlegel, ge scuseria, ma robb, jr cheeseman, g. Scalmani, v. Barone, b. Mennucci, ga petersson et al., gaussian. Inc., Wallingford CT, 121, 150-166.	Dennington, R., Keith, T., & Millam, J. (2009). GaussView, version 5 Gaussian09, R. A. (2009). 1, mj frisch, gw trucks, hb schlegel, ge scuseria, ma robb, jr cheeseman, g. Scalmani, v. Barone, b. Mennucci, ga petersson et al., gaussian. Inc., Wallingford CT, 121, 150-166.	Dennington, R., Keith, T., & Millam, J. (2009). GaussView, version 5 Gaussian09, R. A. (2009). 1, mj frisch, gw trucks, hb schlegel, ge scuseria, ma robb, jr cheeseman, g. Scalmani, v. Barone, b. Mennucci, ga petersson et al., gaussian. Inc., Wallingford CT, 121, 150-166.	Dennington, R., Keith, T., & Millam, J. (2009). GaussView, version 5 Gaussian09, R. A. (2009). 1, mj frisch, gw trucks, hb schlegel, ge scuseria, ma robb, jr cheeseman, g. Scalmani, v. Barone, b. Mennucci, ga petersson et al., gaussian. Inc., Wallingford CT, 121, 150-166.

Apéndice 41. Referencias bibliográficas de la matriz de datos de propiedades fisicoquímicas de herbicidas seleccionados (Continuación).

N°	NOMBRE	PESO MOLECULAR (g/mol)	TEMPERATURA DE FUSION (K)	PUNTO DE EBULLICION NORMAL (K)	DENSIDAD A 298,15 K - (g/ml)
19	Metsulfuron (Metsulfuron metil) - CAS: 74223-64-6	Kim, S., Thiessen, P. A., Bolton, E. E., Chen, J., Fu, G., Gindulyte, A., Han, L., He, J., He, S., & Shoemaker, B. A. (2016). PubChem substance and compound databases. Nucleic Acids Research, 44(D1), D1202–D1213.	Chemical Book. 2020. “Chemical Search Engine.” Base de Datos de Productos Químicos. Retrieved September 12, 2020 (https://www.chemicalbook.com/ProductIndex_EN.aspx).	Chemical Book. 2020. “Chemical Search Engine.” Base de Datos de Productos Químicos. Retrieved September 12, 2020 (https://www.chemicalbook.com/ProductIndex_EN.aspx).	Chemical Book. 2020. “Chemical Search Engine.” Base de Datos de Productos Químicos. Retrieved September 12, 2020 (https://www.chemicalbook.com/ProductIndex_EN.aspx).

Apéndice 41. Referencias bibliográficas de la matriz de datos de propiedades fisicoquímicas de herbicidas seleccionados (Continuación).

N°	NOMBRE	Constante de disociación pKa	Coeficiente de Adsorción de carbono orgánico (Log KOC):	Solubilidad en agua (mg/L a 25°C)	Presión de vapor (Pa a 25°C)
19	Metsulfuron (Metsulfuron metil) - CAS: 74223-64-6	Chemical Book. 2020. "Chemical Search Engine." Base de Datos de Productos Químicos. Retrieved September 12, 2020 (https://www.chemicalbook.com/ProductIndex_EN.aspx).	Pence, H. E., & Williams, A. (2010). ChemSpider: an online chemical information resource. Mackay, D., Shiu, W. Y., & Lee, S. C. (2006). Handbook of physical-chemical properties and environmental fate for organic chemicals. CRC press.	Pence, H. E., & Williams, A. (2010). ChemSpider: an online chemical information resource. Mackay, D., Shiu, W. Y., & Lee, S. C. (2006). Handbook of physical-chemical properties and environmental fate for organic chemicals. CRC press.	Pence, H. E., & Williams, A. (2010). ChemSpider: an online chemical information resource. Mackay, D., Shiu, W. Y., & Lee, S. C. (2006). Handbook of physical-chemical properties and environmental fate for organic chemicals. CRC press.

Apéndice 41. Referencias bibliográficas de la matriz de datos de propiedades fisicoquímicas de herbicidas seleccionados (Continuación).

N°	NOMBRE	coeficiente de partición de octanol agua (Log KOW)	Ley de Henry (Pa·m ³ /mol at 25°C)	Factor de bioconcentraci ón (BCF)	Vida media (Días)
19	Metsulfuron (Metsulfuron metil) - CAS: 74223-64-6	Pence, H. E., & Williams, A. (2010). ChemSpider: an online chemical information resource. Mackay, D., Shiu, W. Y., & Lee, S. C. (2006). Handbook of physical- chemical properties and environmental fate for organic chemicals. CRC press.	Pence, H. E., & Williams, A. (2010). ChemSpider: an online chemical information resource. Mackay, D., Shiu, W. Y., & Lee, S. C. (2006). Handbook of physical- chemical properties and environmental fate for organic chemicals. CRC press.	Pence, H. E., & Williams, A. (2010). ChemSpider: an online chemical information resource. Mackay, D., Shiu, W. Y., & Lee, S. C. (2006). Handbook of physical- chemical properties and environmental fate for organic chemicals. CRC press.	Pence, H. E., & Williams, A. (2010). ChemSpider: an online chemical information resource. Mackay, D., Shiu, W. Y., & Lee, S. C. (2006). Handbook of physical- chemical properties and environmental fate for organic chemicals. CRC press.

Apéndice 41. Referencias bibliográficas de la matriz de datos de propiedades fisicoquímicas de herbicidas seleccionados (Continuación).

N°	NOMBRE	Indice de Refracción	coeficiente de partición octanol aire (KOA)	Volatilización desde agua (atm-m ³ /mol)	Toxicología DL50 (mg/Kg) ORAL -RATAS - BIBLIOGRAFÍA
19	Metsulfuron (Metsulfuron metil) - CAS: 74223-64-6	Pence, H. E., & Williams, A. (2010). ChemSpider: an online chemical information resource. Mackay, D., Shiu, W. Y., & Lee, S. C. (2006). Handbook of physical-chemical properties and environmental fate for organic chemicals. CRC press.	Pence, H. E., & Williams, A. (2010). ChemSpider: an online chemical information resource. Mackay, D., Shiu, W. Y., & Lee, S. C. (2006). Handbook of physical-chemical properties and environmental fate for organic chemicals. CRC press.	Pence, H. E., & Williams, A. (2010). ChemSpider: an online chemical information resource. Mackay, D., Shiu, W. Y., & Lee, S. C. (2006). Handbook of physical-chemical properties and environmental fate for organic chemicals. CRC press.	ChemIDplus, U. S. 2014. "National Library of Medicine."

Apéndice 41. Referencias bibliográficas de la matriz de datos de propiedades fisicoquímicas de herbicidas seleccionados (Continuación).

N°	NOMBRE	Categoría Toxicológica DL50 (mg/Kg) (SEGÚN RESOLUCIÓN 10834 DE 1992)	Categoría Toxicológica DL50 (mg/Kg) (SEGÚN RESOLUCIÓN 10834 DE 1992)	Categoría Toxicológica Mayor DL50 (mg/Kg) Oral Ratas - Presentación Comercial - (SEGÚN REGISTRO DEL ICA)	Categoría Toxicológica Mayor DL50 (mg/Kg) Oral Ratas - Presentación Comercial - (SEGÚN REGISTRO DEL ICA)
19	Metsulfuron (Metsulfuron metil) - CAS: 74223-64-6	Ministerio de Salud de Colombia. (1992). RESOLUCIÓN 10834 DE 1992. Septiembre 07, 2020, de Ministerio de Salud de Colombia Sitio web: https://www.icbf.gov.co/cargues/avance/docs/resolucion_min_salud_10834_1992.htm	Ministerio de Salud de Colombia. (1992). RESOLUCIÓN 10834 DE 1992. Septiembre 07, 2020, de Ministerio de Salud de Colombia Sitio web: https://www.icbf.gov.co/cargues/avance/docs/resolucion_min_salud_10834_1992.htm	ICA. 2020. REGISTROS PLAGUICIDAS REGISTRADOS - 16 DE JULIO 2020. BOGOTA - COLOMBIA.	ICA. 2020. REGISTROS PLAGUICIDAS REGISTRADOS - 16 DE JULIO 2020. BOGOTA - COLOMBIA.

Apéndice 41. Referencias bibliográficas de la matriz de datos de propiedades fisicoquímicas de herbicidas seleccionados (Continuación).

N°	NOMBRE	GRUPO FUNCIONAL IUPAC	FAMILIA QUÍMICA, GRUPO TOXÓFORO	SELECTIVIDAD	MODO DE ACCIÓN	TIPO DE SIEMBRA
19	Metsulfuron (Metsulfuron metil) - CAS: 74223-64-6	<p>Velasco, M. A., Y. Caballero Arroyo, and G. Quezad. 2006. Grupos Funcionales. Nomenclatura Y Reacciones Principales. Unam.</p> <p>Fernández, G. 2011. Nomenclatura En Química Orgánica. Germán Fernández.</p>	<p>Diez, P. (2013). Manejo de malezas problema: Modos de acción de herbicidas. Red de conocimiento en malezas resistentes. Rosario, Argentina.</p>	<p>de plaguicidas de Centroamérica, M. Consultado febrero del 2018.</p>	<p>Diez, P. (2013). Manejo de malezas problema: Modos de acción de herbicidas. Red de conocimiento en malezas resistentes. Rosario, Argentina.</p>	<p>Diez, P. (2013). Manejo de malezas problema: Modos de acción de herbicidas. Red de conocimiento en malezas resistentes. Rosario, Argentina.</p>

Apéndice 41. Referencias bibliográficas de la matriz de datos de propiedades fisicoquímicas de herbicidas seleccionados (Continuación).

N°	NOMBRE	ESTRUCTURA MOLECULAR	FORMULA MOLECULAR	MOMENTO DIPOLAR (Debye)	ENERGIA TOTAL (KCAL/MOL)
20	Norflurazon - CAS: 27314-13-2	Kim, S., Thiessen, P. A., Bolton, E. E., Chen, J., Fu, G., Gindulyte, A., Han, L., He, J., He, S., & Shoemaker, B. A. (2016). PubChem substance and compound databases. Nucleic Acids Research, 44(D1), D1202–D1213.	Kim, S., Thiessen, P. A., Bolton, E. E., Chen, J., Fu, G., Gindulyte, A., Han, L., He, J., He, S., & Shoemaker, B. A. (2016). PubChem substance and compound databases. Nucleic Acids Research, 44(D1), D1202–D1213.	Dennington, R., Keith, T., & Millam, J. (2009). GaussView, version 5 Gaussian09, R. A. (2009). 1, mj frisch, gw trucks, hb schlegel, ge scuseria, ma robb, jr cheeseman, g. Scalmani, v. Barone, b. Mennucci, ga petersson et al., gaussian. Inc., Wallingford CT, 121, 150-166.	Dennington, R., Keith, T., & Millam, J. (2009). GaussView, version 5 Gaussian09, R. A. (2009). 1, mj frisch, gw trucks, hb schlegel, ge scuseria, ma robb, jr cheeseman, g. Scalmani, v. Barone, b. Mennucci, ga petersson et al., gaussian. Inc., Wallingford CT, 121, 150-166.

Apéndice 41. Referencias bibliográficas de la matriz de datos de propiedades fisicoquímicas de herbicidas seleccionados (Continuación).

N°	NOMBRE	ENERGIA TERMICA (KCAL/MOL)	CAPACIDAD CALORIFICA (kcal/mol-K)	ENTROPIA (kcal/mol-K)	POLARIDAD α (C*m2/V)
20	Norflurazon - CAS: 27314-13-2	Dennington, R., Keith, T., & Millam, J. (2009). GaussView, version 5 Gaussian09, R. A. (2009). 1, mj frisch, gw trucks, hb schlegel, ge scuseria, ma robb, jr cheeseman, g. Scalmani, v. Barone, b. Mennucci, ga petersson et al., gaussian. Inc., Wallingford CT, 121, 150-166.	Dennington, R., Keith, T., & Millam, J. (2009). GaussView, version 5 Gaussian09, R. A. (2009). 1, mj frisch, gw trucks, hb schlegel, ge scuseria, ma robb, jr cheeseman, g. Scalmani, v. Barone, b. Mennucci, ga petersson et al., gaussian. Inc., Wallingford CT, 121, 150-166.	Dennington, R., Keith, T., & Millam, J. (2009). GaussView, version 5 Gaussian09, R. A. (2009). 1, mj frisch, gw trucks, hb schlegel, ge scuseria, ma robb, jr cheeseman, g. Scalmani, v. Barone, b. Mennucci, ga petersson et al., gaussian. Inc., Wallingford CT, 121, 150-166.	Dennington, R., Keith, T., & Millam, J. (2009). GaussView, version 5 Gaussian09, R. A. (2009). 1, mj frisch, gw trucks, hb schlegel, ge scuseria, ma robb, jr cheeseman, g. Scalmani, v. Barone, b. Mennucci, ga petersson et al., gaussian. Inc., Wallingford CT, 121, 150-166.

Apéndice 41. Referencias bibliográficas de la matriz de datos de propiedades fisicoquímicas de herbicidas seleccionados (Continuación).

N°	NOMBRE	PESO MOLECULAR (g/mol)	TEMPERATURA DE FUSION (K)	PUNTO DE EBULLICION NORMAL (K)	DENSIDAD A 298,15 K - (g/ml)
20	Norflurazon - CAS: 27314-13-2	Kim, S., Thiessen, P. A., Bolton, E. E., Chen, J., Fu, G., Gindulyte, A., Han, L., He, J., He, S., & Shoemaker, B. A. (2016). PubChem substance and compound databases. Nucleic Acids Research, 44(D1), D1202–D1213.	Santa Cruz Biotechnology. 2020. "Base de Datos." Base de Datos - Productos Químicos. Retrieved September 12, 2020 (https://www.scbt.com/es/home).	Chemical Book. 2020. "Chemical Search Engine." Base de Datos de Productos Químicos. Retrieved September 12, 2020 (https://www.chemicalbook.com/ProductIndex_EN.aspx).	Chemical Book. 2020. "Chemical Search Engine." Base de Datos de Productos Químicos. Retrieved September 12, 2020 (https://www.chemicalbook.com/ProductIndex_EN.aspx).

Apéndice 41. Referencias bibliográficas de la matriz de datos de propiedades fisicoquímicas de herbicidas seleccionados (Continuación).

N°	NOMBRE	Constante de disociación pKa	Coeficiente de Adsorción de carbono orgánico (Log KOC):	Solubilidad en agua (mg/L a 25°C)	Presión de vapor (Pa a 25°C)
20	Norflurazon - CAS: 27314-13-2	Chemical Book. 2020. "Chemical Search Engine." Base de Datos de Productos Químicos. Retrieved September 12, 2020 (https://www.chemicalbook.com/ProductIndex_EN.aspx).	Pence, H. E., & Williams, A. (2010). ChemSpider: an online chemical information resource. Mackay, D., Shiu, W. Y., & Lee, S. C. (2006). Handbook of physical-chemical properties and environmental fate for organic chemicals. CRC press.	Pence, H. E., & Williams, A. (2010). ChemSpider: an online chemical information resource. Mackay, D., Shiu, W. Y., & Lee, S. C. (2006). Handbook of physical-chemical properties and environmental fate for organic chemicals. CRC press.	Pence, H. E., & Williams, A. (2010). ChemSpider: an online chemical information resource. Mackay, D., Shiu, W. Y., & Lee, S. C. (2006). Handbook of physical-chemical properties and environmental fate for organic chemicals. CRC press.

Apéndice 41. Referencias bibliográficas de la matriz de datos de propiedades fisicoquímicas de herbicidas seleccionados (Continuación).

N°	NOMBRE	coeficiente de partición de octanol agua (Log KOW)	Ley de Henry (Pa·m ³ /mol at 25°C)	Factor de bioconcentraci ón (BCF)	Vida media (Días)
20	Norflurazon - CAS: 27314-13-2	Pence, H. E., & Williams, A. (2010). ChemSpider: an online chemical information resource. Mackay, D., Shiu, W. Y., & Lee, S. C. (2006). Handbook of physical- chemical properties and environmental fate for organic chemicals. CRC press.	Pence, H. E., & Williams, A. (2010). ChemSpider: an online chemical information resource. Mackay, D., Shiu, W. Y., & Lee, S. C. (2006). Handbook of physical- chemical properties and environmental fate for organic chemicals. CRC press.	Pence, H. E., & Williams, A. (2010). ChemSpider: an online chemical information resource. Mackay, D., Shiu, W. Y., & Lee, S. C. (2006). Handbook of physical- chemical properties and environmental fate for organic chemicals. CRC press.	Pence, H. E., & Williams, A. (2010). ChemSpider: an online chemical information resource. Mackay, D., Shiu, W. Y., & Lee, S. C. (2006). Handbook of physical- chemical properties and environmental fate for organic chemicals. CRC press.

Apéndice 41. Referencias bibliográficas de la matriz de datos de propiedades fisicoquímicas de herbicidas seleccionados (Continuación).

N°	NOMBRE	Indice de Refracción	coeficiente de partición octanol aire (KOA)	Volatilización desde agua (atm-m ³ /mol)	Toxicología DL50 (mg/Kg) ORAL -RATAS - BIBLIOGRAFÍA
20	Norflurazon - CAS: 27314-13-2	Pence, H. E., & Williams, A. (2010). ChemSpider: an online chemical information resource. Mackay, D., Shiu, W. Y., & Lee, S. C. (2006). Handbook of physical-chemical properties and environmental fate for organic chemicals. CRC press.	Pence, H. E., & Williams, A. (2010). ChemSpider: an online chemical information resource. Mackay, D., Shiu, W. Y., & Lee, S. C. (2006). Handbook of physical-chemical properties and environmental fate for organic chemicals. CRC press.	Pence, H. E., & Williams, A. (2010). ChemSpider: an online chemical information resource. Mackay, D., Shiu, W. Y., & Lee, S. C. (2006). Handbook of physical-chemical properties and environmental fate for organic chemicals. CRC press.	ChemIDplus, U. S. 2014. "National Library of Medicine."

Apéndice 41. Referencias bibliográficas de la matriz de datos de propiedades fisicoquímicas de herbicidas seleccionados (Continuación).

N°	NOMBRE	Categoría Toxicológica DL50 (mg/Kg) (SEGÚN RESOLUCIÓN 10834 DE 1992)	Categoría Toxicológica DL50 (mg/Kg) (SEGÚN RESOLUCIÓN 10834 DE 1992)	Categoría Toxicológica Mayor DL50 (mg/Kg) Oral Ratas - Presentación Comercial - (SEGÚN REGISTRO DEL ICA)	Categoría Toxicológica Mayor DL50 (mg/Kg) Oral Ratas - Presentación Comercial - (SEGÚN REGISTRO DEL ICA)
20	Norflurazon - CAS: 27314-13-2	Ministerio de Salud de Colombia. (1992). RESOLUCIÓN 10834 DE 1992. Septiembre 07, 2020, de Ministerio de Salud de Colombia Sitio web: https://www.icbf.gov.co/cargues/avance/docs/resolucion_min_salud_10834_1992.htm	Ministerio de Salud de Colombia. (1992). RESOLUCIÓN 10834 DE 1992. Septiembre 07, 2020, de Ministerio de Salud de Colombia Sitio web: https://www.icbf.gov.co/cargues/avance/docs/resolucion_min_salud_10834_1992.htm	ICA. 2020. REGISTROS PLAGUICIDAS REGISTRADOS - 16 DE JULIO 2020. BOGOTA - COLOMBIA.	ICA. 2020. REGISTROS PLAGUICIDAS REGISTRADOS - 16 DE JULIO 2020. BOGOTA - COLOMBIA.

Apéndice 41. Referencias bibliográficas de la matriz de datos de propiedades fisicoquímicas de herbicidas seleccionados (Continuación).

N°	NOMBRE	GRUPO FUNCIONAL IUPAC	FAMILIA QUÍMICA, GRUPO TOXÓFORO	SELECTIVIDAD	MODO DE ACCIÓN	TIPO DE SIEMBRA
20	Norflurazon - CAS: 27314-13-2	<p>Velasco, M. A., Y. Caballero Arroyo, and G. Quezad. 2006. Grupos Funcionales. Nomenclatura Y Reacciones Principales. Unam.</p> <p>Fernández, G. 2011. Nomenclatura En Química Orgánica. Germán Fernández.</p>	<p>Diez, P. (2013). Manejo de malezas problema: Modos de acción de herbicidas. Red de conocimiento en malezas resistentes. Rosario, Argentina.</p>	<p>de plaguicidas de Centroamérica, M. Consultado febrero del 2018.</p>	<p>Diez, P. (2013). Manejo de malezas problema: Modos de acción de herbicidas. Red de conocimiento en malezas resistentes. Rosario, Argentina.</p>	<p>Diez, P. (2013). Manejo de malezas problema: Modos de acción de herbicidas. Red de conocimiento en malezas resistentes. Rosario, Argentina.</p>

Apéndice 41. Referencias bibliográficas de la matriz de datos de propiedades fisicoquímicas de herbicidas seleccionados (Continuación).

N°	NOMBRE	ESTRUCTURA MOLECULAR	FORMULA MOLECULAR	MOMENTO DIPOLAR (Debye)	ENERGIA TOTAL (KCAL/MOL)
21	Paraquat - CAS: 4685-14-7	Kim, S., Thiessen, P. A., Bolton, E. E., Chen, J., Fu, G., Gindulyte, A., Han, L., He, J., He, S., & Shoemaker, B. A. (2016). PubChem substance and compound databases. Nucleic Acids Research, 44(D1), D1202–D1213.	Kim, S., Thiessen, P. A., Bolton, E. E., Chen, J., Fu, G., Gindulyte, A., Han, L., He, J., He, S., & Shoemaker, B. A. (2016). PubChem substance and compound databases. Nucleic Acids Research, 44(D1), D1202–D1213.	Dennington, R., Keith, T., & Millam, J. (2009). GaussView, version 5 Gaussian09, R. A. (2009). 1, mj frisch, gw trucks, hb schlegel, ge scuseria, ma robb, jr cheeseman, g. Scalmani, v. Barone, b. Mennucci, ga petersson et al., gaussian. Inc., Wallingford CT, 121, 150-166.	Dennington, R., Keith, T., & Millam, J. (2009). GaussView, version 5 Gaussian09, R. A. (2009). 1, mj frisch, gw trucks, hb schlegel, ge scuseria, ma robb, jr cheeseman, g. Scalmani, v. Barone, b. Mennucci, ga petersson et al., gaussian. Inc., Wallingford CT, 121, 150-166.

Apéndice 41. Referencias bibliográficas de la matriz de datos de propiedades fisicoquímicas de herbicidas seleccionados (Continuación).

N°	NOMBRE	ENERGIA TERMICA (KCAL/MOL)	CAPACIDAD CALORIFICA (kcal/mol-K)	ENTROPIA (kcal/mol-K)	POLARIDAD α (C*m2/V)
21	Paraquat - CAS: 4685-14-7	Dennington, R., Keith, T., & Millam, J. (2009). GaussView, version 5 Gaussian09, R. A. (2009). 1, mj frisch, gw trucks, hb schlegel, ge scuseria, ma robb, jr cheeseman, g. Scalmani, v. Barone, b. Mennucci, ga petersson et al., gaussian. Inc., Wallingford CT, 121, 150-166.	Dennington, R., Keith, T., & Millam, J. (2009). GaussView, version 5 Gaussian09, R. A. (2009). 1, mj frisch, gw trucks, hb schlegel, ge scuseria, ma robb, jr cheeseman, g. Scalmani, v. Barone, b. Mennucci, ga petersson et al., gaussian. Inc., Wallingford CT, 121, 150-166.	Dennington, R., Keith, T., & Millam, J. (2009). GaussView, version 5 Gaussian09, R. A. (2009). 1, mj frisch, gw trucks, hb schlegel, ge scuseria, ma robb, jr cheeseman, g. Scalmani, v. Barone, b. Mennucci, ga petersson et al., gaussian. Inc., Wallingford CT, 121, 150-166.	Dennington, R., Keith, T., & Millam, J. (2009). GaussView, version 5 Gaussian09, R. A. (2009). 1, mj frisch, gw trucks, hb schlegel, ge scuseria, ma robb, jr cheeseman, g. Scalmani, v. Barone, b. Mennucci, ga petersson et al., gaussian. Inc., Wallingford CT, 121, 150-166.

Apéndice 41. Referencias bibliográficas de la matriz de datos de propiedades fisicoquímicas de herbicidas seleccionados (Continuación).

N°	NOMBRE	PESO MOLECULAR (g/mol)	TEMPERATURA DE FUSION (K)	PUNTO DE EBULLICION NORMAL (K)	DENSIDAD A 298,15 K - (g/ml)
21	Paraquat - CAS: 4685-14-7	Kim, S., Thiessen, P. A., Bolton, E. E., Chen, J., Fu, G., Gindulyte, A., Han, L., He, J., He, S., & Shoemaker, B. A. (2016). PubChem substance and compound databases. Nucleic Acids Research, 44(D1), D1202–D1213.	Chemical Book. 2020. "Chemical Search Engine." Base de Datos de Productos Químicos. Retrieved September 12, 2020 (https://www.chemicalbook.com/ProductIndex_EN.aspx).	Chemical Book. 2020. "Chemical Search Engine." Base de Datos de Productos Químicos. Retrieved September 12, 2020 (https://www.chemicalbook.com/ProductIndex_EN.aspx).	Chemical Book. 2020. "Chemical Search Engine." Base de Datos de Productos Químicos. Retrieved September 12, 2020 (https://www.chemicalbook.com/ProductIndex_EN.aspx).

Apéndice 41. Referencias bibliográficas de la matriz de datos de propiedades fisicoquímicas de herbicidas seleccionados (Continuación).

N°	NOMBRE	Constante de disociación pKa	Coeficiente de Adsorción de carbono orgánico (Log KOC):	Solubilidad en agua (mg/L a 25°C)	Presión de vapor (Pa a 25°C)
21	Paraquat - CAS: 4685-14-7	Chemical Book. 2020. "Chemical Search Engine." Base de Datos de Productos Químicos. Retrieved September 12, 2020 (https://www.chemicalbook.com/ProductIndex_EN.aspx).	Pence, H. E., & Williams, A. (2010). ChemSpider: an online chemical information resource. Mackay, D., Shiu, W. Y., & Lee, S. C. (2006). Handbook of physical-chemical properties and environmental fate for organic chemicals. CRC press.	Pence, H. E., & Williams, A. (2010). ChemSpider: an online chemical information resource. Mackay, D., Shiu, W. Y., & Lee, S. C. (2006). Handbook of physical-chemical properties and environmental fate for organic chemicals. CRC press.	Pence, H. E., & Williams, A. (2010). ChemSpider: an online chemical information resource. Mackay, D., Shiu, W. Y., & Lee, S. C. (2006). Handbook of physical-chemical properties and environmental fate for organic chemicals. CRC press.

Apéndice 41. Referencias bibliográficas de la matriz de datos de propiedades fisicoquímicas de herbicidas seleccionados (Continuación).

N°	NOMBRE	coeficiente de partición de octanol agua (Log KOW)	Ley de Henry (Pa·m ³ /mol at 25°C)	Factor de bioconcentraci ón (BCF)	Vida media (Días)
21	Paraquat - CAS: 4685-14-7	<p>Pence, H. E., & Williams, A. (2010). ChemSpider: an online chemical information resource.</p> <p>Mackay, D., Shiu, W. Y., & Lee, S. C. (2006). Handbook of physical-chemical properties and environmental fate for organic chemicals. CRC press.</p>	<p>Pence, H. E., & Williams, A. (2010). ChemSpider: an online chemical information resource.</p> <p>Mackay, D., Shiu, W. Y., & Lee, S. C. (2006). Handbook of physical-chemical properties and environmental fate for organic chemicals. CRC press.</p>	<p>Pence, H. E., & Williams, A. (2010). ChemSpider: an online chemical information resource.</p> <p>Mackay, D., Shiu, W. Y., & Lee, S. C. (2006). Handbook of physical-chemical properties and environmental fate for organic chemicals. CRC press.</p>	<p>Pence, H. E., & Williams, A. (2010). ChemSpider: an online chemical information resource.</p> <p>Mackay, D., Shiu, W. Y., & Lee, S. C. (2006). Handbook of physical-chemical properties and environmental fate for organic chemicals. CRC press.</p>

Apéndice 41. Referencias bibliográficas de la matriz de datos de propiedades fisicoquímicas de herbicidas seleccionados (Continuación).

N°	NOMBRE	Indice de Refracción	coeficiente de partición octanol aire (KOA)	Volatilización desde agua (atm-m ³ /mol)	Toxicología DL50 (mg/Kg) ORAL -RATAS - BIBLIOGRAFÍA
21	Paraquat - CAS: 4685-14-7	Pence, H. E., & Williams, A. (2010). ChemSpider: an online chemical information resource. Mackay, D., Shiu, W. Y., & Lee, S. C. (2006). Handbook of physical-chemical properties and environmental fate for organic chemicals. CRC press.	Pence, H. E., & Williams, A. (2010). ChemSpider: an online chemical information resource. Mackay, D., Shiu, W. Y., & Lee, S. C. (2006). Handbook of physical-chemical properties and environmental fate for organic chemicals. CRC press.	Pence, H. E., & Williams, A. (2010). ChemSpider: an online chemical information resource. Mackay, D., Shiu, W. Y., & Lee, S. C. (2006). Handbook of physical-chemical properties and environmental fate for organic chemicals. CRC press.	ChemIDplus, U. S. 2014. "National Library of Medicine."

Apéndice 41. Referencias bibliográficas de la matriz de datos de propiedades fisicoquímicas de herbicidas seleccionados (Continuación).

N°	NOMBRE	Categoría Toxicológica DL50 (mg/Kg) (SEGÚN RESOLUCIÓN 10834 DE 1992)	Categoría Toxicológica DL50 (mg/Kg) (SEGÚN RESOLUCIÓN 10834 DE 1992)	Categoría Toxicológica Mayor DL50 (mg/Kg) Oral Ratas - Presentación Comercial - (SEGÚN REGISTRO DEL ICA)	Categoría Toxicológica Mayor DL50 (mg/Kg) Oral Ratas - Presentación Comercial - (SEGÚN REGISTRO DEL ICA)
21	Paraquat - CAS: 4685-14-7	Ministerio de Salud de Colombia. (1992). RESOLUCIÓN 10834 DE 1992. Septiembre 07, 2020, de Ministerio de Salud de Colombia Sitio web: https://www.icbf.gov.co/cargues/avance/docs/resolucion_min_salud_10834_1992.htm	Ministerio de Salud de Colombia. (1992). RESOLUCIÓN 10834 DE 1992. Septiembre 07, 2020, de Ministerio de Salud de Colombia Sitio web: https://www.icbf.gov.co/cargues/avance/docs/resolucion_min_salud_10834_1992.htm	ICA. 2020. REGISTROS PLAGUICIDAS REGISTRADOS - 16 DE JULIO 2020. BOGOTA - COLOMBIA.	ICA. 2020. REGISTROS PLAGUICIDAS REGISTRADOS - 16 DE JULIO 2020. BOGOTA - COLOMBIA.

Apéndice 41. Referencias bibliográficas de la matriz de datos de propiedades fisicoquímicas de herbicidas seleccionados (Continuación).

N°	NOMBRE	GRUPO FUNCIONAL IUPAC	FAMILIA QUÍMICA, GRUPO TOXÓFORO	SELECTIVIDAD	MODO DE ACCIÓN	TIPO DE SIEMBRA
21	Paraquat - CAS: 4685-14-7	<p>Velasco, M. A., Y. Caballero Arroyo, and G. Quezad. 2006. Grupos Funcionales. Nomenclatura Y Reacciones Principales. Unam.</p> <p>Fernández, G. 2011. Nomenclatura En Química Orgánica. Germán Fernández.</p>	<p>Diez, P. (2013). Manejo de malezas problema: Modos de acción de herbicidas. Red de conocimiento en malezas resistentes. Rosario, Argentina.</p>	<p>de plaguicidas de Centroamérica, M. Consultado febrero del 2018.</p>	<p>Diez, P. (2013). Manejo de malezas problema: Modos de acción de herbicidas. Red de conocimiento en malezas resistentes. Rosario, Argentina.</p>	<p>Diez, P. (2013). Manejo de malezas problema: Modos de acción de herbicidas. Red de conocimiento en malezas resistentes. Rosario, Argentina.</p>

Apéndice 41. Referencias bibliográficas de la matriz de datos de propiedades fisicoquímicas de herbicidas seleccionados (Continuación).

N°	NOMBRE	ESTRUCTURA MOLECULAR	FORMULA MOLECULAR	MOMENTO DIPOLAR (Debye)	ENERGIA TOTAL (KCAL/MOL)
22	Pendimetalina - CAS: 40487-42-1	Kim, S., Thiessen, P. A., Bolton, E. E., Chen, J., Fu, G., Gindulyte, A., Han, L., He, J., He, S., & Shoemaker, B. A. (2016). PubChem substance and compound databases. Nucleic Acids Research, 44(D1), D1202–D1213.	Kim, S., Thiessen, P. A., Bolton, E. E., Chen, J., Fu, G., Gindulyte, A., Han, L., He, J., He, S., & Shoemaker, B. A. (2016). PubChem substance and compound databases. Nucleic Acids Research, 44(D1), D1202–D1213.	Dennington, R., Keith, T., & Millam, J. (2009). GaussView, version 5 Gaussian09, R. A. (2009). 1, mj frisch, gw trucks, hb schlegel, ge scuseria, ma robb, jr cheeseman, g. Scalmani, v. Barone, b. Mennucci, ga petersson et al., gaussian. Inc., Wallingford CT, 121, 150-166.	Dennington, R., Keith, T., & Millam, J. (2009). GaussView, version 5 Gaussian09, R. A. (2009). 1, mj frisch, gw trucks, hb schlegel, ge scuseria, ma robb, jr cheeseman, g. Scalmani, v. Barone, b. Mennucci, ga petersson et al., gaussian. Inc., Wallingford CT, 121, 150-166.

Apéndice 41. Referencias bibliográficas de la matriz de datos de propiedades fisicoquímicas de herbicidas seleccionados (Continuación).

N°	NOMBRE	ENERGIA TERMICA (KCAL/MOL)	CAPACIDAD CALORIFICA (kcal/mol-K)	ENTROPIA (kcal/mol-K)	POLARIDAD α (C*m2/V)
22	Pendimetalina - CAS: 40487-42-1	Dennington, R., Keith, T., & Millam, J. (2009). GaussView, version 5 Gaussian09, R. A. (2009). 1, mj frisch, gw trucks, hb schlegel, ge scuseria, ma robb, jr cheeseman, g. Scalmani, v. Barone, b. Mennucci, ga petersson et al., gaussian. Inc., Wallingford CT, 121, 150-166.	Dennington, R., Keith, T., & Millam, J. (2009). GaussView, version 5 Gaussian09, R. A. (2009). 1, mj frisch, gw trucks, hb schlegel, ge scuseria, ma robb, jr cheeseman, g. Scalmani, v. Barone, b. Mennucci, ga petersson et al., gaussian. Inc., Wallingford CT, 121, 150-166.	Dennington, R., Keith, T., & Millam, J. (2009). GaussView, version 5 Gaussian09, R. A. (2009). 1, mj frisch, gw trucks, hb schlegel, ge scuseria, ma robb, jr cheeseman, g. Scalmani, v. Barone, b. Mennucci, ga petersson et al., gaussian. Inc., Wallingford CT, 121, 150-166.	Dennington, R., Keith, T., & Millam, J. (2009). GaussView, version 5 Gaussian09, R. A. (2009). 1, mj frisch, gw trucks, hb schlegel, ge scuseria, ma robb, jr cheeseman, g. Scalmani, v. Barone, b. Mennucci, ga petersson et al., gaussian. Inc., Wallingford CT, 121, 150-166.

Apéndice 41. Referencias bibliográficas de la matriz de datos de propiedades fisicoquímicas de herbicidas seleccionados (Continuación).

N°	NOMBRE	PESO MOLECULAR (g/mol)	TEMPERATURA DE FUSION (K)	PUNTO DE EBULLICION NORMAL (K)	DENSIDAD A 298,15 K - (g/ml)
22	Pendimetalina - CAS: 40487-42-1	Kim, S., Thiessen, P. A., Bolton, E. E., Chen, J., Fu, G., Gindulyte, A., Han, L., He, J., He, S., & Shoemaker, B. A. (2016). PubChem substance and compound databases. Nucleic Acids Research, 44(D1), D1202–D1213.	Chemical Book. 2020. "Chemical Search Engine." Base de Datos de Productos Químicos. Retrieved September 12, 2020 (https://www.chemicalbook.com/ProductIndex_EN.aspx).	Chemical Book. 2020. "Chemical Search Engine." Base de Datos de Productos Químicos. Retrieved September 12, 2020 (https://www.chemicalbook.com/ProductIndex_EN.aspx).	Chemical Book. 2020. "Chemical Search Engine." Base de Datos de Productos Químicos. Retrieved September 12, 2020 (https://www.chemicalbook.com/ProductIndex_EN.aspx).

Apéndice 41. Referencias bibliográficas de la matriz de datos de propiedades fisicoquímicas de herbicidas seleccionados (Continuación).

N°	NOMBRE	Constante de disociación pKa	Coeficiente de Adsorción de carbono orgánico (Log KOC):	Solubilidad en agua (mg/L a 25°C)	Presión de vapor (Pa a 25°C)
22	Pendimetalina - CAS: 40487-42-1	Chemical Book. 2020. "Chemical Search Engine." Base de Datos de Productos Químicos. Retrieved September 12, 2020 (https://www.chemicalbook.com/ProductIndex_EN.aspx).	Pence, H. E., & Williams, A. (2010). ChemSpider: an online chemical information resource. Mackay, D., Shiu, W. Y., & Lee, S. C. (2006). Handbook of physical-chemical properties and environmental fate for organic chemicals. CRC press.	Pence, H. E., & Williams, A. (2010). ChemSpider: an online chemical information resource. Mackay, D., Shiu, W. Y., & Lee, S. C. (2006). Handbook of physical-chemical properties and environmental fate for organic chemicals. CRC press.	Pence, H. E., & Williams, A. (2010). ChemSpider: an online chemical information resource. Mackay, D., Shiu, W. Y., & Lee, S. C. (2006). Handbook of physical-chemical properties and environmental fate for organic chemicals. CRC press.

Apéndice 41. Referencias bibliográficas de la matriz de datos de propiedades fisicoquímicas de herbicidas seleccionados (Continuación).

N°	NOMBRE	coeficiente de partición de octanol agua (Log KOW)	Ley de Henry (Pa·m ³ /mol at 25°C)	Factor de bioconcentraci ón (BCF)	Vida media (Días)
22	Pendimetalina - CAS: 40487-42-1	Pence, H. E., & Williams, A. (2010). ChemSpider: an online chemical information resource. Mackay, D., Shiu, W. Y., & Lee, S. C. (2006). Handbook of physical- chemical properties and environmental fate for organic chemicals. CRC press.	Pence, H. E., & Williams, A. (2010). ChemSpider: an online chemical information resource. Mackay, D., Shiu, W. Y., & Lee, S. C. (2006). Handbook of physical- chemical properties and environmental fate for organic chemicals. CRC press.	Pence, H. E., & Williams, A. (2010). ChemSpider: an online chemical information resource. Mackay, D., Shiu, W. Y., & Lee, S. C. (2006). Handbook of physical- chemical properties and environmental fate for organic chemicals. CRC press.	Pence, H. E., & Williams, A. (2010). ChemSpider: an online chemical information resource. Mackay, D., Shiu, W. Y., & Lee, S. C. (2006). Handbook of physical- chemical properties and environmental fate for organic chemicals. CRC press.

Apéndice 41. Referencias bibliográficas de la matriz de datos de propiedades fisicoquímicas de herbicidas seleccionados (Continuación).

N°	NOMBRE	Indice de Refracción	coeficiente de partición octanol aire (KOA)	Volatilización desde agua (atm-m ³ /mol)	Toxicología DL50 (mg/Kg) ORAL -RATAS - BIBLIOGRAFÍA
22	Pendimetalina - CAS: 40487-42-1	Pence, H. E., & Williams, A. (2010). ChemSpider: an online chemical information resource. Mackay, D., Shiu, W. Y., & Lee, S. C. (2006). Handbook of physical-chemical properties and environmental fate for organic chemicals. CRC press.	Pence, H. E., & Williams, A. (2010). ChemSpider: an online chemical information resource. Mackay, D., Shiu, W. Y., & Lee, S. C. (2006). Handbook of physical-chemical properties and environmental fate for organic chemicals. CRC press.	Pence, H. E., & Williams, A. (2010). ChemSpider: an online chemical information resource. Mackay, D., Shiu, W. Y., & Lee, S. C. (2006). Handbook of physical-chemical properties and environmental fate for organic chemicals. CRC press.	ChemIDplus, U. S. 2014. "National Library of Medicine."

Apéndice 41. Referencias bibliográficas de la matriz de datos de propiedades fisicoquímicas de herbicidas seleccionados (Continuación).

N°	NOMBRE	Categoría Toxicológica DL50 (mg/Kg) (SEGÚN RESOLUCIÓN 10834 DE 1992)	Categoría Toxicológica DL50 (mg/Kg) (SEGÚN RESOLUCIÓN 10834 DE 1992)	Categoría Toxicológica Mayor DL50 (mg/Kg) Oral Ratas - Presentación Comercial - (SEGÚN REGISTRO DEL ICA)	Categoría Toxicológica Mayor DL50 (mg/Kg) Oral Ratas - Presentación Comercial - (SEGÚN REGISTRO DEL ICA)
22	Pendimetali na - CAS: 40487-42-1	Ministerio de Salud de Colombia. (1992). RESOLUCIÓN 10834 DE 1992. Septiembre 07, 2020, de Ministerio de Salud de Colombia Sitio web: https://www.icbf.gov.co/cargues/avance/docs/resolucion_min_salud_10834_1992.htm	Ministerio de Salud de Colombia. (1992). RESOLUCIÓN 10834 DE 1992. Septiembre 07, 2020, de Ministerio de Salud de Colombia Sitio web: https://www.icbf.gov.co/cargues/avance/docs/resolucion_min_salud_10834_1992.htm	ICA. 2020. REGISTROS PLAGUICIDAS REGISTRADOS - 16 DE JULIO 2020. BOGOTA - COLOMBIA.	ICA. 2020. REGISTROS PLAGUICIDAS REGISTRADOS - 16 DE JULIO 2020. BOGOTA - COLOMBIA.

Apéndice 41. Referencias bibliográficas de la matriz de datos de propiedades fisicoquímicas de herbicidas seleccionados (Continuación).

N°	NOMBRE	GRUPO FUNCIONAL IUPAC	FAMILIA QUÍMICA, GRUPO TOXÓFORO	SELECTIVIDAD	MODO DE ACCIÓN	TIPO DE SIEMBRA
22	Pendimetalina - CAS: 40487-42-1	<p>Velasco, M. A., Y. Caballero Arroyo, and G. Quezad. 2006. Grupos Funcionales. Nomenclatura Y Reacciones Principales. Unam.</p> <p>Fernández, G. 2011. Nomenclatura En Química Orgánica. Germán Fernández.</p>	<p>Diez, P. (2013). Manejo de malezas problema: Modos de acción de herbicidas. Red de conocimiento en malezas resistentes. Rosario, Argentina.</p>	<p>de plaguicidas de Centroamérica, M. Consultado febrero del 2018.</p>	<p>Diez, P. (2013). Manejo de malezas problema: Modos de acción de herbicidas. Red de conocimiento en malezas resistentes. Rosario, Argentina.</p>	<p>Diez, P. (2013). Manejo de malezas problema: Modos de acción de herbicidas. Red de conocimiento en malezas resistentes. Rosario, Argentina.</p>

Apéndice 41. Referencias bibliográficas de la matriz de datos de propiedades fisicoquímicas de herbicidas seleccionados (Continuación).

N°	NOMBRE	ESTRUCTURA MOLECULAR	FORMULA MOLECULAR	MOMENTO DIPOLAR (Debye)	ENERGIA TOTAL (KCAL/MOL)
23	Propanil - CAS: 709-98-8	Kim, S., Thiessen, P. A., Bolton, E. E., Chen, J., Fu, G., Gindulyte, A., Han, L., He, J., He, S., & Shoemaker, B. A. (2016). PubChem substance and compound databases. Nucleic Acids Research, 44(D1), D1202–D1213.	Kim, S., Thiessen, P. A., Bolton, E. E., Chen, J., Fu, G., Gindulyte, A., Han, L., He, J., He, S., & Shoemaker, B. A. (2016). PubChem substance and compound databases. Nucleic Acids Research, 44(D1), D1202–D1213.	Dennington, R., Keith, T., & Millam, J. (2009). GaussView, version 5 Gaussian09, R. A. (2009). 1, mj frisch, gw trucks, hb schlegel, ge scuseria, ma robb, jr cheeseman, g. Scalmani, v. Barone, b. Mennucci, ga petersson et al., gaussian. Inc., Wallingford CT, 121, 150-166.	Dennington, R., Keith, T., & Millam, J. (2009). GaussView, version 5 Gaussian09, R. A. (2009). 1, mj frisch, gw trucks, hb schlegel, ge scuseria, ma robb, jr cheeseman, g. Scalmani, v. Barone, b. Mennucci, ga petersson et al., gaussian. Inc., Wallingford CT, 121, 150-166.

Apéndice 41. Referencias bibliográficas de la matriz de datos de propiedades fisicoquímicas de herbicidas seleccionados (Continuación).

N°	NOMBRE	ENERGIA TERMICA (KCAL/MOL)	CAPACIDAD CALORIFICA (kcal/mol-K)	ENTROPIA (kcal/mol-K)	POLARIDAD α (C*m2/V)
23	Propanil - CAS: 709-98-8	Dennington, R., Keith, T., & Millam, J. (2009). GaussView, version 5 Gaussian09, R. A. (2009). 1, mj frisch, gw trucks, hb schlegel, ge scuseria, ma robb, jr cheeseman, g. Scalmani, v. Barone, b. Mennucci, ga petersson et al., gaussian. Inc., Wallingford CT, 121, 150-166.	Dennington, R., Keith, T., & Millam, J. (2009). GaussView, version 5 Gaussian09, R. A. (2009). 1, mj frisch, gw trucks, hb schlegel, ge scuseria, ma robb, jr cheeseman, g. Scalmani, v. Barone, b. Mennucci, ga petersson et al., gaussian. Inc., Wallingford CT, 121, 150-166.	Dennington, R., Keith, T., & Millam, J. (2009). GaussView, version 5 Gaussian09, R. A. (2009). 1, mj frisch, gw trucks, hb schlegel, ge scuseria, ma robb, jr cheeseman, g. Scalmani, v. Barone, b. Mennucci, ga petersson et al., gaussian. Inc., Wallingford CT, 121, 150-166.	Dennington, R., Keith, T., & Millam, J. (2009). GaussView, version 5 Gaussian09, R. A. (2009). 1, mj frisch, gw trucks, hb schlegel, ge scuseria, ma robb, jr cheeseman, g. Scalmani, v. Barone, b. Mennucci, ga petersson et al., gaussian. Inc., Wallingford CT, 121, 150-166.

Apéndice 41. Referencias bibliográficas de la matriz de datos de propiedades fisicoquímicas de herbicidas seleccionados (Continuación).

N°	NOMBRE	PESO MOLECULAR (g/mol)	TEMPERATURA DE FUSION (K)	PUNTO DE EBULLICION NORMAL (K)	DENSIDAD A 298,15 K - (g/ml)
23	Propanil - CAS: 709-98-8	Kim, S., Thiessen, P. A., Bolton, E. E., Chen, J., Fu, G., Gindulyte, A., Han, L., He, J., He, S., & Shoemaker, B. A. (2016). PubChem substance and compound databases. Nucleic Acids Research, 44(D1), D1202–D1213.	Chemical Book. 2020. "Chemical Search Engine." Base de Datos de Productos Químicos. Retrieved September 12, 2020 (https://www.chemicalbook.com/ProductIndex_EN.aspx).	Chemical Book. 2020. "Chemical Search Engine." Base de Datos de Productos Químicos. Retrieved September 12, 2020 (https://www.chemicalbook.com/ProductIndex_EN.aspx).	Chemical Book. 2020. "Chemical Search Engine." Base de Datos de Productos Químicos. Retrieved September 12, 2020 (https://www.chemicalbook.com/ProductIndex_EN.aspx).

Apéndice 41. Referencias bibliográficas de la matriz de datos de propiedades fisicoquímicas de herbicidas seleccionados (Continuación).

N°	NOMBRE	Constante de disociación pKa	Coeficiente de Adsorción de carbono orgánico (Log KOC):	Solubilidad en agua (mg/L a 25°C)	Presión de vapor (Pa a 25°C)
23	Propanil - CAS: 709-98-8	Chemical Book. 2020. "Chemical Search Engine." Base de Datos de Productos Químicos. Retrieved September 12, 2020 (https://www.chemicalbook.com/ProductIndex_EN.aspx).	Pence, H. E., & Williams, A. (2010). ChemSpider: an online chemical information resource. Mackay, D., Shiu, W. Y., & Lee, S. C. (2006). Handbook of physical-chemical properties and environmental fate for organic chemicals. CRC press.	Pence, H. E., & Williams, A. (2010). ChemSpider: an online chemical information resource. Mackay, D., Shiu, W. Y., & Lee, S. C. (2006). Handbook of physical-chemical properties and environmental fate for organic chemicals. CRC press.	Pence, H. E., & Williams, A. (2010). ChemSpider: an online chemical information resource. Mackay, D., Shiu, W. Y., & Lee, S. C. (2006). Handbook of physical-chemical properties and environmental fate for organic chemicals. CRC press.

Apéndice 41. Referencias bibliográficas de la matriz de datos de propiedades fisicoquímicas de herbicidas seleccionados (Continuación).

N°	NOMBRE	coeficiente de partición de octanol agua (Log KOW)	Ley de Henry (Pa·m ³ /mol at 25°C)	Factor de bioconcentraci ón (BCF)	Vida media (Días)
23	Propanil - CAS: 709-98-8	Pence, H. E., & Williams, A. (2010). ChemSpider: an online chemical information resource. Mackay, D., Shiu, W. Y., & Lee, S. C. (2006). Handbook of physical-chemical properties and environmental fate for organic chemicals. CRC press.	Pence, H. E., & Williams, A. (2010). ChemSpider: an online chemical information resource. Mackay, D., Shiu, W. Y., & Lee, S. C. (2006). Handbook of physical-chemical properties and environmental fate for organic chemicals. CRC press.	Pence, H. E., & Williams, A. (2010). ChemSpider: an online chemical information resource. Mackay, D., Shiu, W. Y., & Lee, S. C. (2006). Handbook of physical-chemical properties and environmental fate for organic chemicals. CRC press.	Pence, H. E., & Williams, A. (2010). ChemSpider: an online chemical information resource. Mackay, D., Shiu, W. Y., & Lee, S. C. (2006). Handbook of physical-chemical properties and environmental fate for organic chemicals. CRC press.

Apéndice 41. Referencias bibliográficas de la matriz de datos de propiedades fisicoquímicas de herbicidas seleccionados (Continuación).

N°	NOMBRE	Indice de Refracción	coeficiente de partición octanol aire (KOA)	Volatilización desde agua (atm-m ³ /mol)	Toxicología DL50 (mg/Kg) ORAL -RATAS - BIBLIOGRAFÍA
23	Propanil - CAS: 709-98-8	Pence, H. E., & Williams, A. (2010). ChemSpider: an online chemical information resource. Mackay, D., Shiu, W. Y., & Lee, S. C. (2006). Handbook of physical-chemical properties and environmental fate for organic chemicals. CRC press.	Pence, H. E., & Williams, A. (2010). ChemSpider: an online chemical information resource. Mackay, D., Shiu, W. Y., & Lee, S. C. (2006). Handbook of physical-chemical properties and environmental fate for organic chemicals. CRC press.	Pence, H. E., & Williams, A. (2010). ChemSpider: an online chemical information resource. Mackay, D., Shiu, W. Y., & Lee, S. C. (2006). Handbook of physical-chemical properties and environmental fate for organic chemicals. CRC press.	ChemIDplus, U. S. 2014. "National Library of Medicine."

Apéndice 41. Referencias bibliográficas de la matriz de datos de propiedades fisicoquímicas de herbicidas seleccionados (Continuación).

N°	NOMBRE	Categoría Toxicológica DL50 (mg/Kg) (SEGÚN RESOLUCIÓN 10834 DE 1992)	Categoría Toxicológica DL50 (mg/Kg) (SEGÚN RESOLUCIÓN 10834 DE 1992)	Categoría Toxicológica Mayor DL50 (mg/Kg) Oral Ratas - Presentación Comercial - (SEGÚN REGISTRO DEL ICA)	Categoría Toxicológica Mayor DL50 (mg/Kg) Oral Ratas - Presentación Comercial - (SEGÚN REGISTRO DEL ICA)
23	Propanil - CAS: 709-98-8	Ministerio de Salud de Colombia. (1992). RESOLUCIÓN 10834 DE 1992. Septiembre 07, 2020, de Ministerio de Salud de Colombia Sitio web: https://www.icbf.gov.co/cargues/avance/docs/resolucion_min_salud_10834_1992.htm	Ministerio de Salud de Colombia. (1992). RESOLUCIÓN 10834 DE 1992. Septiembre 07, 2020, de Ministerio de Salud de Colombia Sitio web: https://www.icbf.gov.co/cargues/avance/docs/resolucion_min_salud_10834_1992.htm	ICA. 2020. REGISTROS PLAGUICIDAS REGISTRADOS - 16 DE JULIO 2020. BOGOTA - COLOMBIA.	ICA. 2020. REGISTROS PLAGUICIDAS REGISTRADOS - 16 DE JULIO 2020. BOGOTA - COLOMBIA.

Apéndice 41. Referencias bibliográficas de la matriz de datos de propiedades fisicoquímicas de herbicidas seleccionados (Continuación).

N°	NOMBRE	GRUPO FUNCIONAL IUPAC	FAMILIA QUÍMICA, GRUPO TOXÓFORO	SELECTIVIDAD	MODO DE ACCIÓN	TIPO DE SIEMBRA
23	Propanil - CAS: 709-98-8	<p>Velasco, M. A., Y. Caballero Arroyo, and G. Quezad. 2006. Grupos Funcionales. Nomenclatura Y Reacciones Principales. Unam.</p> <p>Fernández, G. 2011. Nomenclatura En Química Orgánica. Germán Fernández.</p>	<p>Diez, P. (2013). Manejo de malezas problema: Modos de acción de herbicidas. Red de conocimiento en malezas resistentes. Rosario, Argentina.</p>	<p>de plaguicidas de Centroamérica, M. Consultado febrero del 2018.</p>	<p>Diez, P. (2013). Manejo de malezas problema: Modos de acción de herbicidas. Red de conocimiento en malezas resistentes. Rosario, Argentina.</p>	<p>Diez, P. (2013). Manejo de malezas problema: Modos de acción de herbicidas. Red de conocimiento en malezas resistentes. Rosario, Argentina.</p>

Apéndice 41. Referencias bibliográficas de la matriz de datos de propiedades fisicoquímicas de herbicidas seleccionados (Continuación).

N°	NOMBRE	ESTRUCTURA MOLECULAR	FORMULA MOLECULAR	MOMENTO DIPOLAR (Debye)	ENERGIA TOTAL (KCAL/MOL)
24	Quinclorac - CAS: 84087-01-4	Kim, S., Thiessen, P. A., Bolton, E. E., Chen, J., Fu, G., Gindulyte, A., Han, L., He, J., He, S., & Shoemaker, B. A. (2016). PubChem substance and compound databases. Nucleic Acids Research, 44(D1), D1202–D1213.	Kim, S., Thiessen, P. A., Bolton, E. E., Chen, J., Fu, G., Gindulyte, A., Han, L., He, J., He, S., & Shoemaker, B. A. (2016). PubChem substance and compound databases. Nucleic Acids Research, 44(D1), D1202–D1213.	Dennington, R., Keith, T., & Millam, J. (2009). GaussView, version 5 Gaussian09, R. A. (2009). 1, mj frisch, gw trucks, hb schlegel, ge scuseria, ma robb, jr cheeseman, g. Scalmani, v. Barone, b. Mennucci, ga petersson et al., gaussian. Inc., Wallingford CT, 121, 150-166.	Dennington, R., Keith, T., & Millam, J. (2009). GaussView, version 5 Gaussian09, R. A. (2009). 1, mj frisch, gw trucks, hb schlegel, ge scuseria, ma robb, jr cheeseman, g. Scalmani, v. Barone, b. Mennucci, ga petersson et al., gaussian. Inc., Wallingford CT, 121, 150-166.

Apéndice 41. Referencias bibliográficas de la matriz de datos de propiedades fisicoquímicas de herbicidas seleccionados (Continuación).

N°	NOMBRE	ENERGIA TERMICA (KCAL/MOL)	CAPACIDAD CALORIFICA (kcal/mol-K)	ENTROPIA (kcal/mol-K)	POLARIDAD α (C*m2/V)
24	Quinclorac - CAS: 84087-01-4	Dennington, R., Keith, T., & Millam, J. (2009). GaussView, version 5 Gaussian09, R. A. (2009). 1, mj frisch, gw trucks, hb schlegel, ge scuseria, ma robb, jr cheeseman, g. Scalmani, v. Barone, b. Mennucci, ga petersson et al., gaussian. Inc., Wallingford CT, 121, 150-166.	Dennington, R., Keith, T., & Millam, J. (2009). GaussView, version 5 Gaussian09, R. A. (2009). 1, mj frisch, gw trucks, hb schlegel, ge scuseria, ma robb, jr cheeseman, g. Scalmani, v. Barone, b. Mennucci, ga petersson et al., gaussian. Inc., Wallingford CT, 121, 150-166.	Dennington, R., Keith, T., & Millam, J. (2009). GaussView, version 5 Gaussian09, R. A. (2009). 1, mj frisch, gw trucks, hb schlegel, ge scuseria, ma robb, jr cheeseman, g. Scalmani, v. Barone, b. Mennucci, ga petersson et al., gaussian. Inc., Wallingford CT, 121, 150-166.	Dennington, R., Keith, T., & Millam, J. (2009). GaussView, version 5 Gaussian09, R. A. (2009). 1, mj frisch, gw trucks, hb schlegel, ge scuseria, ma robb, jr cheeseman, g. Scalmani, v. Barone, b. Mennucci, ga petersson et al., gaussian. Inc., Wallingford CT, 121, 150-166.

Apéndice 41. Referencias bibliográficas de la matriz de datos de propiedades fisicoquímicas de herbicidas seleccionados (Continuación).

N°	NOMBRE	PESO MOLECULAR (g/mol)	TEMPERATURA DE FUSION (K)	PUNTO DE EBULLICION NORMAL (K)	DENSIDAD A 298,15 K - (g/ml)
24	Quinclorac - CAS: 84087-01-4	Kim, S., Thiessen, P. A., Bolton, E. E., Chen, J., Fu, G., Gindulyte, A., Han, L., He, J., He, S., & Shoemaker, B. A. (2016). PubChem substance and compound databases. Nucleic Acids Research, 44(D1), D1202–D1213.	Chemical Book. 2020. "Chemical Search Engine." Base de Datos de Productos Químicos. Retrieved September 12, 2020 (https://www.chemicalbook.com/ProductIndex_EN.aspx).	Chemical Book. 2020. "Chemical Search Engine." Base de Datos de Productos Químicos. Retrieved September 12, 2020 (https://www.chemicalbook.com/ProductIndex_EN.aspx).	Chemical Book. 2020. "Chemical Search Engine." Base de Datos de Productos Químicos. Retrieved September 12, 2020 (https://www.chemicalbook.com/ProductIndex_EN.aspx).

Apéndice 41. Referencias bibliográficas de la matriz de datos de propiedades fisicoquímicas de herbicidas seleccionados (Continuación).

N°	NOMBRE	Constante de disociación pKa	Coeficiente de Adsorción de carbono orgánico (Log KOC):	Solubilidad en agua (mg/L a 25°C)	Presión de vapor (Pa a 25°C)
24	Quinclorac - CAS: 84087-01-4	Chemical Book. 2020. "Chemical Search Engine." Base de Datos de Productos Químicos. Retrieved September 12, 2020 (https://www.chemicalbook.com/ProductIndex_EN.aspx).	Pence, H. E., & Williams, A. (2010). ChemSpider: an online chemical information resource. Mackay, D., Shiu, W. Y., & Lee, S. C. (2006). Handbook of physical-chemical properties and environmental fate for organic chemicals. CRC press.	Pence, H. E., & Williams, A. (2010). ChemSpider: an online chemical information resource. Mackay, D., Shiu, W. Y., & Lee, S. C. (2006). Handbook of physical-chemical properties and environmental fate for organic chemicals. CRC press.	Pence, H. E., & Williams, A. (2010). ChemSpider: an online chemical information resource. Mackay, D., Shiu, W. Y., & Lee, S. C. (2006). Handbook of physical-chemical properties and environmental fate for organic chemicals. CRC press.

Apéndice 41. Referencias bibliográficas de la matriz de datos de propiedades fisicoquímicas de herbicidas seleccionados (Continuación).

N°	NOMBRE	coeficiente de partición de octanol agua (Log KOW)	Ley de Henry (Pa·m ³ /mol at 25°C)	Factor de bioconcentraci ón (BCF)	Vida media (Días)
24	Quinclorac - CAS: 84087-01-4	Pence, H. E., & Williams, A. (2010). ChemSpider: an online chemical information resource. Mackay, D., Shiu, W. Y., & Lee, S. C. (2006). Handbook of physical- chemical properties and environmental fate for organic chemicals. CRC press.	Pence, H. E., & Williams, A. (2010). ChemSpider: an online chemical information resource. Mackay, D., Shiu, W. Y., & Lee, S. C. (2006). Handbook of physical- chemical properties and environmental fate for organic chemicals. CRC press.	Pence, H. E., & Williams, A. (2010). ChemSpider: an online chemical information resource. Mackay, D., Shiu, W. Y., & Lee, S. C. (2006). Handbook of physical- chemical properties and environmental fate for organic chemicals. CRC press.	Pence, H. E., & Williams, A. (2010). ChemSpider: an online chemical information resource. Mackay, D., Shiu, W. Y., & Lee, S. C. (2006). Handbook of physical- chemical properties and environmental fate for organic chemicals. CRC press.

Apéndice 41. Referencias bibliográficas de la matriz de datos de propiedades fisicoquímicas de herbicidas seleccionados (Continuación).

N°	NOMBRE	Indice de Refracción	coeficiente de partición octanol aire (KOA)	Volatilización desde agua (atm-m ³ /mol)	Toxicología DL50 (mg/Kg) ORAL -RATAS - BIBLIOGRAFÍA
24	Quinclorac - CAS: 84087-01-4	Pence, H. E., & Williams, A. (2010). ChemSpider: an online chemical information resource. Mackay, D., Shiu, W. Y., & Lee, S. C. (2006). Handbook of physical-chemical properties and environmental fate for organic chemicals. CRC press.	Pence, H. E., & Williams, A. (2010). ChemSpider: an online chemical information resource. Mackay, D., Shiu, W. Y., & Lee, S. C. (2006). Handbook of physical-chemical properties and environmental fate for organic chemicals. CRC press.	Pence, H. E., & Williams, A. (2010). ChemSpider: an online chemical information resource. Mackay, D., Shiu, W. Y., & Lee, S. C. (2006). Handbook of physical-chemical properties and environmental fate for organic chemicals. CRC press.	ChemIDplus, U. S. 2014. "National Library of Medicine."

Apéndice 41. Referencias bibliográficas de la matriz de datos de propiedades fisicoquímicas de herbicidas seleccionados (Continuación).

N°	NOMBRE	Categoría Toxicológica DL50 (mg/Kg) (SEGÚN RESOLUCIÓN 10834 DE 1992)	Categoría Toxicológica DL50 (mg/Kg) (SEGÚN RESOLUCIÓN 10834 DE 1992)	Categoría Toxicológica Mayor DL50 (mg/Kg) Oral Ratas - Presentación Comercial - (SEGÚN REGISTRO DEL ICA)	Categoría Toxicológica Mayor DL50 (mg/Kg) Oral Ratas - Presentación Comercial - (SEGÚN REGISTRO DEL ICA)
24	Quinclorac - CAS: 84087-01-4	Ministerio de Salud de Colombia. (1992). RESOLUCIÓN 10834 DE 1992. Septiembre 07, 2020, de Ministerio de Salud de Colombia Sitio web: https://www.icbf.gov.co/cargues/avance/docs/resolucion_min_salud_10834_1992.htm	Ministerio de Salud de Colombia. (1992). RESOLUCIÓN 10834 DE 1992. Septiembre 07, 2020, de Ministerio de Salud de Colombia Sitio web: https://www.icbf.gov.co/cargues/avance/docs/resolucion_min_salud_10834_1992.htm	ICA. 2020. REGISTROS PLAGUICIDAS REGISTRADOS - 16 DE JULIO 2020. BOGOTA - COLOMBIA.	ICA. 2020. REGISTROS PLAGUICIDAS REGISTRADOS - 16 DE JULIO 2020. BOGOTA - COLOMBIA.

Apéndice 41. Referencias bibliográficas de la matriz de datos de propiedades fisicoquímicas de herbicidas seleccionados (Continuación).

N°	NOMBRE	GRUPO FUNCIONAL IUPAC	FAMILIA QUÍMICA, GRUPO TOXÓFORO	SELECTIVIDAD	MODO DE ACCIÓN	TIPO DE SIEMBRA
24	Quinclorac - CAS: 84087-01-4	<p>Velasco, M. A., Y. Caballero Arroyo, and G. Quezad. 2006. Grupos Funcionales. Nomenclatura Y Reacciones Principales. Unam.</p> <p>Fernández, G. 2011. Nomenclatura En Química Orgánica. Germán Fernández.</p>	<p>Diez, P. (2013). Manejo de malezas problema: Modos de acción de herbicidas. Red de conocimiento en malezas resistentes. Rosario, Argentina.</p>	<p>de plaguicidas de Centroamérica, M. Consultado febrero del 2018.</p>	<p>Diez, P. (2013). Manejo de malezas problema: Modos de acción de herbicidas. Red de conocimiento en malezas resistentes. Rosario, Argentina.</p>	<p>Diez, P. (2013). Manejo de malezas problema: Modos de acción de herbicidas. Red de conocimiento en malezas resistentes. Rosario, Argentina.</p>

Apéndice 41. Referencias bibliográficas de la matriz de datos de propiedades fisicoquímicas de herbicidas seleccionados (Continuación).

N°	NOMBRE	ESTRUCTURA MOLECULAR	FORMULA MOLECULAR	MOMENTO DIPOLAR (Debye)	ENERGIA TOTAL (KCAL/MOL)
25	Sethoxydim - CAS: 74051-80-2	Kim, S., Thiessen, P. A., Bolton, E. E., Chen, J., Fu, G., Gindulyte, A., Han, L., He, J., He, S., & Shoemaker, B. A. (2016). PubChem substance and compound databases. Nucleic Acids Research, 44(D1), D1202–D1213.	Kim, S., Thiessen, P. A., Bolton, E. E., Chen, J., Fu, G., Gindulyte, A., Han, L., He, J., He, S., & Shoemaker, B. A. (2016). PubChem substance and compound databases. Nucleic Acids Research, 44(D1), D1202–D1213.	Dennington, R., Keith, T., & Millam, J. (2009). GaussView, version 5 Gaussian09, R. A. (2009). 1, mj frisch, gw trucks, hb schlegel, ge scuseria, ma robb, jr cheeseman, g. Scalmani, v. Barone, b. Mennucci, ga petersson et al., gaussian. Inc., Wallingford CT, 121, 150-166.	Dennington, R., Keith, T., & Millam, J. (2009). GaussView, version 5 Gaussian09, R. A. (2009). 1, mj frisch, gw trucks, hb schlegel, ge scuseria, ma robb, jr cheeseman, g. Scalmani, v. Barone, b. Mennucci, ga petersson et al., gaussian. Inc., Wallingford CT, 121, 150-166.

Apéndice 41. Referencias bibliográficas de la matriz de datos de propiedades fisicoquímicas de herbicidas seleccionados (Continuación).

N°	NOMBRE	ENERGIA TERMICA (KCAL/MOL)	CAPACIDAD CALORIFICA (kcal/mol-K)	ENTROPIA (kcal/mol-K)	POLARIDAD α (C*m2/V)
25	Sethoxydim - CAS: 74051-80-2	Dennington, R., Keith, T., & Millam, J. (2009). GaussView, version 5 Gaussian09, R. A. (2009). 1, mj frisch, gw trucks, hb schlegel, ge scuseria, ma robb, jr cheeseman, g. Scalmani, v. Barone, b. Mennucci, ga petersson et al., gaussian. Inc., Wallingford CT, 121, 150-166.	Dennington, R., Keith, T., & Millam, J. (2009). GaussView, version 5 Gaussian09, R. A. (2009). 1, mj frisch, gw trucks, hb schlegel, ge scuseria, ma robb, jr cheeseman, g. Scalmani, v. Barone, b. Mennucci, ga petersson et al., gaussian. Inc., Wallingford CT, 121, 150-166.	Dennington, R., Keith, T., & Millam, J. (2009). GaussView, version 5 Gaussian09, R. A. (2009). 1, mj frisch, gw trucks, hb schlegel, ge scuseria, ma robb, jr cheeseman, g. Scalmani, v. Barone, b. Mennucci, ga petersson et al., gaussian. Inc., Wallingford CT, 121, 150-166.	Dennington, R., Keith, T., & Millam, J. (2009). GaussView, version 5 Gaussian09, R. A. (2009). 1, mj frisch, gw trucks, hb schlegel, ge scuseria, ma robb, jr cheeseman, g. Scalmani, v. Barone, b. Mennucci, ga petersson et al., gaussian. Inc., Wallingford CT, 121, 150-166.

Apéndice 41. Referencias bibliográficas de la matriz de datos de propiedades fisicoquímicas de herbicidas seleccionados (Continuación).

N°	NOMBRE	PESO MOLECULAR (g/mol)	TEMPERATURA DE FUSION (K)	PUNTO DE EBULLICION NORMAL (K)	DENSIDAD A 298,15 K - (g/ml)
25	Sethoxydim - CAS: 74051-80-2	Kim, S., Thiessen, P. A., Bolton, E. E., Chen, J., Fu, G., Gindulyte, A., Han, L., He, J., He, S., & Shoemaker, B. A. (2016). PubChem substance and compound databases. Nucleic Acids Research, 44(D1), D1202–D1213.	Chemical Book. 2020. "Chemical Search Engine." Base de Datos de Productos Químicos. Retrieved September 12, 2020 (https://www.chemicalbook.com/ProductIndex_EN.aspx).	Chemical Book. 2020. "Chemical Search Engine." Base de Datos de Productos Químicos. Retrieved September 12, 2020 (https://www.chemicalbook.com/ProductIndex_EN.aspx).	Chemical Book. 2020. "Chemical Search Engine." Base de Datos de Productos Químicos. Retrieved September 12, 2020 (https://www.chemicalbook.com/ProductIndex_EN.aspx).

Apéndice 41. Referencias bibliográficas de la matriz de datos de propiedades fisicoquímicas de herbicidas seleccionados (Continuación).

N°	NOMBRE	Constante de disociación pKa	Coeficiente de Adsorción de carbono orgánico (Log KOC):	Solubilidad en agua (mg/L a 25°C)	Presión de vapor (Pa a 25°C)
25	Sethoxydim - CAS: 74051-80-2	Chemical Book. 2020. "Chemical Search Engine." Base de Datos de Productos Químicos. Retrieved September 12, 2020 (https://www.chemicalbook.com/ProductIndex_EN.aspx).	Pence, H. E., & Williams, A. (2010). ChemSpider: an online chemical information resource. Mackay, D., Shiu, W. Y., & Lee, S. C. (2006). Handbook of physical-chemical properties and environmental fate for organic chemicals. CRC press.	Pence, H. E., & Williams, A. (2010). ChemSpider: an online chemical information resource. Mackay, D., Shiu, W. Y., & Lee, S. C. (2006). Handbook of physical-chemical properties and environmental fate for organic chemicals. CRC press.	Pence, H. E., & Williams, A. (2010). ChemSpider: an online chemical information resource. Mackay, D., Shiu, W. Y., & Lee, S. C. (2006). Handbook of physical-chemical properties and environmental fate for organic chemicals. CRC press.

Apéndice 41. Referencias bibliográficas de la matriz de datos de propiedades fisicoquímicas de herbicidas seleccionados (Continuación).

N°	NOMBRE	coeficiente de partición de octanol agua (Log KOW)	Ley de Henry (Pa·m ³ /mol at 25°C)	Factor de bioconcentraci ón (BCF)	Vida media (Días)
25	Sethoxydim - CAS: 74051-80-2	Pence, H. E., & Williams, A. (2010). ChemSpider: an online chemical information resource. Mackay, D., Shiu, W. Y., & Lee, S. C. (2006). Handbook of physical- chemical properties and environmental fate for organic chemicals. CRC press.	Pence, H. E., & Williams, A. (2010). ChemSpider: an online chemical information resource. Mackay, D., Shiu, W. Y., & Lee, S. C. (2006). Handbook of physical- chemical properties and environmental fate for organic chemicals. CRC press.	Pence, H. E., & Williams, A. (2010). ChemSpider: an online chemical information resource. Mackay, D., Shiu, W. Y., & Lee, S. C. (2006). Handbook of physical- chemical properties and environmental fate for organic chemicals. CRC press.	Pence, H. E., & Williams, A. (2010). ChemSpider: an online chemical information resource. Mackay, D., Shiu, W. Y., & Lee, S. C. (2006). Handbook of physical- chemical properties and environmental fate for organic chemicals. CRC press.

Apéndice 41. Referencias bibliográficas de la matriz de datos de propiedades fisicoquímicas de herbicidas seleccionados (Continuación).

N°	NOMBRE	Indice de Refracción	coeficiente de partición octanol aire (KOA)	Volatilización desde agua (atm-m ³ /mol)	Toxicología DL50 (mg/Kg) ORAL -RATAS - BIBLIOGRAFÍA
25	Sethoxydim - CAS: 74051-80-2	Pence, H. E., & Williams, A. (2010). ChemSpider: an online chemical information resource. Mackay, D., Shiu, W. Y., & Lee, S. C. (2006). Handbook of physical-chemical properties and environmental fate for organic chemicals. CRC press.	Pence, H. E., & Williams, A. (2010). ChemSpider: an online chemical information resource. Mackay, D., Shiu, W. Y., & Lee, S. C. (2006). Handbook of physical-chemical properties and environmental fate for organic chemicals. CRC press.	Pence, H. E., & Williams, A. (2010). ChemSpider: an online chemical information resource. Mackay, D., Shiu, W. Y., & Lee, S. C. (2006). Handbook of physical-chemical properties and environmental fate for organic chemicals. CRC press.	ChemIDplus, U. S. 2014. "National Library of Medicine."

Apéndice 41. Referencias bibliográficas de la matriz de datos de propiedades fisicoquímicas de herbicidas seleccionados (Continuación).

N°	NOMBRE	Categoría Toxicológica DL50 (mg/Kg) (SEGÚN RESOLUCIÓN 10834 DE 1992)	Categoría Toxicológica DL50 (mg/Kg) (SEGÚN RESOLUCIÓN 10834 DE 1992)	Categoría Toxicológica Mayor DL50 (mg/Kg) Oral Ratas - Presentación Comercial - (SEGÚN REGISTRO DEL ICA)	Categoría Toxicológica Mayor DL50 (mg/Kg) Oral Ratas - Presentación Comercial - (SEGÚN REGISTRO DEL ICA)
25	Sethoxydim - CAS: 74051-80-2	Ministerio de Salud de Colombia. (1992). RESOLUCIÓN 10834 DE 1992. Septiembre 07, 2020, de Ministerio de Salud de Colombia Sitio web: https://www.icbf.gov.co/cargues/avance/docs/resolucion_min_salud_10834_1992.htm	Ministerio de Salud de Colombia. (1992). RESOLUCIÓN 10834 DE 1992. Septiembre 07, 2020, de Ministerio de Salud de Colombia Sitio web: https://www.icbf.gov.co/cargues/avance/docs/resolucion_min_salud_10834_1992.htm	ICA. 2020. REGISTROS PLAGUICIDAS REGISTRADOS - 16 DE JULIO 2020. BOGOTA - COLOMBIA.	ICA. 2020. REGISTROS PLAGUICIDAS REGISTRADOS - 16 DE JULIO 2020. BOGOTA - COLOMBIA.

Apéndice 41. Referencias bibliográficas de la matriz de datos de propiedades fisicoquímicas de herbicidas seleccionados (Continuación).

N°	NOMBRE	GRUPO FUNCIONAL IUPAC	FAMILIA QUÍMICA, GRUPO TOXÓFORO	SELECTIVIDAD	MODO DE ACCIÓN	TIPO DE SIEMBRA
25	Sethoxydim - CAS: 74051-80-2	<p>Velasco, M. A., Y. Caballero Arroyo, and G. Quezad. 2006. Grupos Funcionales. Nomenclatura Y Reacciones Principales. Unam.</p> <p>Fernández, G. 2011. Nomenclatura En Química Orgánica. Germán Fernández.</p>	<p>Diez, P. (2013). Manejo de malezas problema: Modos de acción de herbicidas. Red de conocimiento en malezas resistentes. Rosario, Argentina.</p>	<p>de plaguicidas de Centroamérica, M. Consultado febrero del 2018.</p>	<p>Diez, P. (2013). Manejo de malezas problema: Modos de acción de herbicidas. Red de conocimiento en malezas resistentes. Rosario, Argentina.</p>	<p>Diez, P. (2013). Manejo de malezas problema: Modos de acción de herbicidas. Red de conocimiento en malezas resistentes. Rosario, Argentina.</p>