



UNIVERSIDAD DE MURCIA
ESCUELA INTERNACIONAL DE DOCTORADO
TESIS DOCTORAL

CRITERIOS PARA EL DISEÑO DE LÍQUIDOS IÓNICOS DE BAJA
TOXICIDAD PARA APLICACIONES BIOTECNOLÓGICAS

D. JESÚS HERNÁNDEZ FERNÁNDEZ
2024



UNIVERSIDAD DE MURCIA
ESCUELA INTERNACIONAL DE DOCTORADO
TESIS DOCTORAL

CRITERIOS PARA EL DISEÑO DE LÍQUIDOS IÓNICOS DE BAJA
TOXICIDAD PARA APLICACIONES BIOTECNOLÓGICAS

Autor: D. JESÚS HERNANDEZ FERNANDEZ

Director/es: D. FRANCISCO JOSÉ HERNÁNDEZ FERNÁNDEZ

D^a. ANTONIA PÉREZ DE LOS RIOS



**DECLARACIÓN DE AUTORÍA Y ORIGINALIDAD
DE LA TESIS PRESENTADA PARA OBTENER EL TÍTULO DE DOCTOR**

Aprobado por la Comisión General de Doctorado el 19-10-2022

D./Dña. JESÚS HERNÁNDEZ FERNÁNDEZ

doctorando del Programa de Doctorado en

QUÍMICA BÁSICA Y APLICADA

de la Escuela Internacional de Doctorado de la Universidad Murcia, como autor/a de la tesis presentada para la obtención del título de Doctor y titulada:

CRITERIOS PARA EL DISEÑO DE LÍQUIDOS IÓNICOS DE BAJA TOXICIDAD PARA APLICACIONES BIOTECNOLÓGICAS

y dirigida por,

D./Dña. FRANCISCO JOSÉ HERNÁNDEZ FERNÁNDEZ

D./Dña. ANTONIA PÉREZ DE LOS RÍOS.

D./Dña.

DECLARO QUE:

La tesis es una obra original que no infringe los derechos de propiedad intelectual ni los derechos de propiedad industrial u otros, de acuerdo con el ordenamiento jurídico vigente, en particular, la Ley de Propiedad Intelectual (R.D. legislativo 1/1996, de 12 de abril, por el que se aprueba el texto refundido de la Ley de Propiedad Intelectual, modificado por la Ley 2/2019, de 1 de marzo, regularizando, aclarando y armonizando las disposiciones legales vigentes sobre la materia), en particular, las disposiciones referidas al derecho de cita, cuando se han utilizado sus resultados o publicaciones.

Si la tesis hubiera sido autorizada como tesis por compendio de publicaciones o incluyese 1 o 2 publicaciones (como prevé el artículo 29.8 del reglamento), declarar que cuenta con:

- *La aceptación por escrito de los coautores de las publicaciones de que el doctorando las presente como parte de la tesis.*
- *En su caso, la renuncia por escrito de los coautores no doctores de dichos trabajos a presentarlos como parte de otras tesis doctorales en la Universidad de Murcia o en cualquier otra universidad.*

Del mismo modo, asumo ante la Universidad cualquier responsabilidad que pudiera derivarse de la autoría o falta de originalidad del contenido de la tesis presentada, en caso de plagio, de conformidad con el ordenamiento jurídico vigente.

En Murcia, a 22 de Febrero de 2024

Firmado por HERNANDEZ FERNANDEZ JESUS -
***7481** el día 29/02/2024 con un
certificado emitido por AC FNMT Usuarios

Fdo.: JESÚS HERNÁNDEZ FERNÁNDEZ

Esta DECLARACIÓN DE AUTORÍA Y ORIGINALIDAD debe ser insertada en la primera página de la tesis presentada para la obtención del título de Doctor.

Información básica sobre protección de sus datos personales aportados	
Responsable:	Universidad de Murcia. Avenida teniente Flomesta, 5. Edificio de la Convalecencia. 30003; Murcia. Delegado de Protección de Datos: dpd@um.es
Legitimación:	La Universidad de Murcia se encuentra legitimada para el tratamiento de sus datos por ser necesario para el cumplimiento de una obligación legal aplicable al responsable del tratamiento. art. 6.1.c) del Reglamento General de Protección de Datos
Finalidad:	Gestionar su declaración de autoría y originalidad
Destinatarios:	No se prevén comunicaciones de datos
Derechos:	Los interesados pueden ejercer sus derechos de acceso, rectificación, cancelación, oposición, limitación del tratamiento, olvido y portabilidad a través del procedimiento establecido a tal efecto en el Registro Electrónico o mediante la presentación de la correspondiente solicitud en las Oficinas de Asistencia en Materia de Registro de la Universidad de Murcia

ÍNDICE

1. RESUMEN / ABSTRACT	1
2. OBJETIVOS Y ESTRUCTURA DEL TRABAJO	5
3. ANTECEDENTES.....	7
3.1. Líquidos iónicos. Definición y propiedades.....	7
3.1.1. Síntesis de líquidos iónicos.....	9
3.1.2. Purificación de líquidos iónicos.....	10
3.1.3. Producción comercial de líquidos iónicos.....	15
3.1.4. Propiedades físicas y químicas de los líquidos iónicos.....	17
3.2. Aplicaciones de los líquidos iónicos.....	20
3.2.1. Disolventes en reacciones químicas.....	20
3.2.2. Disolventes en reacciones biocatalíticas.....	20
3.2.3. Catalizadores.....	21
3.2.4. Agentes de extracción.....	21
3.2.5. Agentes rompedores de azeótropos.....	21
3.2.6. Fase líquida en membranas líquidas soportadas.....	22
3.2.7. Electrolitos en la industria electroquímica.....	22
3.2.8. Lubricantes.....	22
3.3. Los líquidos iónicos en la industria.....	23
3.4. Evaluación de la toxicidad de sustancias químicas.....	23
3.5. Toxicidad de líquidos iónicos.....	32
3.6. Predicción de la ecotoxicidad de sustancias químicas. Correlaciones.....	42
QSAR.....	
3.6.1. Terminología en los modelos QSAR.....	44
3.6.2. QSAR en la evaluación de la seguridad química.....	46
3.6.3. QSAR como método de evaluación de sustancias.....	47
3.6.4. Etapas en el desarrollo de un modelo QSAR	48

3.6.5. Métodos de validación de un modelo QSAR.....	50
3.6.6. QSAR Algoritmos de aprendizaje automático en modelos QSAR...	53
4. METODOLOGÍA.....	55
4.1. Estrategia de búsqueda y selección de datos.....	55
4.2. Construcción de los modelos QSAR.....	58
4.3 Método de aprendizaje de máquinas (ML).....	60
5. RESULTADOS Y DISCUSIÓN	71
5.1. Consideraciones sobre la toxicidad de líquidos iónicos y disolventes orgánicos convencionales.....	71
5.2. Relaciones cualitativas entre la estructura y la toxicidad y definición de descriptores de los modelos QSAR.....	79
5.2.1. Descriptores sustituyentes.....	95
5.2.2. Descriptores aniónicos.....	109
5.2.3. Descriptores catiónicos.....	115
5.3 Desarrollo de modelos QSAR para la predicción de la ecotoxicidad de líquidos iónicos.....	116
5.3.1 Modelo QSAR para la predicción de la ecotoxicidad de líquidos iónicos para <i>Vibrio fischeri</i>	122
5.3.2 Modelo QSAR para la predicción de la ecotoxicidad de líquidos iónicos para <i>Daphnia magna</i>	131
5.3.3 Modelo QSAR para la predicción de la ecotoxicidad de líquidos iónicos para <i>Pseudokirchneriella subcapitata</i>	137
5.4 Evaluación de la influencia de la estructura molecular de los líquidos iónicos en la ecotoxicidad de los mismos para su aplicación biotecnológica y mecanismo toxicológico de líquidos iónicos en organismos	142
5.5. Diseño de líquidos iónicos menos tóxicos para aplicaciones biotecnológicas.....	145
6. CONCLUSIONES.....	149

7. BIBLIOGRAFÍA.....	151
8. ANEXOS.....	173
ANEXO I. Datos de toxicidad para <i>V. fisheri</i>	173
ANEXO II. Datos de toxicidad para <i>D. magna</i>	313
ANEXO III. Datos de toxicidad para <i>P. subcapitata</i>	339

1. RESUMEN

En el contexto actual, el constante desarrollo tecnológico abarca todas las esferas, destacando especialmente la química y la ingeniería química. Esta nueva evolución se enfoca en la creación, desarrollo y aplicación de productos y procesos que sean más respetables con el medioambiente, con el entorno, más económicos, y que requieran menos energía y materias primas. En resumen, el objetivo es optimizarlos para lograr maximizar resultados con el menor impacto ambiental posible. Uno de los desafíos cruciales es encontrar alternativas a los disolventes orgánicos convencionales, que no solo tienen un alto coste (alrededor de 6.000 millones de euros al año) sino también efectos perjudiciales para el medio ambiente, la seguridad y la salud. Este escenario ha impulsado significativamente el desarrollo de procesos que hagan uso de disolventes más respetuosos en lugar de los tradicionales.

En este contexto, los líquidos iónicos surgen como una alternativa con un gran potencial en diversos campos de la química. Estos nuevos solventes son denominados "verdes" debido a su presión prácticamente despreciable a temperatura ambiente y a que son fácilmente reciclables y reutilizables. Su implementación a nivel industrial podría proporcionar una solución a los problemas relacionados con la emisión de disolventes, la contaminación atmosférica y la generación de residuos.

Sin embargo, su introducción en los procesos industriales requiere del conocimiento de su toxicidad por dos razones principales: (i) su efecto sobre la salud de los trabajadores y el medio ambiente y (ii) por su efecto sobre los procesos biotecnológicos, cuando se emplean asociados a microorganismos de uso industrial. Debido a la reciente aparición de los líquidos iónicos, una gran parte de sus parámetros toxicológicos no han sido determinados. Principalmente se disponen de datos básicos de toxicidad. Sin embargo, el análisis racional de la base de datos generada puede permitir un estudio más completo de sus parámetros toxicológicos y una racionalización en el diseño de nuevos líquidos iónicos con el fin de orientarla hacia la obtención de líquidos iónicos más seguros desde un punto de vista toxicológico y desde el punto de vista de su uso industrial, sobre todo biotecnológico.

La presente tesis tiene como finalidad el estudio y análisis de la toxicidad de líquidos iónicos sobre organismos representativos de los que se dispone de un importante número de datos de toxicidad, tales como la bacteria marina luminiscente *Vibrio fischeri*, la pulga de agua *Daphnia magna* y el alga *Pseudokirchneriella subcapitata*. La mayoría de estos datos se obtendrán de fuentes bibliográficas. Con todos estos datos se generarán bases de datos que, mediante herramientas estadísticas tipo QSAR (*Quantitative Structure-Activity Relationship*) permitirán relacionar la toxicidad de líquidos iónicos con su estructura química. Estos modelos nos permitirán analizar el mecanismo de toxicidad de los líquidos iónicos, seleccionar los líquidos iónicos con mejores propiedades en cuanto a toxicidad para su aplicación en procesos biológicos y racionalizar nuestros esfuerzos en el diseño de nuevos líquidos iónicos más seguros desde un punto de vista toxicológico. Para la construcción del modelo QSAR se han empleado una “máquina de aprendizaje” denominada PLS “regresión de mínimos cuadrados parciales” proporcionada por paquete XLSTAT de Microsoft. La técnica PLS se ha aplicado sobre un conjunto de cerca de 1.000 datos de toxicidad obtenidos de fuentes bibliográficas desde el año 2000 hasta el año 2023, que nos ha permitido generar los modelos estadísticos con más de 65.000 datos variables en total.

En la sección de resultados y conclusiones se han estudiado de forma cualitativa las relaciones entre estructura y toxicidad, lo que nos ha permitido definir los descriptores. Una vez definidos los descriptores se han desarrollado los modelos QSAR para cada microorganismo, previa curación de los datos experimentales, mediante la “máquina de aprendizaje” PLS. Así se han elaborado modelos cualitativos numéricos que nos permita relacionar cuantitativamente la estructura de los líquidos iónicos con su toxicidad hacia *Vibrio fischeri*, *Daphnia magna* y *Pseudokirchneriella subcapitata*. Los resultados obtenidos pueden contribuir al diseño de líquidos iónicos de baja toxicidad y por consiguiente aplicables a procesos biotecnológicos. También nos ha permitido establecer mecanismos generales de toxicidad de los líquidos iónicos.

1. ABSTRACT

The continuous technological development that is being carried out in all areas, and particularly in chemistry and chemical engineering, is aimed at the design, development and implementation of products and processes that are more respectful to the environment, that are more economical, which use less amounts of energy and raw materials. In short, what is intended is their optimization to achieve the maximum possible performance with the least impact on the environment. One of these challenges is the search for alternative solvents to conventional organic solvents. The high consumption of these solvents as reaction and extraction media in the chemical industry represents estimated costs worldwide of 6,000 million euros/year. This, together with its known harmful effects on the environment, safety and health, has provided an enormous incentive to minimize its use, giving rise to a strong push in the development of processes that use new solvents that are more environmentally friendly than conventional ones.

In this context, ionic liquids represent an alternative with enormous potential. These new solvents have been called “green” since they have a negligible vapor pressure at room temperature and are also easily recyclable and reusable. Thus, its use at an industrial level could offer a solution to the problems of solvent emissions and waste generation. However, its introduction into industrial processes requires knowledge of its toxicity for two main reasons: (i) for its effect on the health of workers and the environment and (ii) for its effect on biotechnological processes when they are used in association with microorganisms for industrial use. Due to the recent appearance of ionic liquids, a large part of their toxicological parameters has not been determined. Mainly basic toxicity data are available. However, the rational study of the database generated can allow a more complete study of its toxicological parameters and a rationalization in the design of new ionic liquids to guide it towards obtaining ionic liquids that are safer from a point of view. toxicological and from the point of view of its industrial use, especially biotechnological.

The purpose of this thesis is the study and analysis of the toxicity of ionic liquids on representative organisms for which a significant number of toxicity data are available, such as the luminescent marine bacteria *Vibrio fischeri*, the water flea *Daphnia magna*

and the alga *Pseudokirchneriella subcapitata*. Most of these data will be obtained from bibliographic sources. With all this data, databases will be generated that, using statistical tools such as QSAR (Quantitative Structure-Activity Relationship), will allow the toxicity of ionic liquids to be related to their chemical structure. These models will allow us to analyze the mechanism of toxicity of ionic liquids, select the ionic liquids with the best properties in terms of toxicity for their application in biological processes and rationalize our efforts in the design of new ionic liquids that are safer from a toxicological point of view. To build the QSAR model, a “learning machine” called PLS “partial least squares regression” provided by XLSTAT has been used. The PLS technique has been applied to a set of nearly 1000 toxicity data obtained from bibliographic sources since the year 2000 until the year 2023, which has allowed us to generate models with more than 65,000 variable data in total.

In the results and conclusions section, the relationships between structure and toxicity have been studied qualitatively, which has allowed us to define the descriptors. Once the descriptors are defined, the QSAR model will be developed for each microorganism after curating the experimental data through the applications of the PLS “learning machine”. Thus, a qualitative numerical model has been developed that allows us to quantitatively relate the structure of ionic liquids with their toxicity towards *Vibrio fischeri*, *Daphnia magna* and *Pseudokirchneriella subcapitata*. The results obtained will help us design ionic liquids with low toxicity and therefore suitable for biotechnological application. It will also allow the establishment of general mechanisms of toxicity of ionic liquids.

2. OBJETIVOS Y ESTRUCTURA DEL TRABAJO

El objetivo global de la presente tesis es el estudio y análisis de la toxicidad de líquidos iónicos mediante el establecimiento de modelos QSAR, lo que nos ayudara a la síntesis racional de líquidos iónicos menos tóxicos y su utilización en procesos biotecnológicos que empleen líquidos iónicos.

Para alcanzarlo se han planteado los siguientes objetivos específicos:

1. Recopilar y obtener datos de toxicidad de líquidos iónicos sobre organismos acuáticos representativos, tales como la bacteria marina luminiscente *Vibrio fischeri*, la pulga de agua *Daphnia magna* y el alga *Pseudokirchneriella*.
2. Estudiar las mejores metodologías para el desarrollo de modelos QSAR aplicados a la predicción de la toxicidad.
3. Realizar una adecuada curación de los datos toxicológicos para su posterior interpretación y uso en modelos QSAR.
4. Proponer relaciones cualitativas entre la estructura de los líquidos iónicos y su toxicidad.
5. Proponer los descriptores para el desarrollo del modelo de contribución de grupos QSAR en base a las relaciones cualitativas anteriores.
6. Ajustar los datos de toxicidad a los valores dados a los descriptores utilizando la técnica de “máquina de aprendizaje” de regresión de mínimos cuadrados parciales (PLS).
7. Evaluar, en función de los coeficientes de contribución obtenidos para cada descriptor, qué estructuras químicas proporcionan una menor toxicidad a los líquidos iónicos.
8. Establecer reglas para el diseño racional de líquidos iónicos de baja toxicidad para su aplicación en procesos biotecnológicos.
9. Proponer un posible mecanismo de toxicidad de los líquidos iónicos.

De acuerdo con estos objetivos específicos, el trabajo se va a articular en los siguientes capítulos:

En el **Capítulo 3** se incluye una revisión del estado del arte de los líquidos iónicos. Se realiza una revisión exhaustiva de las propiedades físico-químicas de estos nuevos disolventes (presión de vapor prácticamente nula, etc.), así como de sus aplicaciones, haciendo especial atención a sus aplicaciones biotecnológicas. También se analizan las principales metodologías para la determinación de la toxicidad de nuevas sustancias, haciendo especial hincapié en aquellas empleadas en la determinación de la toxicidad de líquidos iónicos.

En el **Capítulo 4** se recoge la metodología de búsqueda bibliográfica, así como la metodología empleada para la elaboración de los modelos QSAR y el método de aprendizaje de máquinas empleado.

En el **Capítulo 5** se presentan los resultados del presente trabajo de Tesis. En este capítulo se recogen y se analizan los valores de toxicidad de líquidos iónicos para la bacteria marina luminiscente *Vibrio fischeri*, la pulga de agua *Daphnia magna* y el alga *Pseudokirchneriella subcapitata* y se establecen relaciones cualitativas entre la estructura de los líquidos iónicos y su toxicidad. En base a estas relaciones cualitativas se proponen los descriptores de los modelos y se desarrollan los modelos QSAR mediante la técnica PLS. Se analiza el efecto cuantitativo de la composición catiónica y aniónica de los líquidos iónicos sobre la ecotoxicidad de estos. Finalmente se establecen reglas para el diseño de líquidos iónicos menos tóxicos y se proponen posibles mecanismos de toxicidad.

En el **Capítulo 6** se recogen las principales conclusiones extraídas de los capítulos anteriores.

La bibliografía utilizada para la elaboración de la presente memoria se recoge en el **Capítulo 7**.

Por último, en el **Capítulo 8** se recogen los datos toxicológicos de los líquidos iónicos para la bacteria marina luminiscente *Vibrio fischeri*, la pulga de agua *Daphnia magna* y el alga *Pseudokirchneriella subcapitata*.

3. ANTECEDENTES

3.1. LÍQUIDOS IÓNICOS. DEFINICIÓN Y PROPIEDADES

En los últimos 20 años se ha observado un crecimiento exponencial del número de publicaciones en las que aparece el término líquidos iónico en el título de la publicación. En la Figura 3.1 se presenta el acumulado del número de publicaciones con la palabra “ionic liquid” en el título. Los datos se han obtenido de las Web of Science [Web Of Science, 2023]. Estos datos demuestran la enorme utilidad que se ha encontrado en los líquidos iónicos y ha propiciado su aplicación en numerosos campos científicos con un acumulado de publicaciones en 2022 que se acerca a las 60.000 publicaciones.

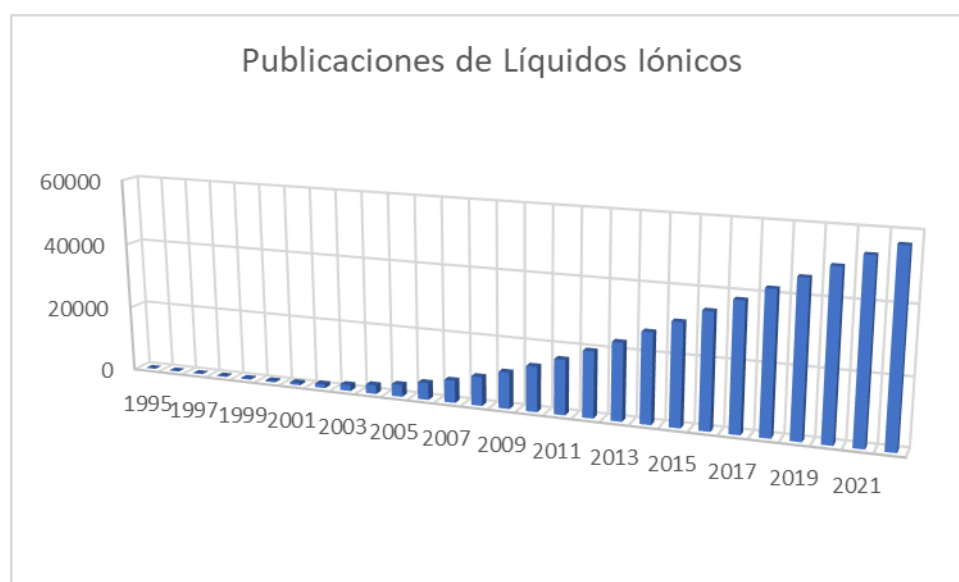


Figura 3.1. Artículos publicados sobre líquidos iónicos en los últimos años.

¿Pero qué es esto que conocemos como líquido iónico y cuyo desarrollo ha sufrido una expansión explosiva en los últimos 20 años?. Los líquidos iónicos son sales cuya característica principal es que se encuentran en estado líquido a temperatura ambiente o próxima a esta. Se diferencian de las sales fundidas en que estas últimas requieren de elevadas temperaturas para mantenerse en estado líquido, es decir, tienen una alta temperatura de fusión. Desde el punto de vista químico los líquidos iónicos son sales formadas por un catión orgánico y un anión normalmente inorgánico y poliatómico, aunque también puede ser de naturaleza orgánica [Welton, 2018].

Entre los cationes más comunes que componen los líquidos iónicos tenemos los tetra-alquil-amonio, tetra-alquil-fosfonio, N-alquil-piridina, N,N'-dialquil-imidazolío y N-alquil-pirrolidona (Figura 3.2).

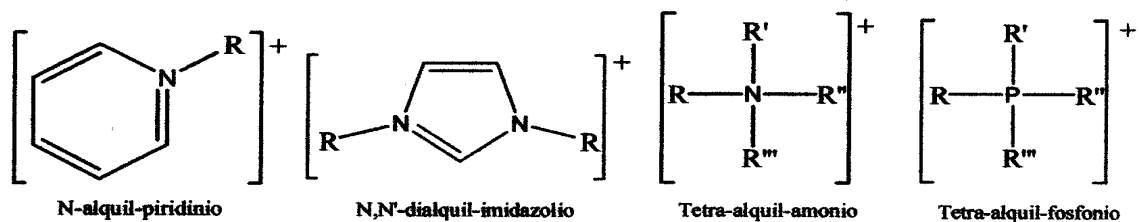


Figura 3.2. Principales cationes presentes en los líquidos iónicos.

Entre los aniones más comunes destacan el hexafluorofosfato, la bistriflimida el tetrafluoroborato, trifluoroacetato y triflato (Figura 3.3).

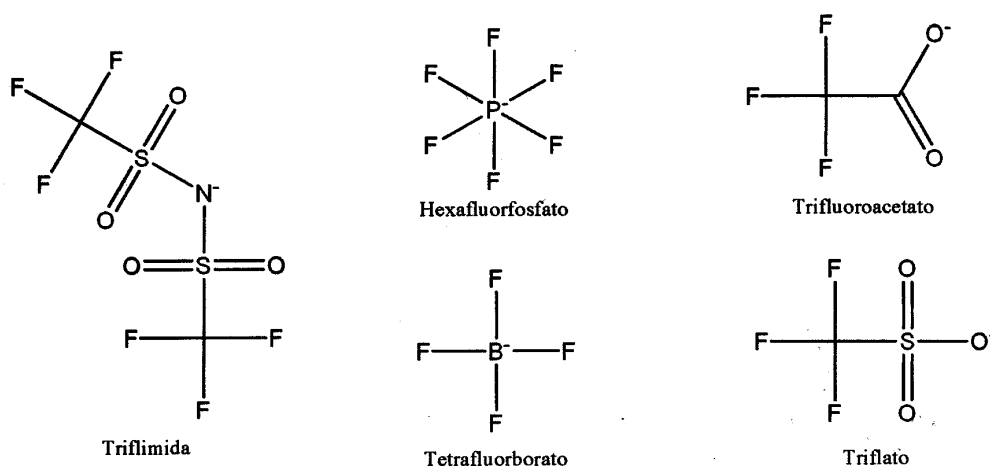


Figura 3.3. Aniones más comunes presentes en los líquidos iónicos.

Existen muchos sinónimos del término líquido iónico. En un principio, a los líquidos iónicos se les denominaba sales fundidas (molten salts), pero este término sugería el uso de altas temperaturas y medios altamente corrosivos, por lo que no era muy adecuado. Es por eso por lo que hoy en día se les conoce con el término de líquidos iónicos a temperatura ambiente (room temperature ionic liquids, RTILs) [Sheldon, 2001]. Otros sinónimos del término líquido iónico que podemos encontrar son sales fundidas a temperatura ambiente (room temperature molten salts ó ambient-temperature molten salts), sales fundidas a baja temperatura (low-temperature molten salts) ó sales de líquidos orgánicos (liquid organic salts).

Otro de los términos con los que se ha conocido a los líquidos iónicos es el de disolventes de diseño. La gran variedad de aniones y cationes constituyentes de los líquidos iónicos pueden permitir la formulación de miles de ellos, cada uno con propiedades físico-químicas diferentes. Esto puede permitir el diseño racional de líquidos iónicos con propiedades específicas para una aplicación concreta.

3.1.1. Síntesis de líquidos iónicos

En general, la síntesis de líquidos iónicos se consigue mediante la combinación de dos etapas o reacciones químicas. La primera es la reacción de cuaternización que dará lugar a la formación del catión del líquido iónicos y la segunda etapa o reacción es la de intercambio iónico o metátesis donde se le modifica el anión buscando un anión específico de interés. El esquema general de la reacción se muestra en la **Figura 3.4**.

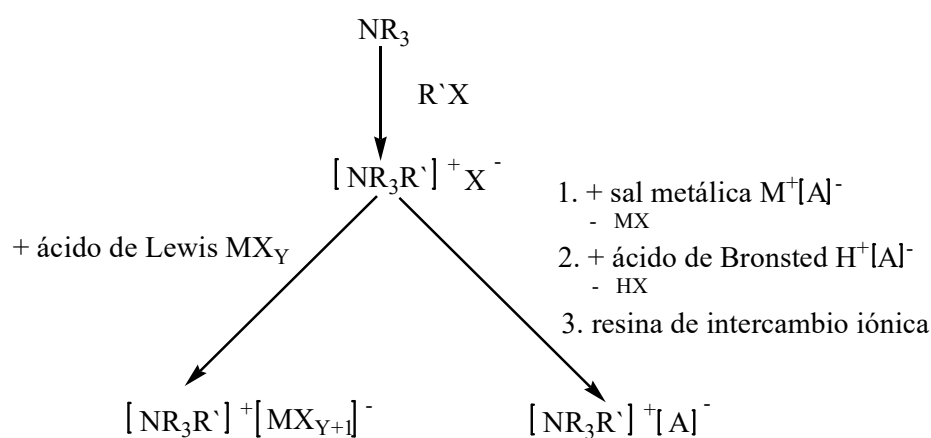


Figura 3.4. Esquema general de la síntesis de líquidos iónicos.

La formación del catión mediante cuaternización puede ser llevada a cabo mediante la protonación con un ácido o mediante reacción de una amina con un haloalcano. Las reacciones de intercambio del anión se pueden realizar mediante el tratamiento directo de las sales del haluro con ácidos de Lewis o mediante la metátesis del anión con una sal metálica del anión, con un ácido de Bronsted del anión o mediante una resina de intercambio iónico tal y como se muestra en la Figura 3.4.

3.1.2. Purificación de líquidos iónicos

Las propiedades físicas y químicas de los líquidos iónicos y como consecuencia su toxicidad puede verse alteradas por la presencia de impurezas que resultan de su preparación [Seddon *et al.*, 2000]. La pureza es una cuestión muy importante en el empleo de líquidos iónicos ya que el grado de pureza a permitir el uso de líquidos iónicos en unas aplicaciones u otras. A principio del año 2000 las casas comerciales ofrecían líquidos iónicos que en algunos casos era necesario purificar en laboratorio para determinadas aplicaciones. Hoy en día se ofrecen líquidos iónicos más puros, aunque el grado de pureza va a influir en el precio final del líquido iónicos.

Como procedimiento general, lo mejor es eliminar tantas impurezas como sea posible de los productos de partida y utilizar métodos sintéticos que generen pocos subproductos de reacción o permitan la separación de estos del producto final. A continuación, se citarán las impurezas más importantes presentes en los líquidos iónicos, así como la forma de eliminar o evitar las mismas durante los procesos de síntesis.

3.1.2.1. Impurezas de haluro

En el caso de líquidos iónicos formados por metátesis del anión las impurezas más comunes, son aniones haluro y cationes no separados eficientemente del producto final, por ejemplo, cloruros de imidazolio [RMIM][Cl] en el caso de que los líquidos iónicos que se quieran generar estén formados por el catión imidazolio. La presencia de esas impurezas puede estar en detrimento del desarrollo de estos líquidos iónicos especialmente en aplicaciones que suponen catálisis basadas en metales de transición, los cuales a menudo se desactivan por los iones haluro o catálisis enzimática. Aparte

pueden afectar en gran medida a las propiedades físico-químicas de los mismos, tal y como ha sido demostrado por Seddon *et al.* (2000). Por todo esto es necesario que el líquido iónico esté libre de impurezas haluro si se quiere tener unas conclusiones fidedignas sobre la viabilidad de un líquido iónico para ser utilizado como medio de reacción. Estas impurezas son un problema aun mayor en los líquidos iónicos miscibles con agua que en los inmiscibles ya que estos últimos pueden ser purificados correctamente mediante lavado con agua. Los problemas inherentes en la preparación de líquidos iónicos miscibles con agua han sido subrayados por Seddon *et al.* (2000), quienes estudiaron las concentraciones de Na^+ y Cl^- en una serie de líquidos iónicos formados por el tratamiento de [emim]Cl y [bmim]Cl con $\text{Ag}[\text{BF}_4]$, $\text{Na}[\text{BF}_4]$, $\text{Ag}[\text{NO}_3]$, $\text{Na}[\text{NO}_3]$, y HNO_3 . Ellos encontraron que las propiedades físicas tales como la densidad y viscosidad de los líquidos iónicos pueden ser radicalmente alteradas por la presencia de impurezas.

Como procedimiento de obtención de líquidos iónicos libres de haluro se expondrán los casos de la síntesis del [bmim][$(\text{CF}_3\text{SO}_2)_2\text{N}$] y la síntesis de [emim][BF_4]. [bmim][$(\text{CF}_3\text{SO}_2)_2\text{N}$] tiene cierta miscibilidad con agua (sobre un 1,4 % peso) y son estables a la hidrólisis [Bonhôte *et al.*, 1996]. Según describe el procedimiento de Bônhote [bmim]Cl (obtenido de la alquilación del metilimidazolio con cloruro de butilo) y $\text{Li}[(\text{CF}_3\text{SO}_2)_2\text{N}]$ se disuelven en agua. El líquido iónico que se va formando en una segunda capa se separa de la fase acuosa y es lavado con agua, hasta un punto donde las trazas del haluro no se detectan en el agua (mediante valoración con AgNO_3).

La preparación de [emim][BF_4] libre de haluro es más difícil, ya que el líquido iónico es miscible con agua, por lo que no es posible el tratamiento con agua para purificar el líquido iónico de los iones haluro. La reacción de metátesis se podría realizar en acetona seca o diclorometano, pero esta metodología tiene como inconvenientes la baja solubilidad del $\text{Na}[\text{BF}_4]$ y los largos tiempos de reacción. Consecuentemente la síntesis de [emim][BF_4] libre de aniones haluro, requiere procedimientos especiales, tales como el uso de una resina de intercambio iónico [Waffenschmidt, 2000a].

3.1.2.2. Agua

El agua es probablemente uno de los disolventes más problemáticos de eliminar, por lo que se recomienda que los líquidos iónicos sean calentados al menos a 70°C durante varias horas con agitación con el fin de alcanzar un grado aceptable de impurezas de agua. Incluso, después de secados, los líquidos iónicos inmiscibles con agua tales como [bmim][PF₆] puede absorber hasta 2 % de agua en contacto con aire hasta equilibrio. Si no se aplican procedimientos especiales de secado o una manipulación completamente inerte el agua está omnipresente en los líquidos iónicos. Además, en los haluros de imidazolio, que son extremadamente higroscópicos, este problema se agrava.

Además, se debería tener cuidado con el hecho de que el agua en los líquidos iónicos puede no ser inerte y que la presencia de agua puede tener una influencia significativa en las propiedades físico-químicas de los líquidos iónicos y sobre su estabilidad (algunos líquidos iónicos húmedos pueden experimentar hidrólisis con la subsiguiente formación de impurezas de protones), y sobre la reactividad del catalizador disuelto en ellos.

Así, todos los líquidos iónicos deben ser secados antes de su uso. Si no puede ser secado totalmente por alguna razón, el contenido en agua deberá siempre ser mencionado con el fin de permitir la interpretación adecuada de los resultados obtenidos. Esta puede ser determinada mediante la valoración de Karl-Fischer o mediante una determinación menos precisa llevada a cabo mediante espectroscopía de infrarrojo.

3.1.2.3. Materiales orgánicos de partida y otros volátiles

Las impurezas volátiles en los líquidos iónicos pueden tener diferentes orígenes. Pueden proceder de disolventes utilizados tanto en las etapas de extracción durante la síntesis o para disolver los materiales de partida, de los materiales de partida que no han reaccionado en la reacción de alquilación (para formar el catión del líquido iónico), o de algún compuesto orgánico volátil previamente disuelto en el líquido iónico.

En teoría, este tipo de impurezas, se pueden eliminar fácilmente de los líquidos iónicos por simple evaporación. Sin embargo, este proceso puede a veces suponer un tiempo

considerable. Los factores que influyen en el tiempo que se requiere para eliminar todos los compuestos volátiles del líquido iónico (a una temperatura y presión determinada) son: a) la cantidad de compuestos volátiles, b) sus puntos de ebullición, c) su interacción con el líquido iónico. Un ejemplo típico de esta clase de impurezas es el material de partida metilimidazolio, que se encuentra en los líquidos, basados en cationes alquilmetilimidazolio. Debido a su alto punto de ebullición (198 °C) y su fuerte interacción con el líquido iónico este compuesto es muy difícil de eliminar incluso a elevada temperatura y a alto vacío. Por esto, es importante estar seguro, mediante el uso de las condiciones de alquilación apropiadas, que todo el metilimidazolio ha reaccionado.

La presencia de bases a nivel de trazas en el líquido iónico como el metilimidazolio pueden perjudicar algunas de las aplicaciones de los líquidos iónicos (tales como catálisis bifásica). Muchos complejos catalíticos electrófilos pueden coordinarse a esta base de forma irreversible y ser así desactivados. Existen diferentes métodos para conocer la cantidad de metilimidazolio en el producto final. La mayoría de los grupos de investigación utilizan la técnica de RMN, pero el problema de esta es que su límite de detección es del 1 mol%. El análisis fotométrico descrito por Holbrey, Seddon, y Wareing tiene la ventaja de ser un método bastante rápido con un equipamiento de laboratorio estándar [Holbrey *et al.*, 2001], lo que lo hace particularmente adecuado para seguir la concentración del metilimidazolio durante la síntesis comercial de líquidos iónicos. Este método está basado en la formación de un complejo coloreado de 1-metilimidazolio con cloruro de cobre (II) y el análisis colorimétrico del mismo.

3.1.2.4. Impurezas de protones

Las impurezas de protones deben ser tenidas en cuenta para dos grupos de líquidos iónicos: aquellos que se sintetizan a través de reacciones de intercambio que suponen un ácido fuerte (a menudo el caso del [bmim][PF₆]), y aquellos que son sensibles a la hidrólisis. En el primer caso, la utilización de la forma ácida del anión supone la liberación al medio de HCl, HBr, ó HI como subproducto. En el último caso, los protones pueden originarse de la hidrólisis del anión. Cuando se utiliza la forma ácido como fuente del anión, el lavado de los líquidos iónicos sintetizados debería continuar hasta que las aguas de lavado fueran neutras,

Para muchos líquidos iónicos que sean inmiscibles con agua (y que muestren suficiente estabilidad a la hidrólisis), existe un test muy sencillo para la detección de las impurezas ácidas. Se añade agua sobre el líquido iónico y se analiza el pH del agua. Si la fase acuosa es ácida, el líquido iónico debería lavarse con agua hasta que las aguas de lavado fueran neutras ya que las trazas de ácido pueden causar la descomposición de los líquidos iónicos con el tiempo liberándose más protones al medio.

El conocimiento de este tipo de impurezas es crucial si el líquido iónico se utiliza en aplicaciones en las que se conocen que los protones pueden ejercer un efecto negativo sobre el proceso. Como ejemplo, Hernández-Fernández *et al.* (2007), desarrollaron procedimiento de neutralización de impurezas de protones que multiplicaron por la actividad de la enzima lipasa B en medios líquidos iónicos tratados con relación a medios líquidos iónicos comerciales.

3.1.2.5. Otras impurezas procedentes de una incompleta reacción de metátesis

Cuando la sal alcalina utilizada en la reacción de metátesis muestra una solubilidad significativa en el líquido iónico formado, este se puede ver contaminado por las mismas. Este hecho puede no ser un problema cuando los líquidos iónicos se aplican a fines catalíticos (ya que la presencia de un catión alcalino puede no afectar al ciclo catalítico de un catalizador compuesto por un metal de transición), tienen especial relevancia a la hora de determinar las propiedades físico-químicas de los líquidos iónicos. En este sentido es importante hacer notar que la detección de esta clase de impurezas de cationes alcalinos no es fácil con los métodos tradicionales de seguimiento para la síntesis de líquidos iónicos (tales como RMN). Por lo que se hacen necesarios procedimientos más específicos para cuantificar la cantidad de iones alcalinos hay presentes en líquidos iónicos. La cuantificación mediante cromatografía iónica es la herramienta más potente para el análisis cualitativo de este tipo de impurezas.

3.1.3. Producción comercial de líquidos iónicos

La química que sustenta la síntesis de líquidos iónicos es bastante simple, sin embargo la obtención de líquidos iónicos de cierta calidad requiere cierta experiencia y know-how. Hasta mediados de los años 90, de hecho, sólo un pequeño número de industrias especializadas y grupos de investigación eran capaces de preparar y manejar los líquidos iónicos basados en cloro aluminatos que eran los únicos líquidos iónicos disponibles en grandes cantidades. La síntesis y manejo de estos líquidos iónicos necesita técnicas especiales y muy costosas lo que dificulta la distribución comercial de los mismos.

El origen de la producción comercial de los líquidos iónicos está en el descubrimiento de líquidos iónicos más estables a la hidrólisis como los tetrafluoroboratos [Wilkes *et al.*, 1992] y hexafluorofosfatos [Fuller *et al.*, 1994], y especialmente los desarrollos de sus síntesis por metátesis de sus sales alcalinas [Suarez *et al.*, 1996]. Cuando se fundó Solvent Innovation (www.solventinnovation.com) en noviembre de 1999, la disponibilidad comercial de los líquidos iónicos era todavía muy limitada. Sólo un pequeño número de ellos podía ser adquirido de Sigma-Aldrich en cantidades superiores a 5 gramos [Tinkl, 1999].

Hoy en día, además de Merck [www.merck.com], otros suministradores ofrecen líquidos iónicos en grandes cantidades tales como Iolitec [www.iolitec.com], Fisher Scientific [www.fishersci.es], Sachem [www.sacheminc.com], BASF [www.basf.com] y Solvent Innovation [www.solventInnovati.guidechem.com] asegura una cierta disponibilidad de los diferentes líquidos iónicos en un corto plazo de entrega.

3.1.3.1. Aspectos cualitativos en la producción comercial de líquidos iónicos

En la síntesis comercial de líquidos iónicos se consideran aspectos diferentes a su preparación a nivel de laboratorio. Así al coste de las etapas del proceso de obtención se añaden significativamente al precio del producto. En un ambiente comercial la calidad del producto y la necesidad de un precio razonable tienen que ser reconciliados. Lo que interesa en la producción comercial de líquidos iónicos que el producto este bien especificado, la naturaleza de las impurezas sea conocida y la calidad del material sea absolutamente reproducible de una serie a otra. Bajo las anteriores premisas, los

productores de líquidos iónicos intentan obtener compuestos de la más alta pureza que pueda ser conseguida a un costo razonable. Para algunos líquidos iónicos se puede garantizar una pureza mayor de un 99%, sin embargo, para otros sólo de un 95%. Lo que se les ofrece a los consumidores son líquidos iónicos de una pureza determinada, teniendo entonces la oportunidad de purificar en mayor grado los productos de partidas según sus necesidades. Así quien requiera líquidos iónicos de pureza mayor de un 99,99% debería sintetizarlos o purificarlos ellos mismos.

3.1.3.2. Escalado en la síntesis de líquidos iónicos

El escalado en la producción de líquidos iónicos es uno de los campos de investigación de mayor interés. Muchas de las metodologías más utilizadas en la síntesis de líquidos iónicos son impracticables a la hora de ser aplicadas a gran escala. A veces se utilizan materiales de partida muy caros (reacciones de intercambio con plata [Wilkes *et al.*, 1992] o los tiempos necesarios para las reacciones de alquilación son muy largos, hay etapas de filtración incluidas en la síntesis o se manejan sólidos muy higroscópicos.

Los datos sobre higiene y seguridad para un líquido debe ser un criterio muy importante en la selección y exclusión de un líquido iónico específico para llevar a cabo su síntesis a gran escala. La producción comercial de líquidos iónicos a gran escala supone el registro de los productos y la creación de hojas de seguridad. Debido a que la utilización de los líquidos iónicos es relativamente reciente existen publicados pocos datos sobre aspectos relativos a higiene, seguridad y medio ambiente, aunque en estos últimos años ha aumentado considerablemente.

3.1.3.3. Precio de los líquidos iónicos

El precio de los líquidos iónicos está determinado por muchos factores tales como el de personal, costes de producción y gastos generales. Se podría pensar que el coste de producción a pequeña escala está principalmente determinado por los costes de personal y poco por los costes de material.

A gran escala, el coste del material se convierte en el más importante y el principal determinante en el precio de los líquidos iónicos. Lo que significa que el precio a gran

escala de los líquidos iónicos comerciales está determinado por el precio de la fuente de cationes y de aniones.

3.1.3.4. Propiedad intelectual de los líquidos iónicos

El precio futuro de los líquidos iónicos reflejará también los derivados de la propiedad intelectual de los mismos. Mientras actualmente, los líquidos iónicos más solicitados, los basados en aniones hexafluorofosfatos y tetrafluoroboratos están libres de patentes, muchos de los desarrollados recientemente están protegidos por las mismas.

Sin duda alguna, los líquidos iónicos basados en aniones tetrafluoroborato y hexafluoroborato tienen algunos inconvenientes para su producción a escala industrial, tales como el relativo al alto costo de sus aniones y su insuficiente estabilidad a la hidrólisis para ser aplicado en contacto con agua durante largos periodos de tiempo (con la consiguiente producción del altamente tóxico y corrosivo HF durante la hidrólisis). A este respecto, las nuevas familias de líquidos iónicos que se están desarrollando deberían ser protegidas respecto a sus posibles patentes.

3.1.4. Propiedades físicas y químicas de los líquidos iónicos

La propiedad más importante de los líquidos iónicos que ha sido responsable de un número de aplicaciones de estos es su baja presión de vapor. En los líquidos iónicos, la débil atracción coulombica entre iones limita la formación de pares iónicos necesarios para que las sales se volatilicen, resultando en una presión de vapor extremadamente baja o prácticamente inexistente. Esta característica les confiere una manejabilidad excepcional al evitar su evaporación, lo que a su vez facilita la recuperación de los productos o sustratos disueltos en ellos mediante técnicas como la destilación. Esto se aplica en diversos procesos, como la catálisis, las extracciones líquido-líquido, entre otros. Estas propiedades le han hecho ser firmes candidatos para la sustitución de los disolventes orgánicos volátiles. Otras de propiedades de gran interés y que han determinado también las posibles aplicaciones de los líquidos iónicos se comentan a continuación:

Bajo punto de fusión: Normalmente por debajo de la temperatura ambiente. También se habla de líquidos iónicos cuando el punto de fusión se encuentra por debajo de los 100 °C.

Densidad: La densidad de los líquidos iónicos suele ser superior a la del agua, encontrándose entre 1,12 g/cm³ y 2.24 g/cm³.

Viscosidad: En general la viscosidad de los líquidos iónicos es superior a la del agua y se encuentra entre 10-500cP. La temperatura [Baker *et al.*, 2001], las impurezas que contenga el líquido iónico [Seddon *et al.*, 2000] y la composición aniónica tiene una gran influencia en la viscosidad de los líquidos iónicos. La viscosidad suele disminuir en la siguiente serie aniónica: [Cl⁻] > [PF₆⁻] > [BF₄⁻] ≈ [NO₃⁻] > [NTf₂⁻].

Propiedades electroquímicas: La gran estabilidad de los procesos de oxidación-reducción y su buena conductividad iónica hacen a los líquidos iónicos buenos candidatos como electrolitos en baterías u otras aplicaciones electroquímicas.

Capacidad disolvente de los líquidos iónicos: Los líquidos iónicos se suelen considerar como disolventes polares debido a su naturaleza iónica. Sin embargo, la composición orgánica de algunos cationes y aniones le permiten solvatar moléculas apolares, pudiendo así presentar unas propiedades duales en cuanto a la solvatación de sustratos. Así, los líquidos iónicos han demostrado disolver un amplio número de especies, tanto orgánicas, como inorgánicas o compuestos organometálicos [Aki *et al.*, 2001; Behar *et al.*, 2001; Bonhôte *et al.*, 1996; Carmichael and Seddon, 2001; Koel, 2000; Muldoon *et al.*, 2001].

Solubilidad en disolventes orgánicos y en agua: Debido a su naturaleza dual, los líquidos iónicos se pueden solubilizar tanto en agua como en disolventes orgánicos dependiendo de su composición aniónica y catiónica. La inmiscibilidad en uno u otro tipo de disolventes podría ser interesante cuando se busca la creación de un sistema bifásico. La naturaleza iónica les da a los líquidos iónicos un fuerte carácter hidrofílico que los hace muy higroscópicos. Los cationes con sustituyentes hidrófobos o aniones con características hidrofóbicas como la bistriflimida va a hacer que el líquido iónico sea más hidrófobo y por lo tanto insoluble en agua [de los Ríos, 2008c]

Solubilidad de gases: La buena solubilidad de gases como el H_2 , CO y O_2 hace a los líquidos iónicos interesantes como disolventes en hidrogenaciones catalíticas, carbonilaciones, hidroformilaciones y oxidaciones aeróbicas [Sheldon, 2001]

pH: Su *acidez varía* y va a depender de la naturaleza química de los líquidos iónicos

Color: Son *incoloros en estado puro*. La coloración que pueden presentar se deben en la mayoría de los casos a las impurezas que puedan contener, aún siendo a muy bajas concentraciones.

Estabilidad térmica: Los líquidos iónicos se encuentran en estado líquido a temperatura ambiente. Una subida de temperatura sobre su estado líquido no genera evaporación como los disolventes convencionales, sino que acaba descomponiendo a temperatura altas, que puede llegar a los 350-400 °C. Su estabilidad térmica, al igual que el resto de sus propiedades va a depender de la naturaleza química del líquido iónico. En general, los líquidos iónicos que contienen aniones más débilmente coordinados son más estables a altas temperaturas [Bonhôte *et al.*, 1996; Holbrey and Seddon, 1999a; Huddleston *et al.*, 2001; Ngo *et al.*, 2000; Takahashi *et al.*, 1999]. Su estabilidad térmica ha determinado una de sus aplicaciones como lubricantes.

Estabilidad química: Los líquidos iónicos son en general no inflamables, ya que no desprenden vapores, y normalmente químicamente inertes.

Estabilidad química: Los líquidos iónicos son compuestos no inflamables y químicamente inertes [Gordon, 2001], con excepción de los cloro-aluminatos, que son muy sensibles a la humedad y en presencia de agua reaccionan produciendo HCl y un precipitado blanco, que se redissuelve por agitación [Zawodzinski and Osteryoung, 1990]. También el anión hexafluorofosfato [PF_6^-], que tienen como problema particular la formación lenta de HF por descomposición del anión, especialmente por calentamiento si el líquido iónico no está completamente libre de trazas de ácido.

3.2. APLICACIONES DE LOS LÍQUIDOS IÓNICOS

La posibilidad de modular las propiedades físicas y químicas de los líquidos iónicos mediante la modificación de la naturaleza de sus cationes y aniones, así como sus propiedades únicas y especiales, ha dado lugar a un gran número de aplicaciones potenciales de los líquidos iónicos algunas de las cuales se enumeran a continuación.

3.2.1. Disolventes en reacciones químicas

Son propiedades como disolventes son muy interesantes ya que tiene la capacidad de solventar tanto especies polares como especies apolares. Además, su baja presión de vapor lo ha catapultado a ser posible sustituyentes de los disolventes orgánicos volátiles. Por todo ello se han empleado como disolventes en reacción química y bioquímica. Uno de los ejemplos más interesantes son las reacciones de hidrogenación. Chauvin *et al.* (1995b) fueron los primeros que emplearon líquidos iónicos en este tipo de reacción y llevaron a cabo una hidrogenación catalítica de 1-penteno, en medios líquido iónico, empleando como catalizador el complejo $[\text{Rh}(\text{nbd})(\text{Ph}_3\text{P})_2][\text{PF}_6]$ [(nbd)= norbonadieno] disuelto en $[\text{bmim}][\text{PF}_6]$ o $[\text{bmim}][\text{SbF}_6]$. Este sistema de reacción aumento la velocidad de reacción en más de 5 veces que cuando se utilizó acetona como disolvente.

3.2.2. Disolventes en reacciones biocatalíticas

Las reacciones enzimáticas sintéticas catalizadas por enzimas hidrolasas, requieren de medio de reacción de bajo contenido en agua con el fin de minimizar la reacción hidrolítica del producto de reacción y aumentar la selectividad de la reacción. También muchas reacciones enzimáticas emplean sustratos apolares y necesitan de medios orgánicos para su disolución. Por todos ello se ha desarrollado una química enzimática en medios anhidros que emplean disolventes orgánicos como hexano tert-butanol. Todos los disolventes orgánicos no son adecuados ya que algunos de ellos pueden interaccionar fuertemente con las enzimas desactivándolas. Estudios relativamente recientes demostraron que los líquidos iónicos podían ser sustitutos adecuados a los disolventes orgánicos en reacción enzimáticas, mejorando en algunos casos la actividad y selectividad de la reacción [Toral *et al.*, 2007; de los Ríos *et al.*, 2007a] e incluso modificando la conformación catalítica de la enzima hacia una conformación más activa [Galai *et al.*, 2015]. Los líquidos iónicos como medios de reacción en reacciones

enzimáticas han permitido obtener compuestos de interés farmacéutico [de los Ríos *et al.*, 2007b] y químico [de los Ríos *et al.*, 2008d], incluso ha permitido la inmovilización de lipasas obteniendo derivados enzimáticos muy activos, incluso de mayor actividad que la enzima libre [Kacem *et al.*, 2020; Escudero *et al.*, 2020].

3.2.3. Catalizadores

Los líquidos iónicos también han mostrado actividad catalítica que ha sido explotada en diferentes aplicaciones. Los líquidos iónicos que se fundamentan en cloroaluminatos, con aniones como $[\text{AlCl}_4^-]$ o $[\text{AlCl}_7^-]$, destacan por su marcada capacidad como ácidos de Lewis. Como resultado, se erigen como alternativas no volátiles a los catalizadores ácidos de Lewis tradicionales, como el AlCl_3 , y a los ácidos de Brønsted, que incluyen opciones tan peligrosas como el HF. El líquido iónico $[\text{emim}^+][\text{AlCl}_7^-]$ se ha empleado en la acilación de Friedel-Crafts de tolueno, clorobenceno y anisol con cloruro de acetilo [Adams *et al.*, 1998]. El líquido iónico $[\text{bmim}^+][\text{PF}_6^-]$ se han empleado en la síntesis de la pravadolina sin la necesidad de emplear un ácido de Lewis y la subsiguiente generación de residuos de aluminio [Earle *et al.*, 2000].

3.2.4. Agentes de extracción

Debido a las buenas propiedades como disolvente tanto de compuestos polares como apolares la utilización de los líquidos iónicos como agentes de extracción es una de sus principales aplicaciones. Los líquidos iónicos se han empleado en extracciones líquido-líquido para la extracción de compuestos orgánicos [Hernandez-Fernández *et al.*, 2008a; Hernández-Fernández *et al.*, 2010; de los Ríos *et al.*, 2017] y sales metálicas [de los Ríos *et al.*, 2010, de los Ríos *et al.*, 2013].

3.2.5. Agentes rompedores de azeótropos

Algunos líquidos iónicos han mostrado comportamiento como agentes rompedores de azeótropos [Jork *et al.*, 2004, 2005; Seiler *et al.*, 2004]. Su incorporación en procesos de destilación ofrece las siguientes ventajas:

- (1) Tienen una presión de vapor muy baja y son estables frente a la temperatura luego la contaminación del destilado es mínima.

- (2) Podemos seleccionar el líquido iónico más adecuado mediante la adecuada combinación del anión y catión de los líquidos iónicos.

3.2.6. Fase líquida en membranas líquidas iónicas soportadas

Los líquidos iónicos han sido empleados como fase activa en membranas líquidas soportadas en procesos de separación de compuestos orgánicos [Hernández-Fernández F.J. *et al.*, 2007b; Hernández-Fernández F.J. *et al.*, 2009; de los Ríos *et al.*, 2008 a,b; de los Ríos *et al.*, 2009; Hernández-Fernández F.J. *et al.*, 2008; Hernández-Fernández F.J. *et al.*, 2009b], sales inorgánicas [Baiza *et al.*, 2019] y sales metálicas [de los Ríos *et al.*, 2013]. Los líquidos iónicos han sido soportados en membranas porosas como nylon o formando membranas densas con polímeros orgánicos como el PVC generando las conocidas membranas poliméricas de inclusión o ionogel. Las membranas poliméricas de inclusión basadas en líquidos iónicos mejoran la estabilidad de las membranas líquidas soportadas, frente a la pérdida de fase activa de la membrana [Hernández-Fernández F.J. *et al.*, 2012; Tomás Alonso *et al.*, 2017], aunque en ella los fenómenos de transferencia transcurre a menor velocidad.

3.2.7. Electrolitos en la industria electroquímica

La elevada conductividad iónica de los líquidos iónicos y su estabilidad en un amplio rango de potenciales de oxidación-reducción le han permitido tener aplicaciones en numerosos campos de la electroquímica. Así se han aplicado como electrolitos en síntesis electroquímica, disolvente en electrodeposición de metales, baterías, supercondensadores, pilas de combustible microbianas, células solares y músculos artificiales y dispositivos electrocrómicos (Ito y Nohira, 2000; Trulove and Mantz, 2003; Buzzeo *et al.*, 2004a; Hernández-Fernández *et al.*, 2015, 2016; Salar-García *et al.*, 2016; Ortiz *et al.*, 2015).

3.2.8. Lubricantes

Las principales características para considerar a los líquidos iónicos como buenos lubricantes son: su alta estabilidad térmica, su baja volatilidad y su alta viscosidad comparada con los fluidos convencionales. Los líquidos iónicos se han estudiado

agentes lubricantes en contactos metal-metal, metal-cerámico y cerámico/cerámico (Ye *et al.*, 2001; Liu *et al.*, 2002; Lu *et al.*, 2004; Phillips and Zabinski, 2004).

3.3. LOS LÍQUIDOS IÓNICOS EN LA INDUSTRIA

Muchas de las aplicaciones de los líquidos iónicos ya se han industrializado. A continuación, se presentan algunos ejemplos de la aplicación industrial de líquidos iónicos [Hernández-Fernández *et al.* 2008c,d]

1) El **Instituto Francés del Petróleo (IFP)** ha empleado un líquido iónico como disolvente para la reacción de dimerización de alquenos empleando Ni como catalizadore. La reacción se realiza en un sistema bifásico en el que lo productos se separan en una segunda fase mientras que el catalizador de Ni se queda disuelto en la dase líquido iónico. El proceso es conocido como proceso DIFASOL.

2) **DEGUSSA**, ha planteado el uso de líquido iónicos en pinturas para reducir el uso de disolventes orgánicos en las mismas.

3) **EASTMANN** obtiene ácido acético a partir de metanol y monóxido de carbono. La reacción emplea un catalizador de rodio inmovilizado en un líquido iónico.

3.4. EVALUACIÓN DE LA TOXICIDAD DE SUSTANCIAS QUÍMICAS

La información toxicológica de las sustancias químicas es abundante, pero a menudo dispersa y no siempre bien sintetizada. La Ficha de Datos de Seguridad (FDS) ofrece la primera información disponible, pero en muchos casos esto no es suficiente. Otra de las fuentes de información es la bibliografía científica disponible. Ésta será fundamental en la evaluación de los líquidos iónicos debido a la escasa información facilitada en las FDS debido a la relativa reciente aparición de estos.

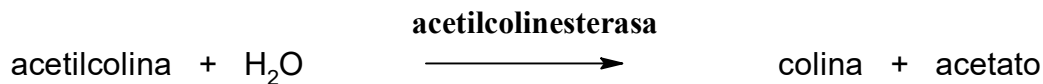
Los riesgos para la salud y el medio ambiente en el caso de las sustancias químicas se han medido principalmente mediante los siguientes ensayos:

- a) Toxicidad *in vitro* empleando la enzima acetilcolinesterasa
- b) Bioacumulación
- c) Toxicidad en células de mamífero
- d) Toxicidad en animales
- e) Biodegradabilidad

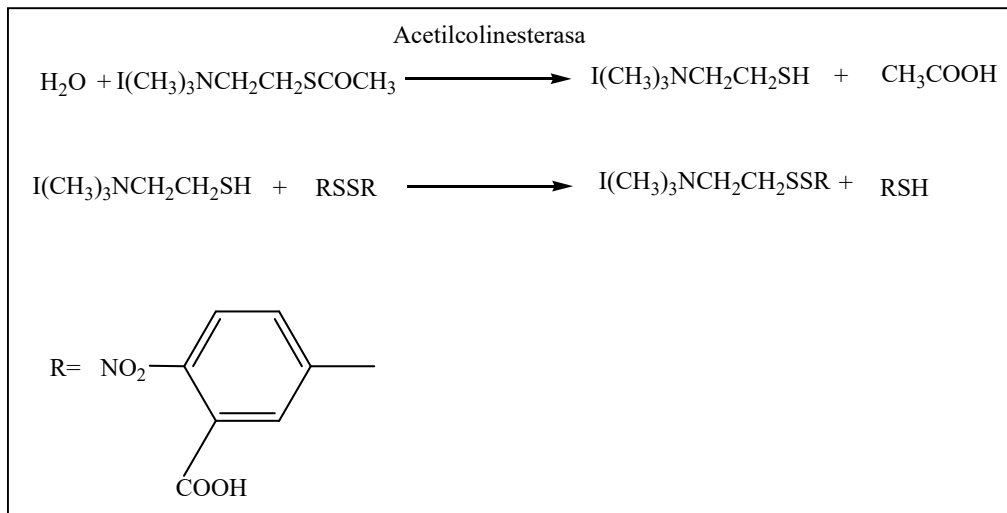
A continuación, se describen los ensayos anteriores:

a) Toxicidad *in vitro* empleando la enzima acetilcolinesterasa

Los ensayos *in vitro* nos permiten determinar la toxicidad fuera de un organismo vivo, en un ambiente controlado. Para este tipo de ensayos habitualmente se emplea la enzima acetilcolinesterasa. La acetilcolinesterasa es una enzima fundamental en organismos superiores cuya función es hidrolizar la acetilcolina y de esta forma inhibe la actividad de esta. Muchos insecticidas (organofosfatos y carbamatos) tienen como biomolécula objetivo la acetilcolinesterasa. Al ser inhibida la acetilcolinesterasa y no destruirse la acetilcolina se produce una hiperactividad nerviosa que puede causar la muerte del individuo.



La toxicidad *in vitro* empleando la enzima acetilcolinesterasa emplea el método espectrofotométrico de Ellman [Ellman *et al.*, 1961]. Básicamente la técnica se basa en medir la actividad de la enzima mediante colorimetría a 412 nm. La enzima hidroliza la acetiltiocolina a tiocolina que reacciona con el ácido 5-5'-ditio-bis-2-nitrobenzoico (DTNB) formando una especie coloreada que adsorbe a 412 nm. El ensayo colorimétrico se basa así en la reducción del reactivo colorimétrico (DTNB).



La toxicidad se representa como la EC50 que es la concentración del tóxico que disminuye el 50% la luminiscencia (EC50) [Onorati *et al.*, 2004]. A veces se expresa en escala logarítmica (*log EC50*).

b) Coefficiente de reparto octanol-agua. Bioacumulación.

El coeficiente de reparto octanol-agua (P) de una sustancia se define como la relación de la concentración molar de una sustancia química (C) en 1-octanol y agua a concentraciones bajas. Su expresión matemática es la siguiente [de los Ríos *et al.*, 2008a]:

$$K_{i,ow} = P = \frac{C_i^o}{C_i^w}$$

Así, cuanto mayor sea P más hidrófoba será la sustancia en cuestión. Cuando mayor sea el valor de P mayor será la capacidad de un compuesto de atravesar las membranas que son hidrófobas y más capacidad de acumulación en los tejidos hidrófobos (bioacumulación).

c) Ensayos de citotoxicidad

La toxicidad *in vitro* de una sustancia se puede estudiar en células de mamífero tales como células de leucemia de rata (IPC-81), células de glioma de rata (C6) y células de carcinoma de colon humano (CaCo-2) [Ranke *et al.*, 2004].

Células de leucemia de rata (IPC-81):

Para la determinación de la toxicidad de las sustancias se utiliza un ensayo colorimétrico que emplea la sal monosódica de 2-(4-yodofenil)-3-(4-nitrofenil)-5-(2,4-disulfofenil)-2H-tetrazolio (WST-1) [Ishiyama *et al.*, 1995]. Para el mismo se utilizan unas microplacas de 96 pocillos. Cada placa contiene blancos (sin células), controles (sin tóxicos) y dos series de dilución de la sustancia a testar con varias réplicas cada uno. Las células se añaden a las placas en una concentración determinada (células/mL) y se cultivan durante 48 h en la sustancia a testar. Después de 44h, se le añaden unos mL de reactivo (WST-1) (diluido 1:4 con solución tampón de fosfato) y se incuban las células durante 4 h más.

La capacidad de reducir el reactivo WST-1 se observa fotométricamente a 450 nm y determina las células viables. Se calcula la supervivencia celular como el porcentaje de células viables (medida como la reducción de WST-1) en las que se ha testado la sustancia en relación con los controles.

$$\%Supervivencia = \frac{(Absorbancia_problema)}{Absorbancia_control} \times 100$$

La concentración de citotóxico a la que se reduce la supervivencia un 50% se conoce como concentración efectiva 50 o EC₅₀.

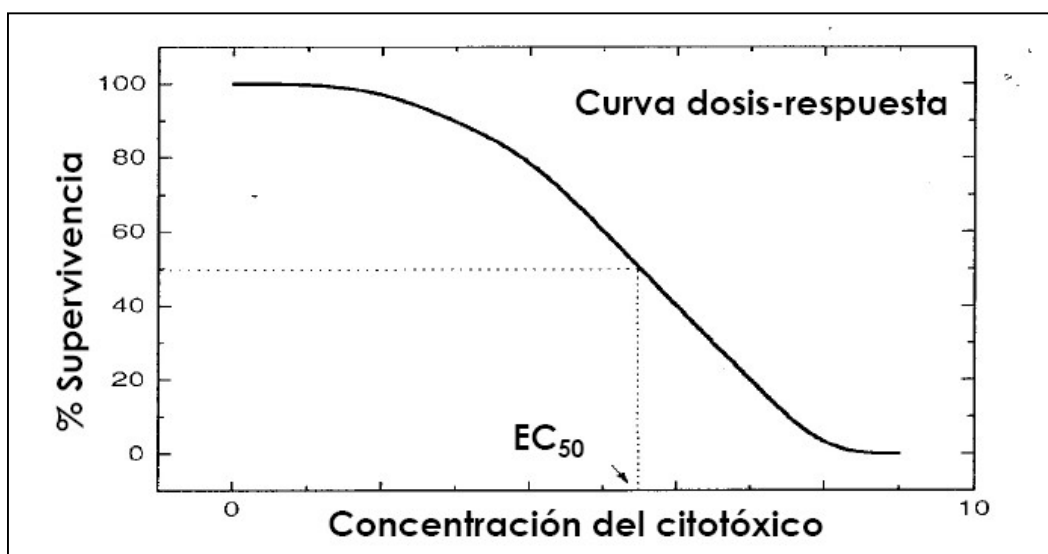


Figura 3.5. Obtención de los valores EC₅₀, a partir de una curva dosis-respuesta.

Células de glioma de rata (C6):

La toxicidad de sustancias en células de mamífero, también se puede determinar utilizando células de glioma de rata C6. La supervivencia celular se realiza de la misma forma que para las células IPC-81 con la única variación de que, en este caso, se cultivan durante 24 h antes de la adición de sustancias y siendo el tiempo de incubación total de 72h incluidas las 4 horas con WST-1 [Ranke *et al.*, 2004, Stasiewicz *et al.*, 2008].

Células de carcinoma de colon humano (CaCo-2):

Para determinar la toxicidad de una sustancia a partir de las células *CaCo-2* se añaden un número determinado de células a cada pocillo de una placa. Después de los tres primeros días, una vez que las células se encuentran en su fase de crecimiento exponencial, se añaden los tóxicos al medio consiguiendo en el mismo un rango de concentraciones determinada. Al cuarto día se retira el medio con el tóxico y se añade medio fresco y el reactivo colorimétrico que en este caso es el bromuro de (3-(4,5-dimetiltiazol-2-il)-2,5-difenil tetrazolio) (MTT) como reactivo [Mossman, 1983], que es soluble y da lugar a una solución de color amarillo. Al ponerse en contacto con las células vivas durante 4 horas y mediante la aplicación de la enzima succinato deshidrogenasa pasa a formazan, compuesto insoluble de color azul-violeta que posteriormente se solubiliza y se mide la absorbancia a 570nm. [Jaitely *et al.*, 2008]. De igual forma se obtiene el % de supervivencia celular en función de la concentración del tóxico, con esto la curva dosis-respuesta y el EC₅₀.

d) Ecotoxicidad

Por lo general, los estudios de ecotoxicidad se emplean para identificar los impactos agudos o crónicos de compuestos químicos en organismos representativos, con un enfoque particular en organismos acuáticos, como las bacterias marinas bioluminiscentes (*Vibrio fischeri*), pulgas de agua (*Daphnia magna*), algas (*Pseudokirchneriella subcapitata*, *Desmodesmus Subspicatus*, *Chlorella vulgaris*, *Skeletoma*) y peces (*Danio rerio*, *Oncorhynchus mykiss*, *Pimephales promelas*, *Brachydanio rerio*, *Oryzias latipes*, *Cyprinodon variegatus*, *Lepomis macrochirus*) [Boluda *et al.*, 2002]. Estos organismos normalmente tienen ciclos de vida cortos y

tiene rutas bioquímicas similares a los organismos superiores [García, 2004]. Vamos a explicar con un poco de más detalle algunos de estos ensayos por la implicación que tienen en la presente Tesis Doctoral.

Ensayo Microtox

El ensayo Microtox[®], (ISO 11348-3, 1998) es empleado para la evaluación de muestras medioambientales. El ensayo se fundamenta en la reducción de la bioluminiscencia de la bacteria marina *Vibrio fischeri* en presencia de agentes tóxicos.

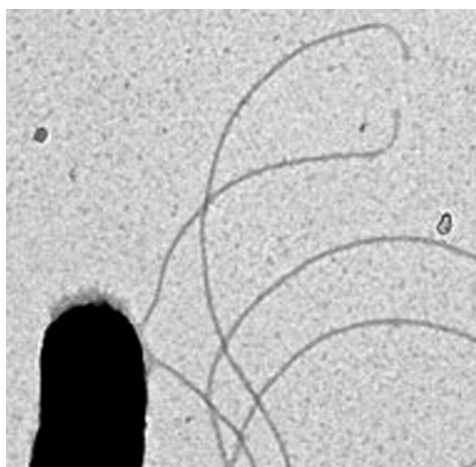
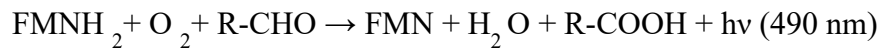


Figura 3.6. Bacteria marina *Vibrio fischeri*.

Existe una buena correlación entre el ensayo de toxicidad agua Microtox[®] y otros ensayos de toxicidad convencionales. En este sentido, se ha evidenciado que el ensayo de toxicidad en *V. fischeri* tiene la capacidad de anticipar la toxicidad para otros organismos acuáticos [Blum y Speece, 1990; Chen y Quee Hee, 1995; Ribo y Kaiser, 1983; Zhao et al., 1995; Arufe et al., 2004]. El ensayo Microtox[®] ha demostrado ser particularmente sensible y ha mostrado una correlación destacada con los resultados obtenidos en peces y en el organismo *Daphnia magna*. Desde 1984, se ha convertido en una de las pruebas recomendadas por la Agencia de Protección Ambiental (EPA, por sus siglas en inglés) para evaluar la toxicidad aguda en muestras de agua, junto con ensayos en dafnidos [García, 2004].

El **fundamento del ensayo** se basa en la luminiscencia de la bacteria *Vibrio fischeri* (*Photobacterium phosphoreum*). La luminiscencia se produce por una reacción química en la que se oxida riboflavin fosfato reducido (FMNH₂), en presencia de oxígeno y un

aldehído alifático catalizada por la enzima luciferasa bacteriana emitiendo luz verde-azulada, $\lambda_{\text{max}} = 490\text{-}505 \text{ nm}$ [Lin, J-W. *et al.*, 1993]. La reacción en conjunto se muestra a continuación:



Claro, aquí tienes una versión alternativa:

La reacción de bioluminiscencia bacteriana está estrechamente vinculada al sistema de transporte de electrones en el proceso de respiración celular. En consecuencia, una disminución en la bioluminiscencia refleja una reducción en la actividad de la respiración celular. Los contaminantes, ya sean de naturaleza física, química o biológica, tienen un impacto en la respiración celular al alterar la proporción de síntesis de proteínas y lípidos, lo que a su vez modifica el nivel de emisión de luz. La toxicidad se cuantifica mediante la concentración efectiva 50 (CE50), que representa la concentración del agente tóxico capaz de causar una disminución del 50% en la emisión inicial de luz [Onorati *et al.*, 2004].

Toxicidad en *Daphnia magna*

Dentro del grupo de los cladóceros, las especies pertenecientes al género *Daphnia* son ampliamente reconocidas a nivel mundial en las regulaciones ambientales debido a su notoria sensibilidad y eficacia. Estas diminutas "pulgas de agua" (crustáceos emparentados con los cangrejos) miden entre 1 y 3 mm y habitan en lagos y lagunas, donde se alimentan de algas microscópicas y, a su vez, sirven como fuente de alimento para los peces.

Su característica más destacada radica en su excepcional sensibilidad a diversas sustancias tóxicas. Pueden detectar la presencia de minúsculas cantidades de mercurio en el agua (tan solo 0.005 mg), así como numerosos pesticidas y residuos industriales en concentraciones aún más bajas.

Se pueden llevar a cabo dos tipos de ensayos utilizando *Daphnia magna*: los ensayos de toxicidad aguda y los ensayos de toxicidad crónica. En los ensayos de toxicidad aguda,

se evalúa la concentración de una sustancia tóxica que provoca la muerte o la inmovilización del 50% de la población (LC50 o IC50) en un período de 48 horas. En casos en los que los ensayos de toxicidad aguda no produzcan ningún efecto, se pueden emplear ensayos de toxicidad crónica que se basan en la evaluación de la capacidad reproductiva o el crecimiento de los individuos.

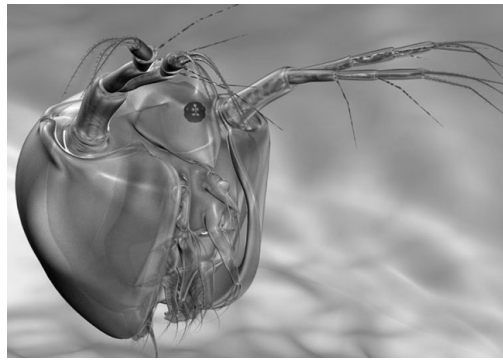


Figura 3.7 Pulga de agua *Daphnia magna*.

Test de toxicidad aguda:

Para los ensayos de toxicidad aguda se emplea un procedimiento estándar [Sprague, 1969]. En el ensayo estándar se emplean neonatos de *D. magna* (24 h de edad). Se colocan 8 neonatos en cada uno de los 30 vasos de precipitados de 250 ml utilizados. De esta forma se pueden realizar 5 réplicas de 6 ensayos diferentes (el ensayo control más cinco concentraciones diferentes). El número de neonatos vivos o muertos se anota tras 24 y 48h de ensayo. Los neonatos que han perdido la movilidad o el latido se consideran como muertos. Los ensayos se realizan a una temperatura de $20 \pm 1^{\circ}\text{C}$ con un fotoperíodo de 16:8-h luz:oscuridad.

Test de toxicidad crónica:

El test de toxicidad crónica para *D. magna* sigue los procedimientos recomendados por la U.S. EPA [Environmental Protection Agency. 1993]. Se utilizan para este ensayo neonatos (24h de edad). Se realizan 10 réplicas con un neonato por vial por cada una de las seis concentraciones estudiadas (control más cinco concentraciones). Cada día se transfieren los organismos a un medio fresco y se cuentan los neonatos. El ensayo finaliza cuando las hembras del experimento control completan su tercera prole o a los

21 días. El compuesto tóxico, puede afectar sobre al número de neonatos de la primera prole, al número total de neonatos y/o al tamaño medio de la prole.

e) Toxicidad en animales

La toxicidad en animales se determina según su efecto después de un determinado período de tratamiento. En el caso de mamíferos se reduce a 24 h, sin embargo, para peces el tiempo de exposición puede ser de hasta 96 h.

Se dividen varios grupos con una cierta cantidad de animales cada uno. A cada grupo se le administra por vía intraperitoneal (para mamíferos) o directamente en el agua (para peces) una determinada concentración de sustancia química. Las dosificaciones de prueba se basan en el rango preliminar de ensayos ya realizados. Se observan los efectos de los tóxicos sobre los animales.

En peces, el número de los muertos se registra a las 1, 12, 24, 48, 72 y 96 h. También se puede observar reducción de la actividad general en los individuos, pérdida de equilibrio, natación errática y permanencia inmóvil en el nivel medio del agua durante períodos prolongados. La toxicidad se expresa como la concentración media mortal (LC50) que es la concentración en el agua que mata el 50 % de la población dentro de un período continuo de exposición de 96 h [Pretti *et al.*, 2006].

Para mamíferos, los resultados mostrarán si la exposición aguda a la sustancia química ha causado daño al animal. Se pueden observar diversos signos adversos clínicos como hiperactividad o postura anormal. La toxicidad aguda se expresa como la dosis media mortal (LD50) que es la dosis de una sustancia química, que mata el 50 % de los organismos de prueba [Yu *et al.*, 2009].

f) Biodegradabilidad

La biodegradabilidad se relaciona directamente con la posibilidad de acumulación y persistencia en el medio ambiente de una sustancia. La biodegradabilidad puede analizarse mediante el test de la “botella cerrada”. En este ensayo se mide la depleción del O₂ disuelto en días y se expresa como % del máximo teórico [García *et al.*, 2005].

Los compuestos que alcanzan un nivel de biodegradación mayor a un 60% son llamados “fácilmente degradables”.

3.5. TOXICIDAD DE LIQUIDOS IÓNICOS

La principal característica para la consideración de los líquidos iónicos como disolventes verdes es su baja presión de vapor lo que se evita de esta forma la contaminación del medio aéreo y su asimilación a través de este. Sin embargo, algunos IL se producen proceden de fuentes no renovables, son poco biodegradables en el medio ambiente y sus pruebas toxicológicas hace la salud y el medioambiente arrojan resultados desfavorables [Hernández Fernández *et al.*, 2022; Kebaili *et al.*, 2020; Missoun *et al.*, 2020]. Como características interesantes de los líquidos iónicos cabe también destacar la capacidad de diseño de estos disolventes para obtener las propiedades deseables en los mismos incluida su toxicidad. Para ellos es necesario un conocimiento más profundo de su toxicidad y el establecimiento de modelos estadísticos que nos ayuden a predecir la toxicidad de los líquidos iónicos. Por otra parte, algunas empresas han comenzado su uso industrial, siendo BASIL™ de BASF probablemente el más ampliamente conocido. En consecuencia, para una producción mayor (más de una tonelada métrica por año), Se debe proporcionar información de seguridad en los IL, de acuerdo con la legislación vigente, como, para ejemplo, la demanda del Reglamento REACH de la Unión Europea [REACH, 2006]. Por tanto, la utilización de estos nuevos disolventes a escala industrial necesita un riguroso estudio de toxicidad. Debido a su aparición relativamente reciente, la información disponible en las fichas de datos de seguridad es limitada y la información principal se encuentra disponible en la literatura científica.

Los sistemas biológicos que se han empleado principalmente para la evaluación de la toxicidad de los líquidos iónicos son el ensayo de inhibición de la acetilcolinesterasa, pruebas de toxicidad hacia bacterias (p. ej., *Vibrio fischeri*), algas verdes (p. ej., *Pseudokirchneriella subcapitata*), cultivos celulares, plantas (p. ej., trigo, *Triticum aestivum*), peces (por ejemplo, *Danio rerio*), crustáceos (por ejemplo, *Daphnia magna*) y animales (por ejemplo, rana, *Rana nigromaculata*) [Álvarez-Guerra *et al.*, 2011]. Se han encontrado diferentes grados de toxicidad de los LIs, en comparación con disolventes empleados comúnmente en la industria química, lo que podría explicarse

por la enorme variedad de líquidos iónicos. Muchos de los líquidos iónicos analizados son irritantes y tienen una toxicidad similar a la de los disolventes orgánicos clásicos [Docherty *et al.*, 2005]. Sin embargo, algunos estudios han demostrado que es posible diseñar líquidos iónicos no tóxicos y biodegradables mediante una selección adecuada del catión y el anión constituyentes.

En este apartado vamos a revisar los aspectos más relevantes de la toxicidad de líquidos iónicos que nos ayudarán al planteamiento y al estudio realizado en la presente Tesis Doctoral.

Toxicidad in vitro usando la enzima acetilcolinesterasa

Arning *et al.* (2008) realizaron un estudio sobre la inhibición de AChE por diferentes IL. De las 19 tipos de aniones estudiados, solo se encontró una inhibición significativa para el fluoruro, el hexafluoroantimonato y el hexafluorofosfato, con valores logarítmicos de IC₅₀ de 575 μM (F^-), 219 μM (SbF_6^-) y 145 μM (PF_6^-), respectivamente, y se encontró que el anión 1-dodecilsulfato era un inhibidor débil (log IC₅₀ = 912 μM) de la actividad de las enzimas. Los cationes no aromáticos y con grupos polares en las cadenas laterales tales como hidróxido, éter o nitrilo redujeron la inhibición de la enzima AChE. Los autores identificaron los cationes dimetilaminopiridinio y quinolinio como fuertes inhibidores de la enzima, con valores de log IC₅₀ de 0,6, 0,99, 0,5 y <0 μM para el cloruro de 4-(dimetilamino)-1-butilpiridinio, 4-(dimetilamino)- bromuro de 1-etilpiridinio, cloruro de 4-(dimetilamino)-1-hexilpiridinio y bromuro de 1-octilquinolinio, respectivamente. Por el contrario, se encontró que el catión morfolinio inhibía débilmente la enzima o incluso era inactivo con valores de log IC₅₀ de alrededor de 3 μM .

Bioacumulación

El coeficiente de partición octanol-agua (P) se utiliza ampliamente como una medida cuantitativa de la capacidad de las sustancias para permear a través de las membranas biológicas y acumularse en tejidos hidrofóbicos. En consecuencia, un coeficiente de partición más alto indica un mayor potencial de bioacumulación y una mejor capacidad de los compuestos para penetrar la piel, lo que aumenta su toxicidad. La exposición reducida a los líquidos iónicos no solo se debe a su prácticamente nula presión de vapor,

sino también a una potencialmente menor bioacumulación de los líquidos iónicos. Este parámetro ha sido evaluado en una amplia variedad de líquidos iónicos y, en general, es significativamente menor que el de los solventes orgánicos convencionales debido a la naturaleza iónica inherente a los líquidos iónicos [Ropel et al., 2005].

En la Tabla 3.1 se recogen los valores de log EC50 de mayor a menor toxicidad y los valores del coeficiente de partición octanol-agua (log P) para los IL que son más bajos que los valores para compuestos orgánicos volátiles comunes [Ropel *et al.*, 2005, Lide, 2004, Docherty y Kulpa, 2005, Kaiser y Palabrica, 1991]. Los IL sustituidos con butilo tienen valores de coeficiente de reparto octanol-agua mucho más bajos ($\log P \approx -2,4$) que los IL sustituidos con octilo y hexilo ($\log P \approx 0,08$) y, por lo tanto, son más solubles en agua. Por lo tanto, aquellos IL con cadenas de alquilo más largas en los cationes fueron más tóxicos, incluso más tóxicos que los disolventes industriales de uso común. Estos valores coincidieron con los resultados de EC50 obtenidos por Docherty y Kulpa (2005) para IL y por Kaiser y Palabrica (1991) para COV en pruebas de toxicidad aguda de 30 minutos para *Photobacterium phosphoreum*. Cuanto mayor sea la hidrofobicidad del líquido iónico, mayor será su capacidad para penetrar las membranas biológicas y mayor su toxicidad.

Tabla 3.1. Peso Molecular (M), coeficiente de reparto octanol-agua (log P) y toxicidad expresada como log EC50 (ppm) para varios líquidos iónicos y otros disolventes orgánicos volátiles.

Compuesto	M	log P	log EC50
[C ₈ C ₁ Im][Br]	275,19	~0,8	0,07
[C ₈ C ₁ Pyr][Br]	286,19	~0,8	0,25
[C ₆ C ₁ Im][Br]	247,14	~0,15	0,81
o-Xylene	106,18	3,12	0,97
[C ₆ C ₁ Pyr][Br]	258,14	~0,15	1,48
Fenol	94,12	1,48	1,49
Tolueno	92,15	2,73	1,50
Metil isobutil cetona	100,16	1,31	1,90
[C ₄ C ₁ Pyr][N(CN ₂) ₂]	216,22	~ -2,4	1,99

Benceno	78,12	2,13	2,03
[C₄C₁Pyr][Br]	230,09	~ -2,4	2,12
Etilen glicol	62,07	1.2	2,79
[C₄C₁Im][Cl]	174,63	-2.4	2,95
[C₄C₁Im][N(CN₂)₂]	205,22	~ -2.4	2,99
Cloroformo	119,38	1.97	3,08
[C₄C₁Im][Br]	219,08	-2.48	3,35
Dichlorometano	84,93	1.25	3,40
Acetona	58,08	-0.24	4,29
Metanol	32,04	-0.74	5,00

Toxicidad en células de mamíferos

La toxicidad in vitro de una sustancia se puede estudiar en células de mamíferos, como células de rata de leucemia (IPC-81), células de rata de glioma (C6) y células de carcinoma de colon humano (CaCo-2).

Células de leucemia de rata (IPC-81)

Stasiewicz *et al.* (2008) estudiaron la toxicidad en células de rata de leucemia promielocítica IPC-81 de líquidos iónicos compuestos por cationes de 1-alcoximetil-3-hidroxipiridinio y aniones de acesulfamato, sacarinato y cloruro. Los autores encontraron que cuanto más larga era la cadena de alcoximetilo, mayor inhibición sufría la enzima a concentraciones efectivas.

Células de rata de glioma (C6)

Ranke *et al.* (2004) estudiaron la sorción, distribución y citotoxicidad de una serie de tetrafluoroboratos de 1-alkil-3-metilimidazolio en este tipo de células y cuantificaron la influencia de la longitud de la cadena alquílica mediante análisis de regresión lineal. Según los valores de logEC50 ($>3 \mu\text{M}$ para $[\text{C}_4\text{C}_1\text{Im}][\text{PF}_6]$, $3,08 \mu\text{M}$ para $[\text{C}_7\text{C}_1\text{Im}][\text{PF}_6]$, $2,76 \mu\text{M}$ para $[\text{C}_8\text{C}_1\text{Im}][\text{PF}_6]$, $1,90 \mu\text{M}$ para $[\text{C}_9\text{C}_1\text{Im}][\text{PF}_6]$ y $1,69 \mu\text{M}$ para $[\text{C}_{10}\text{C}_1\text{Im}][\text{PF}_6]$) se encontró que la toxicidad disminuía con la longitud de la cadena de n-alkilo para líquidos iónicos de estructura $[\text{C}_n\text{C}_1\text{Im}][\text{PF}_6]$.

Células de carcinoma de colon humano (CaCo-2)

Frade *et al.* (2009) realizó una evaluación toxicológica de líquidos iónicos en células cancerosas de colon humano (CaCo-2). Según sus resultados, la presencia de un grupo bencilo no parece contribuir a que los líquidos iónicos basados en $[\text{-C}_1\text{Im}]$ no sean tóxicos pero, por ejemplo, la introducción de un grupo COOH conduce a una gran reducción de la toxicidad $[\text{C}_{10}\text{C}_1\text{Im}]$. Concluyeron que cationes imidazolio de cadena corta $[\text{C}_4\text{C}_1\text{Im}]$, cationes con grupo OH en la cadena alquílicas $[\text{C}_2\text{OHC}_1\text{Im}]$, o el uso de cationes tipo pirrolidinio generan líquidos iónicos menos tóxicos.

Toxicidad en bacterias

Escherichia coli

Hernández-Fernández *et al.*, determinaron la toxicidad de líquidos iónicos basados en el catión imidazolio y pirrolidinio hacia la bacteria *E. coli*. Por su sencillez, se utilizó un método nefelométrico y se analizó la influencia del catión, la longitud de la cadena alquílica del catión y del anión. Se observó que los cationes de pirrolidinio eran menos tóxicos que los cationes de imidazolio, mientras que un aumento en la longitud de la cadena alquílica de los cationes de pirrolidinio e imidazolio aumentó la toxicidad. Entre los aniones estudiados, el dimetilfosfato ($[\text{Me}_2\text{PO}_4]$) fue el menos tóxico. Combinaciones de este anión con cationes pirrolidinio de baja longitud de cadena resultaron en líquidos iónicos de baja toxicidad, así el líquido iónico 1-butiril-3-metilpirrolidinio dimetilfosfato ($[\text{C}_1\text{C}_4\text{Pyr}][\text{Me}_2\text{PO}_4]$) mostró una EC_{50} cercana a 200 mM [Hernandez-Fernández *et al.* (2022)].

Shewanella sp

Kebaili *et al.* (2020), estudiaron la toxicidad de 69 ILs sobre la bacteria marina *Shewanella sp.* En concreto, los IL analizados se basaron en los cationes imidazolio, piridinio, pirrolidinio, piperidinio, morfolinio, oxazolinio, fosfonio, amonio y sulfonio, en combinación con diferentes aniones. Las toxicidades de este amplio grupo de IL sobre *Shewanella sp.* se determinaron mediante crecimiento en agar y crecimiento en medios líquidos en presencia de líquidos iónicos. Se encontró que una disminución en la hidrofobicidad de la longitud de la cadena de alquilo es un factor clave para reducir la toxicidad de IL. Por otro lado, se demostró que las IL basadas en fosfonio que contienen largas cadenas de alquilo son en gran medida incompatibles con *Shewanella sp.* La inmiscibilidad de los IL tuvo un efecto destacado en la toxicidad de los líquidos iónicos, ya que el 66% de los IL no miscibles en agua probados fueron muy tóxicos, mientras que solo el 42% de los IL inmiscibles fueron muy tóxicos. Varios líquidos iónicos solubles en agua se pudieron clasificar como biocompatible con *Shewanella sp.*, entre los cuales podemos encontrar el $[\text{Hmim}^+][\text{Cl}^-]$, $[\text{MOMmim}^+][\text{BF}_4^-]$, $[\text{MOMmim}^+][\text{dca}^-]$, $[\text{BMPy}^+][\text{BF}_4^-]$, $[\text{EPy}^+][\text{ETSO}_4]$. Entre los líquidos iónicos

clasificados insolubles en agua y biocompatible se pudieron encontrar los siguientes $[N_{8,8,8,1}^+][CF_3SO_3^-]$ y $[P_{6,6,6,14}^+][BF_4^-]$.

Saccharomyces cerevisiae

Missoun *et al.*, (2020) aplicaron el test de crecimiento en agar para la determinación la toxicidad de líquidos iónicos hacia *S. cerevisiae*. Se analizó un total de 73 ILs con una gran diversidad de cationes y aniones. Por medio de esta metodología nueve ILs biocompatibles hacia *S. cerevisiae*: $[Bmim^+][NO_3^-]$, $[HOPmim^+][NO_3^-]$, $[Bmim^+][NTf_2^-]$, $[N_{8,8,8,1}^+][NTf_2^-]$, $[S_{2,2,2}^+][NTf_2^-]$, $[EMPyrr^+][NTf_2^-]$, $[BMPi^+][NTf_2^-]$, $[Moxa^+][MeSO_4^-]$ y $[Chol^+][H_2PO_4^-]$. La toxicidad estuvo determinada principalmente por la naturaleza catiónica, aunque algunos aniones también pueden mostrar una fuerte influencia en la biocompatibilidad de IL como el anión bistriflimida. Además, se observó que un aumento en la longitud de la cadena alquímica de los cationes, como el imidazolio o el piridinio, implicaba un aumento de la toxicidad de la IL.

Ecotoxicidad

La toxicidad de *Vibrio fischeri* y *Daphnia magna* fueron estudiadas por Couling *et al.* (2006). Para estos microorganismos, se encontró que líquidos iónicos con sustituyentes alquilo más cortos en el catión normalmente tienen toxicidades más bajas [Docherty *et al.*, 2005, Gathergood *et al.*, 2004, Luis *et al.*, 2010, ventura *et al.*, 2012]. Se puede ver en la Tabla 2 que los líquidos iónicos con cadenas alquílicas más largas tienen toxicidades más altas. Como ejemplo, los valores de logEC50 obtenidos por Couling *et al.* (2006) para $[C_1C_1C_1C_1N][Br]$ y $[C_2C_2C_2C_2N][Br]$ fueron >2 mmol/L se puede comparar con el valor obtenido para $[C_4C_4C_4C_4N][Br]$ fue 0,27 mmol/L. Incluso cambiando uno de los sustituyentes alquilo, como en el caso de $[C_6C_2C_2C_2N][Br]$ (logEC50 = -0,54), la toxicidad aumentó.

También se encontró que la introducción de grupos oxigenados en las cadenas de alquilo, como éter y éster, conduce a una disminución de la toxicidad de los compuestos de guanidinio e imidazolio. En cuanto al efecto de los diferentes cationes, encontraron que es posible reconocer que los IL basados en fosfonio (por ejemplo, $[C_4C_4C_4C_4P][Br]$ log EC50 = -0.29 mmol/L) parecen ser más tóxicos en comparación con los IL análogos

a base de amonio, con el mismo anión y mismas cadenas de alquilo ($[C_4C_4C_4C_4N][Br]$) $\log EC50 = 0,27$ mmol/L).

En comparación con los valores de toxicidad de los solventes industriales tradicionales, muchos de los IL probados fueron menos tóxicos para *V. fischeri*. Sin embargo, algunos líquidos iónicos son aún más tóxicos que los solventes orgánicos comunes (Tabla 3.2).

Tabla 3.2. Resultados de toxicidad experimental obtenidos por Docherty et al. (2005) para *V. fischeri* expresado como $\log EC50$ (mmol/L) para varios líquidos iónicos y otros disolventes orgánicos comunes. Valores ordenados de mayor a menor toxicidad.

Líquido iónico	$\log EC50$	Disolvente orgánico	$\log EC50$
$[C_4C_1C_1NP_y][Br]$	-0,68	4-Dimetilaminopiridina	-0,41
$[C_6C_2C_2C_2N][Br]$	-0,54	3,5-Dimetilpiridina	-0,36
$[C_4C_4C_4C_4P][Br]$	-0,29	Piridina	0,87
$[C_4C_4C_4C_2P][C_2C_2PO_4]$	0,07	1-Bromobutano	0,95
$[C_4C_4C_4C_4N][Br]$	0,27	Dicianamida de sodio	1,72
$[C_4C_1Im][NTf_2]$	0,39	1-Clorobutano	1,92
$[C_{14}C_6C_6C_6P][Br]$	0,41	Bromuro de sodio	2,29
$[Chol][NTf_2]$	1,15		
$[Chol][Cl]$	>2,0		
$[C_2C_2C_2C_2N][Br]$	>2,0		
$[C_1C_1C_1C_1N][Br]$	>2,0		

Bernot et al. (2005) estudiaron los efectos agudos de los IL basados en el catión imidazolio en la supervivencia de *Daphnia magna* y sus efectos crónicos en varios recién nacidos de primera generación, el número total de recién nacidos y el tamaño medio de los descendientes. Se encontró que los IL a base de imidazolio son más tóxicos para *Daphnia magna* que las sales a base de Na^+ , pero menos tóxicos que otros químicos comunes como el cloro y el amoníaco (consulte la Tabla 3.3). La toxicidad aparentemente estaba relacionada con el catión imidazolio y no con el anión líquido iónico. La toxicidad de estos IL fue comparable a la de los productos químicos que se

utilizan actualmente en los procesos de fabricación y desinfección (p. ej., amoníaco y fenol).

Tabla 3.3. Concentraciones letales de diferentes líquidos iónicos para *Daphnia magna* en bioensayos de toxicidad aguda de 48 h. Valores de toxicidad expresados como LC50 (ppm) de mayor a menor toxicidad.

Líquidos iónicos	LC50 (ppm)
Cloro	0,12-0,15
Amonio	2,9-6,93
[C ₄ C ₁ Im][Br]	8,03
[C ₄ C ₁ Im][Cl]	14,80
[C ₄ C ₁ Im][PF ₆]	19,91
[C ₄ C ₁ Im][BF ₄]	10,68
Fenol	10-17
Benceno	356-620
Metanol	3289
Acetonitrilo	3600
[Na][BF ₄]	4765,75
[Na][PF ₆]	9344,81

Toxicidad en animales

Pretti *et al.* (2006) analizaron la toxicidad aguda para el pez cebra (*Danio rerio*) de varios líquidos iónicos con diferentes aniones y cationes. Para los líquidos iónicos analizados se encontró una reducción de la actividad general, pérdida del equilibrio, nado errático, permanecer inmóvil a nivel medio del agua por períodos prolongados y alteraciones de la piel. La toxicidad se expresó como la concentración letal media (LC50), definida como el valor capaz de matar al 50% de los peces analizados en el

baño después de un período de exposición continua de 96 horas. Los líquidos iónicos a base de imidazolio, piridinio y pirrolidinio mostraron valores de CL50 superiores a 100 mg/l, por lo que estos IL pueden considerarse no altamente letales para el pez cebra. Por otro lado, las sales de amonio AMMOENG 100™ y AMMOENG 130™ mostraron valores de CL50 notablemente más bajos que los reportados para solventes orgánicos y aminas terciarias.

Bailey *et al.* (2008) estudiaron los efectos de la exposición de ratones al líquido iónico [C₄C₁Im][Cl]. Se sometieron a exposiciones diferentes de líquidos iónicos: 113 mg/kg·d, 169 mg/kg·d o 225 mg/kg·d. El peso fetal disminuyó y las malformaciones fueron más numerosas en las dosis más altas. Además, el aumento de peso materno disminuyó de 10,67 g en los controles a 9,28 g en los ratones tratados con la dosis de 225 mg/kg·d.

Biodegradabilidad

Los compuestos que alcanzan un nivel de biodegradación superior al 60 % se denominan "fácilmente degradables" (García *et al.*, 2005). Se ha encontrado que ciertos líquidos iónicos son biodegradables, especialmente si tienen un grupo éster presente en la cadena lateral alquílica del catión [Gathergood *et al.*, 2004; García *et al.*, 2005; Gathergood *et al.*, 2004]. A modo de ejemplo, el porcentaje de biodegradación obtenido para los líquidos iónicos [C₂OCOC₁Im][Br] y [C₂OCOC₁Im][BF₄] fue del 48% y 59% [Coleman *et al.*, 2010]. Por otra parte, el [C₄C₁Im][C₈SO₄] experimentó una pequeña biodegradación (25%) después de 28 días, mientras que otros IL ([C₄C₁Im][Br], [C₄C₁Im][Cl], [C₄C₁Im][BF₄] [C₄C₁Im][PF₆] [C₄C₁Im][N(CN)₂] y [C₄C₁Im][NTf₂]) permanecieron prácticamente intactos (menos del 5% de biodegradación). Generalmente, las modificaciones del anión no representan cambios en la biodegradabilidad, pero el anión octilsulfato resultó ser una excepción.

Los datos de biodegradación de líquidos iónicos son escasos aún en comparación con los estudios de toxicidad. Sin embargo, vale la pena señalar que se está prestando un especial interés en la aplicación de líquidos iónicos biodegradables como aquellos obtenidos a partir de materiales biorrenovables, como la fructosa [Handy *et al.*, 2003].

3.6. PREDICCIÓN DE LA TOXICIDAD DE SUSTANCIAS QUÍMICAS. CORRELACIONES QSAR.

Es posible predecir propiedades de sustancias químicas mediante correlaciones estructura-actividad [Wilkes, 2004]. Las relaciones estructura-actividad y las correlaciones cuantitativas estructura-actividad, conocidas como SARs y QSARs, respectivamente, son modelos predictivos que permiten relacionar cuantitativamente la estructura química de una sustancia con una propiedad de esta tal como la actividad biológica o la reactividad química mediante la aplicación de herramientas estadísticas. El modelo así obtenido, se puede utilizar, para predecir la respuesta de un sistema a otras estructuras químicas. La base de cualquier (Q)SAR es que las propiedades de una nueva sustancia química se pueden deducir de su estructura molecular basándonos en las propiedades de compuestos similares cuyas actividades ya han sido evaluadas.

Los modelos QSARs se expresan matemáticamente de la siguiente forma:

$$\text{Actividad} = f(\text{estructura}) \text{ (Eq 1)}$$

En el planteamiento de estos modelos se asume la hipótesis de que moléculas similares tienen actividades similares. Este principio es conocido como relación entre estructura y actividad (*Structure-Activity Relationship*; SAR). La obtención de un buen modelo QSAR depende de muchos factores tales como la calidad de los datos obtenidos y el método estadístico empleado.

Las primeras aplicaciones de los modelos QSARs fueron al desarrollo de fármacos. También se han empleado para estimar las propiedades fisicoquímicas de interés tales como el punto de fusión, punto de ebullición, presión de vapor, constante de la Ley de Henry, coeficiente de reparto octanol-agua y solubilidades en agua [Allen and Shonnard, 2002].

Como hemos comentado anteriormente, los modelos QSARS están basados en la fuerte correlación existente entre las propiedades de ciertas familias de compuestos, especialmente de los compuestos orgánicos, y su estructura. Un ejemplo es la relación existente entre el número de carbonos en los alcanos y su temperatura de ebullición. Así, conforme se incrementa el número de carbonos se incrementa el punto de

ebullición de los alcanos lo que nos puede servir para poder predecir el punto de ebullición de los alcanos de peso molecular más alto. También se pueden emplear estos modelos en el diseño de medicamentos con el fin de diseñar moléculas más activas para una función determinada y menos tóxicas para el organismo. Otra de las aplicaciones de los modelos QSARs es el análisis de riesgos químicos incluso para en el ámbito de la regulación de sustancias químicas. Los modelos QSAR han tenido una gran utilidad en la predicción de la toxicidad de muchas sustancias químicas cuando hay pocos datos empíricos disponibles [Schultz *et al.*, 2003]. Así, se han desarrollado varios QSAR que predicen valores de toxicidad de sustancias químicas para *Daphnia*, alga verde, peces [ECOSAR, 2000; Liu *et al.*, 2003; Verhaar *et al.*, 1995] y *Vibrio fischeri* [Agrawal and Khadikar, 2002; Cronin and Schultz, 1997, 1998; Deneer *et al.*, 1989; Hermens *et al.*, 1985; Warne *et al.*, 1999; Yu *et al.*, 2002; Yuan *et al.*, 2001; Zhao *et al.*, 1998].

Los QSAR también permiten diseñar moléculas directamente a partir de los conocidos como modelos generativos. Los modelos QSAR convencionales solo van en la dirección de predicción de propiedades a partir de estructuras. Sin embargo, si es posible la generación de nuevas moléculas con propiedades mejoradas mediante la combinación de estructuras químicas que generan buenos valores de la propiedad o actividad buscada.

Actualmente se habla mucho del uso de la inteligencia artificial (IA) en química. Podemos distinguir entre IA y aprendizaje automático de la siguiente manera. La IA es el superconjunto de tareas que demuestran características de la inteligencia humana, mientras que las máquinas de aprendizaje (MA) es una rama de la IA que accede a datos, analiza tendencias y genera datos inteligentes, ideas procesables. Esto es lo que hace un modelo QSAR. El término IA es habitualmente utilizado en el mismo contexto como MA en muchas disciplinas ricas en datos, que van desde la salud a la astronomía. En este sentido se puede decir que la IA ha sido utilizado en química desde la década de 1960 bajo el nombre de QSAR. En general, MA representa un conjunto de técnicas para predecir una propiedad Y basada en ejemplos conocidos, donde cada ejemplo i tiene propiedad $Y(i)$ y un conjunto de k características $X(i,j)$, $j = 1$ a k .

En QSAR, la variable dependiente Y suele ser alguna propiedad biológica o física, y las características de la variable independiente X (llamadas 'descriptores' en aplicaciones químicas) son derivables de estructuras químicas [Muratov *et al.*, 2020]

3.6.1 Terminología en los modelos QSAR

A la hora de construir un modelo QSAR se hace necesario conocer una serie de conceptos y terminología que se explica a continuación:

Datos: Los resultados conseguidos de los modelos QSAR son altamente dependientes del tamaño, la calidad y la diversidad de los datos utilizados en su construcción. Debemos de considerar que los datos a veces son limitados (tamaño), pueden tener errores experimentales (calidad) o pueden tener cierta variabilidad debido a que proceden de distintas fuentes (diversidad). Los datos pueden ser obtenidos de bases de datos como sciencedirect o google academic.

Dominio de aplicabilidad. Un dominio de aplicabilidad define el espacio de características en el que el modelo ha sido desarrollado y debe aplicarse.

Modelabilidad. La posibilidad de la construcción de un modelo estadísticamente significativo a partir de un conjunto de datos dado va a depender de una serie de circunstancias como por ejemplo la existencia de grandes incertidumbres en la determinación de los valores de las variables independientes o cuando moléculas similares dan lugar a actividades muy diferentes. Esta última situación puede darse en moléculas estereoselectivas, entonces habrá que incluir la estereoselectividad como un descriptor en el modelo.

Métodos de validación: El método más común para la validación de un método QSAR es mediante el uso de un test de prueba externo. Este significa reservarse parte de los datos para realizar la validación del modelo obtenido con los datos restantes. La validación por división aleatoria (“random Split validation”) es una práctica general en la literatura y es, además, en estos casos, es más probable que los datos de entrenamiento se encuentren dentro del mismo dominio o mismo espacio químico del modelos. En estos casos se recomienda escoger unos datos de entrenamiento considerando en diferentes tiempos (time Split validation) comprobando que los compuestos del conjunto de prueba no estén demasiado lejos del dominio del modelo.

Interpretabilidad. Cada vez los métodos se han vuelto más sofisticados, los descriptores más arcanos, los conjuntos de datos más diversos y como consecuencia la precisión y la amplitud de las predicciones ha aumentado a expensas de la interpretabilidad entendida como comprensión de la base molecular que explica la mayor o menor actividad de las moléculas y guía el diseño de moléculas con actividades mejoradas. Los modelos pueden interpretarse considerando (i) que descriptores son los más importantes para mejorar las propiedades de una molécula, es lo que se conoce como la importancia del descriptor, (ii) aplicar pequeñas perturbaciones a los descriptores de entrada manteniendo el resto constante y analizando el efecto sobre la propiedad deseada (análisis de sensibilidad) y (iii) realizar una interpretación mecanicista del modelo observando tendencias. Esta última aproximación se denomina validación lateral.

Métodos de aprendizaje de máquinas (ML). Existen muchos métodos de aprendizaje de máquinas aplicados en modelos QSAR. Entre estos tenemos los “k-nearest neighbors” (kNN), “partial least squares” (PLS), “support vector machines” (SVM), “relevance vector machines” (RVM), “random forest” (RF), “Gaussian processes” (GP), “boosting” y las redes neuronales profundas (DNN) que han sido muy aplicadas en los últimos años. Los RF han sido una opción muy empleados para el modelado QSAR durante muchos años por su capacidad para hacer buenas predicciones con pocos parámetros de ajuste. El “boosting” ha sido también es muy útil porque es a menudo uno de los métodos más precisos y rápidos, especialmente con la última implementación de “extreme” (XGBoost76) y “light gradient boosting machine”. Los DNN como método de máquina de aprendizaje se consiguen mejores significancias comparando con la aplicación con los métodos RF y XGBoost en QSAR. Sin embargo, en términos absolutos, la mejora es menos que notable. Cuando se entrena en los mismos conjuntos de datos y descriptores, las predicciones de DNN no son diferentes a los de otros métodos. Así, el coeficiente de correlación R^2 de los modelos generados con DNN es generalmente solo 0.04 más alto (en promedio) que los construidos con RF.

Las redes neuronales profundas también tienen características indeseables como que requiere más ajuste de los parámetros de entrenamiento, siendo computacionalmente más exigente, tomando más largos de predecir y más difíciles de interpretar. Nos planteamos la cuestión de porque los modelos DNN más sofisticados no proporcionan

mejoras sustanciales en los modelos QSAR en relación con otros modelos de ML. Una de las razones es el teorema de aproximación universal que establece que las redes neuronales de una sola capa y los métodos ML matemáticamente similares son suficientes para modelar cualquier función no lineal con un número suficiente de datos. Otra razón puede ser que cualquier conjunto de datos contiene de forma inevitable una serie de errores experimentales que no permiten general modelos muy precisos sea cual sea la metodología empleada. Por otra parte, los modelos QSAR se encuentran limitados por la presencia y el tamaño de acantilados, es decir moléculas o propiedades muy similares que tienen actividades muy diferentes. Por todas estas razones los métodos más sofisticados no proporcionan mejores predicciones. Por ejemplo, en la industria farmacéutica o en predicciones toxicológicas donde los datos experimentales son limitados y los errores asociados a los mimos no son pequeños, esto datos constituyen el cuello de botella y puede tener menos sentido el empleo de modelos más sofisticados como las redes neuronales profundas.

En QSAR, las herramientas de construcción de modelos se pueden agrupar en dos categorías principales: enfoque basado en la regresión y enfoque basado en clasificación. Los enfoques basados en la regresión son efectivos cuando tanto dependiente (variable de respuesta) como independiente (descriptores moleculares) son cuantitativas.

Modelos multitarea. Pueden modelar directamente más de una actividad a la vez (modelos multitarea). Sin embargo, estos modelos multitarea pueden generar mejoras o empeoramientos de la predicción de tareas individuales.

3.6.2. QSAR en la evaluación de la seguridad química

Los modelos QSAR se han utilizado ampliamente para modelar y predecir propiedades de fármacos, minimizar su toxicidad u optimizar su farmacocinética. Cualquier producto químico puede ser tóxico a niveles altos de dosis, por lo que una característica importante de cualquier fármaco es su dosis en la produce el efecto deseado o el efecto adverso al 50% de los individuos [Muratov *et al.*, 2020].

A continuación, revisamos varios conceptos clave que se relacionan con problemas en

predicción de toxicidad química.

Vías de resultados adversos (AOP)

AOP es uno de los conceptos clave de la evaluación de la toxicidad. Asume que la toxicidad es iniciada por un evento iniciador molecular (MIE), que conduce a un resultado adverso (AO) para la salud o ecotoxicológico, a través de una cascada de eventos vinculados (KE). Con el conocimiento de los AOP, el modelado QSAR se puede utilizar para identificar el potencial de los compuestos químicos para causar un MIE y/o conducir a un resultado adverso. Es importante destacar que los metabolitos también pueden causar toxicidad incluso cuando el precursor tiene baja toxicidad. Por lo tanto, la incorporación de la información sobre la activación metabólica puede mejorar la predictibilidad de los modelos QSAR. AOP facilita la interpretación mecanicista de modelos, proporciona una mejor comprensión de la toxicidad y permite el desarrollo de nuevas pruebas in vitro.

Toxicidad in vivo

Dado que las reacciones adversas pueden ser causadas por una multitud de factores, la predicción de la toxicidad in vivo es posiblemente tarea más difícil en el modelado QSAR. El costo y las cuestiones éticas asociadas con la evaluación directa de la toxicidad in vivo implica la escasez de datos para entrenar modelos, por lo que los modelos pueden ser bastante limitados.

3.6.3. QSAR como método de evaluación de sustancias

La Unión Europea (UE) previó que los modelos QSAR se usarían cada vez más para evaluaciones del peligro de productos químicos. También se hace necesario el uso de modelos QSAR para abordar las preocupaciones sobre el bienestar animal reemplazando, reduciendo y refinando las pruebas con animales en las evaluaciones toxicológicas.

En Noviembre de 2004, la Comisión Europea y los miembros de la OCDE (Organización para la cooperación económica y el desarrollo) adoptaron principios para

la validación de modelos QSAR para su uso en la evaluación regulatoria de seguridad química [OCDE, 2023]. Según lo acordado en las directrices de la OCDE, se debe desarrollar un modelo QSAR con:

1. Un punto final definido.
2. Un algoritmo inequívoco.
3. Un dominio definido de aplicabilidad,
4. Medidas apropiadas de validación.
5. Posible interpretación mecanicista.

3.6.4 Etapas en el desarrollo de un modelo QSAR

A continuación, se describen con más detenimiento cada una de las etapas para la construcción de un modelo QSAR.

Colección de datos con un punto final definido: es una de las partes que más tiempo llevan y más complicadas en la preparación de un modelo QSAR. En esta parte se tiene que hacer una recopilación de datos con un “punto final definido”, es decir una actividad determinada con la cual queremos por ejemplo relacionar la estructura de una molécula tal y como explica el principio 1 de la OCDE.

Selección de los datos y pretratamiento. La selección de los datos constituye una de las etapas críticas del desarrollo del modelo. En muchas ocasiones, y debido principalmente a que los datos proceden de distintas fuentes, se hace necesario por ejemplo homogeneizar los datos con las mismas unidades.

Cálculo de descriptores moleculares: Las estructuras moleculares aplicadas para el modelado QSAR necesitan traducirse a números a través de la definición de los descriptores moleculares. El descriptor molecular es una representación codificada de la información sobre un compuesto químico en forma de valores numéricos basados en su constitución química, permitiendo la correlación de estructura química con propiedades físicas, químicas, o actividad biológica. En un modelo QSAR, los descriptores de una molécula, que describen aspectos específicos de una molécula, son predictores (X) de la variable dependiente (Y). Un estudio QSAR utiliza una variedad de descriptores que

pueden clasificarse en diferentes dimensiones o categorías, tales como propiedades físico químicas como calores de formación, coeficientes de reparto o estructurales como grupos funcionales de moléculas.

División de conjuntos de datos: La capacidad de predicción de un modelo QSAR se puede determinar dividiendo el conjunto de datos en los denominados datos de entrenamiento y datos de prueba. Esto nos permitirá, una vez generado el modelo con los datos de entrenamiento validar el modelo de forma externa con los datos de prueba. Los datos de entrenamiento deben abarcar un amplio dominio químico, mientras que los datos de prueba deben estar dentro de ese dominio químico. Entre los métodos de división de los datos en datos de prueba y datos de entrenamiento tenemos los siguientes: (i) Distancia euclidiana “Euclidean distance” (basada en la diversidad), (ii) Kennard-Stone “Kennard-Stone”, (iii) agrupación de k-medias “k-means clustering”, (iv) respuesta ordenada “sorted response”, etc.

Selección de características: el proceso de selección de características implica la identificación de variables predictoras (descriptores) que más se correlacionan con la variable respuesta. La selección de características va a ayudar a la adecuada selección a disminuir la complejidad del modelo, disminuye el riesgo de sobreajuste o sobreentrenamiento, y ayuda a seleccionar los descriptores más críticos entre un grupo de cientos o miles. De esta forma, la cantidad de descriptores de entrada se minimiza sin la pérdida de información esencial. Según las directrices de la OCDE se han propuesto algunas técnicas para la selección de característica como los algoritmos genéticos “genetic algorithms”, la aproximación de funciones genéticas” “genetic function approximation (GFA), la selección hacia adelante “forward selection”, la eliminación hacia atrás “backward elimination”, la regresión por pasos “stepwise regression”, el recocido simulado “simulated annealing”, etc.

Algoritmos para desarrollo de modelos: la directriz 2 de la OCDE dice que se debe desarrollar un modelo QSAR usando un “algoritmo inequívoco”. Este abarca los métodos implementados durante el pretratamiento de datos, la división de datos, selección de características y modelo desarrollo. Las técnicas de modelado lineal incluyen modelos de regresión tales como la regresión lineal múltiple (MLR), los mínimos cuadrados ordinarios “ordinary least squares” (OLS), mínimos cuadrados

parciales “partial least squares” (PLS), análisis de componentes principales “principal component analysis” (PCA), regresión de componentes principales “principal component regression”(PCR), etc. Otra clasificación es en modelos de regresión (MLR, PLS), modelos de clasificación (LDA, Logistic regression) y máquinas de aprendizaje (ANN, SVN, RF).

Determinación del dominio de aplicabilidad: Uno de los puntos de control más esenciales en el modelado QSAR es determinar el dominio de aplicabilidad (DA) de un modelo tal y como se explica en el principio 3 de la OCDE. La aplicabilidad dominio denota un espacio fisicoquímico (tanto de la respuesta como de las estructuras químicas) dentro del cual un modelo QSAR puede predecir con cierto grado de confiabilidad. Este espacio está definido por las características fisicoquímicas de los compuestos en el conjunto de entrenamiento. El concepto de DA se utiliza para evitar una extrapolación injustificada de predicciones de actividades.

Validación del modelo QSAR: Antes de interpretar y predecir respuestas biológicas de compuestos no probados, cualquier modelo QSAR necesita ser validado. Aquí se establece el poder predictivo del modelo. El cuarto principio de la OCDE establece que los modelos deben ser validados estadísticamente para analizar la bondad del ajuste, la robustez y su predictibilidad. Hay diferentes métricas de validación tanto internas como externas para modelos de regresión como de clasificación.

Interpretación mecanicista: el quinto principio de la OCDE se enfoca en identificar las características de las variables que pueden contribuir a una comprensión más profunda de la respuesta que se está modelando. Sin embargo, muchas veces es complicado proporcionar una información mecanicista.

3.6.5. Métodos de validación de un modelo QSAR

La fiabilidad de un modelo QSAR se analiza a través de un modelo de validación. La calidad de los datos de entrada, la buena determinación del dominio y la interpretabilidad mecanicista también se puede confirmar mediante el método de validación.

La validación del modelo QSAR se puede clasificar en dos grandes tipos: (a) validación interna y (b) validación externa.

La validación interna en el modelado QSAR implica la predicción de actividad de las moléculas/compuestos utilizados para generar el modelo. A esto le sigue la estimación de métricas para detectar la precisión de las predicciones. La validación interna es útil en el caso de emplear una validación cruzada donde los datos internos se dividen en diferentes grupos de calibración (entrenamiento) y subconjunto de validación (prueba) y se hace la media de los diferentes resultados obtenidos. El conjunto de calibración se utiliza para fines de construcción de modelos, y el conjunto de validación se utiliza para la evaluación de la predicción del modelo. En la validación externa se emplean moléculas recién diseñada o no empleadas en la generación del modelo. En la mayoría de los casos la validación interna se emplea cuando no hay suficientes datos para la construcción del modelo.

Validación en metodologías de regresión.

Una de las principales medidas para la comprobación de la calidad de los modelos QSAR es el coeficiente de regresión R^2 de los valores experimentales frente a los medidos por el modelo que mide la variación de los datos experimentales frente a los valores calculados por el modelo. El valor máximo posible para R^2 es 1, que define una correlación perfecta. R^2 ajustado (R^2_{adj}) es una versión modificada del coeficiente de correlación anterior. R^2_{adj} incorpora la información del número de muestras y las variables independientes utilizadas en el modelo [De *et al.*, 2022] Otra forma de validación interna de modelos QSAR es la validación cruzada dejando uno fuera “leave one out cross validations” (Q^2_{LOO}). En esta forma de validación se emplea el conjunto de datos de entrenamiento original eliminando un compuesto. Luego se predice la actividad del compuesto omitido usando el modelo desarrollado con compuestos n-1. Este ciclo se repite hasta que todos los compuestos del conjunto de entrenamiento. La predictibilidad del modelo se determina usando la suma residual predicha de cuadrados (PRESS) y R^2 con validación cruzada (Q^2). El valor de PRESS se define como la suma de las diferencias al cuadrado entre los datos experimentales y los valores predichos dejando uno fuera dejar uno fuera. La desviación estándar del error de las predicciones (SDEP) se calcula a partir del valor PRESS. Un modelo se considera satisfactorio si el

valor de Q^2 es mayor que el valor de 0.6. Sin embargo, algunos estudios consideran que esta no es la forma más adecuada de para evaluar el poder predictivo de un modelo [De *et al.*, 2022]

Dejar muchos fuera “leave many out” (LMO) o dejar algunos fuera “leave some out” (LSO) podría ser una mejor alternativa donde se retiene una parte de los datos de entrenamiento y los datos restantes son modelados. Este ciclo continúa hasta que se pronostican todos los compuestos, y los valores pronosticados se utilizan para el cálculo de Q^2_{LMO} . Se trata por tanto de un tipo de validación interna [De *et al.*, 2022].

La métrica para la determinación de la predictibilidad externa se denomina como predictivo R^2 o R^2_{pred} o $Q^2_{ext(F1)}$. El $Q^2_{ext(F1)}$ se caracteriza por un valor umbral mínimo de 0,6, es decir, modelos que muestran un valor superior a 0,6 se consideran externamente predictivo con el valor ideal siendo 1.0. Schuurmann *et al.*, (2008) proponen otra métrica de validación $Q^2_{ext(F2)}$ donde se emplea la media de los modelos para los valores de prueba. Consonni *et al.* (2009) introduce otra métrica de validación externa $Q^2_{ext(F3)}$. Esta métrica mide la previsibilidad del modelo y es sensible a la selección del conjunto de datos de entrenamiento y tiende a penalizar los modelos ajustados a un nivel muy conjunto de datos homogéneo incluso si las predicciones están cerca del valor verdadero, con un valor umbral de 0,6 [De *et al.*, 2022].

Otra métrica que analiza la fiabilidad del modelo es la métrica del coeficiente de correlación de concordancia (CCC) (Chirico y Gramática, 2011). Mide precisión y exactitud, detectar la distancia de las observaciones a el ajuste y el grado de desviación de la línea de regresión a aquella que pasa por el origen de coordenadas. Cualquier desviación de la línea de regresión de la línea que pasa por el origen da un valor de CCC menor que 1. El valor umbral deseable para CCC es 0,85 [De *et al.*, 2022]. Por otra parte, el error cuadrático medio en las predicciones RMSEp da una medida de validación externa del modelo. Esta métrica es comparativamente más simple y representa directamente los errores del conjunto de pruebas observaciones relativas al número total de muestras del conjunto de prueba. Se desea un valor bajo de este parámetro para una buena predictibilidad [De *et al.*, 2022].

Aleatorización de la respuesta (“Y-scrambling”) es una evaluación que se clasifica fuera de las validaciones externa o interna. Y-scrambling es capaz de garantizar que el modelo QSAR desarrollado no se debe al azar, lo que da una idea de la robustez del modelo (Rücker *et al.* 2007). En esta técnica, se generan respuestas aleatorias (Y) de un compuesto en el conjunto de entrenamiento con respecto a la matriz X de descriptores que se mantiene sin cambios. Para un modelo QSAR aceptable, el coeficiente de correlación promedio (R_r) de los modelos aleatorios debe ser menor que el coeficiente de correlación (R) de un modelo no aleatorio. Se calcula el valor de $R_p^2 = R^2 \times (R^2 - R_p^2)^{1/2}$ [De *et al.*, 2022].

3.6.6. Algoritmos de aprendizaje automático en modelos QSAR

Aunque se ha utilizado una amplia variedad de algoritmos de aprendizaje automático (ML) para obtener modelos QSAR, no existe un acuerdo para el mejor algoritmo único de modelos QSAR. Entre las máquinas de aprendizaje tenemos los algoritmos lineales: entre los que tenemos regresión de procesos gaussiano de función lineal (GPR lineal), vector de soporte de función lineal (linear-SVM), regresión de mínimos cuadrados parciales (PLSR), regresión lineal múltiple (MLR) y la regresión de la componente principal (PCR). Tenemos también algoritmos analogizadores: máquina de vector de soporte de función de base radial (rbf-SVM), K-vecino más cercano (KNN) y regresión de proceso gaussiano de función de base radial (rbf-GPR). Algoritmos simbolistas tales como el aumento de gradiente extremo (XGBoost), cubista, bosque aleatorio (RF), splines de regresión adaptativa múltiple (MARS), máquina de aumento de gradiente (GBM) y clasificación y árbol de regresión (CART)]. Tenemos también algoritmos conexionistas, de análisis de componentes principales de red neuronal artificial (pca-ANN) y de red neuronal profunda (DNN). Los resultados muestran que rbf-SVM, rbf-GPR, XGBoost y DNN generalmente ilustran mejores actuaciones que los otros algoritmos. Los rendimientos generales de los diferentes algoritmos se pueden clasificar de mejor a peor de la siguiente manera: rbf-SVM>XGBoost> rbf-GPR>Cubist> GBM>DNN>RF>pca-ANN>MARS> lineal-GPR≈KNN>lineal-SVM≈PLSR > CART ≈ PCR≈MLR. En términos de precisión de predicción y eficiencia computacional, SVM y XGBoost se recomiendan para el aprendizaje de regresión para pequeños conjuntos de datos, y XGBoost es una excelente opción para la regresión de gran cantidad de datos [Wu *et al.*, 2021].

Algoritmos lineales

En QSAR, los algoritmos lineales se han utilizado ampliamente para establecer la relación lineal entre las estructuras moleculares y sus bioactividades/propiedades debido a su simplicidad inherente y buena interpretabilidad. Los algoritmos lineales más representativos incluyen MLR, PCR, PLSR, y el SVM. Mas tarde se han desarrollado los algoritmos lineales GPR. MLR es una de las técnicas estadísticas más utilizadas, pero no dan los mejores valores de las métricas de validación. En estos algoritmos la redundancia de la información representada por algunos descriptores relevantes no puede ser fácilmente eliminados por un simple análisis de correlación, lo que puede conducir al sobreajuste de los modelos MLR. El rendimiento de diferentes modelos lineales se puede clasificar aproximadamente a partir de la de mejor a peor de la siguiente manera: linear-GPR>linear-SVM≈PLSR>PCR≈MLR [Wu *et al.*, 2021].

4. METODOLOGÍA

4.1. ESTRATEGIA DE BÚSQUEDA Y SELECCIÓN DE DATOS

Mediante el presente trabajo de tesis doctoral se ha realizado la recopilación de datos bibliográficos de ecotoxicidad, a líquidos iónicos, más grande hasta fecha para organismos acuáticos representativos, tales como la bacteria marina luminiscente *Vibrio fischeri*, la pulga de agua *Daphnia magna* y el alga *Pseudokirchneriella subcapitata*. Se han recopilado datos desde que empezó a analizarse la toxicidad de líquidos iónicos (año 2000) hasta la actualidad. Con los datos recopilados se ha analizado la relación cualitativa entre la toxicidad y la estructura de líquidos iónicos y se han desarrollado nuevos modelos QSAR para diferentes tipos de microorganismos con el fin de predecir la toxicidad de líquidos iónicos, dilucidar el mecanismo de toxicidad y establecer reglas de diseño de líquidos iónicos aplicados a biotecnología. También se ha realizado una revisión bibliográfica sobre otros aspectos de toxicidad de líquidos iónicos, sobre su síntesis, propiedades y principales aplicaciones. En la estrategia de búsqueda de datos nos vamos a centrar únicamente en el análisis bibliográfico relativa a la toxicidad de los líquidos iónicos, que es el objetivo de la presente memoria de Tesis Doctoral. Para ello se realizó una revisión sistemática tipo “scope” [Arksey y O'Malley, 2005; Levac et al., 2010]. El concepto de *scoping* se aplica en este trabajo como la síntesis y el análisis mediante técnica de máquinas de aprendizaje de una amplia gama de material de investigación (toxicidad de líquidos iónicos) para proporcionar mayor claridad conceptual sobre un tema. La pregunta de investigación fue ¿Cuál es el efecto de la estructura química de un líquido iónico en su toxicidad? Para responder a esta pregunta se emplearon las siguientes palabras clave: *Ionic Liquids*, *Toxicity*, *Ecotoxicity*, *Vibrio fischeri*, *Photobacterium phosphoreum*, *Daphnia magna*, *Pseudokirchneriella subcapitata* *Raphidocelis subcapitata*, *Selenastrum capricornutum*. Debemos saber que la bacteria *Vibrio fischeri* también se encuentra en la bibliografía como *Photobacterium phosphoreum* y el alga *Pseudokirchneriella subcapitata* también se le conoce como *Raphidocelis subcapitata*, *Selenastrum capricornutum*.

En la realización de las búsquedas bibliográficas se usaron cuatro bases de datos para reducir la probabilidad de sesgo: Google Academic, Web of Science, Scopus y Scielo.

La búsqueda se ha centrado desde el año donde aparecen los primeros datos de toxicidad hasta la actualidad (2000-2023).

Los criterios de elegibilidad fueron:

1. Que presentaran valores de EC50.
2. Que presentaran valores de EC50 15 min., 48h., 72h., Para la bacteria marina luminiscente *Vibrio fischeri* se seleccionaron aquellos con un tiempo de exposición de 15 minutos, para la pulga de agua *Daphnia magna* aquellos con un tiempo de exposición de 48h y para el alga *Pseudokirchneriella subcapitata* aquellos con un tiempo de exposición de 72h. Para estos microorganismos también se encontraron valores de ecotoxicidad relativa a otros tiempos, sin embargo, para disminuir la variabilidad, tal y como se explicará en el apartado de resultados, se ha considerado sólo los valores para los que tenemos más valores bibliográficos de toxicidad.
3. Que se refieran a líquidos iónicos monocatiónicos. Se han descartado los líquidos iónicos dicatiónicos.
4. Se excluyeron los disolventes eutécticos profundos que en ocasiones se les considera dentro del grupo de líquidos iónicos.

Estos criterios de elegibilidad forman parte de lo que posteriormente llamaremos dominio de los modelos QSAR.

En la Tabla 4.1 se resumen la estrategia de búsqueda, los criterios de elegibilidad y los resultados de la búsqueda.

Tabla 4.1. Estrategia de búsqueda, criterios de elegibilidad y resultados bibliográficos.

Palabras Clave	Ionic liquids and (toxicity or ecotoxicity) and (<i>Vibrio fischeri</i> or <i>Photobacterium phosphoreum</i>)	Ionic liquids and (toxicity or ecotoxicity y) and (<i>Daphnia magna</i>)	Ionic liquids and (toxicity or ecotoxicity) and (<i>Pseudokirchneriella subcapitata</i> or <i>Raphidocelis subcapitata</i> or <i>Selenastrum capricornutum</i>)	Datos Totales.
Artículos totales (2000-2022)	79	45	28	
Artículos exclusión 1	12	5	1	
Artículos exclusión 2	10	1	1	
Artículos exclusión 3	0	0		
Artículos exclusión 4	2	2	1	
Artículos seleccionados:	55	38	25	
Datos de toxicidad manejados y tratado:	551	174	173	898
Variables empleadas en los modelos				65.000

4.2. CONSTRUCCIÓN DE LOS MODELOS QSAR

La Figura 4.1 muestra el proceso de creación de modelos QSAR utilizando los criterios OCDE comentados en el apartado de antecedentes.

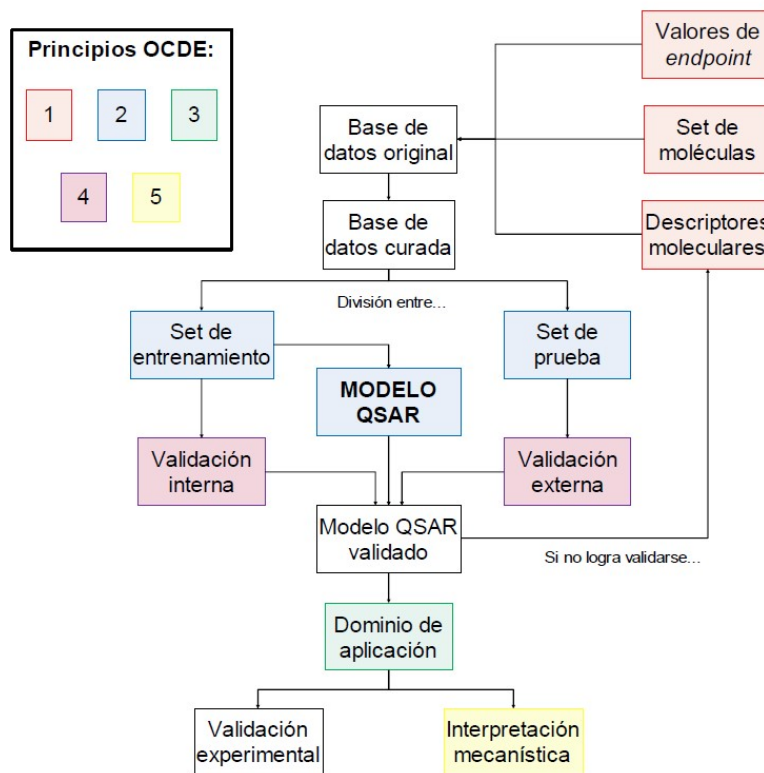


Figura 4.1. Secuencia para la creación y validación de modelos QSAR según la OCDE.

El objetivo de nuestro modelo QSAR es relacionar la estructura de los líquidos iónicos monocatiónicos con la ecotoxicidad a través de tres microorganismos diferentes, tales como la bacteria marina luminiscente *Vibrio fischeri*, la pulga de agua *Daphnia magna*, el alga *Pseudokirchneriella subcapitata*. En ellos se ha constatado la existencia de datos de toxicidad experimentales suficientes como el desarrollo de un modelo QSAR. De esta forma el **endpoint** para este modelo serán los valores de toxicidad de líquidos iónicos encontrados en la bibliografía. Una vez definido el **endpoint** (principio 1 OCDE), se procede a recuperar datos experimentales de las diferentes fuentes bibliográficas. En nuestro caso estos datos pueden presentar diferentes pruebas experimentales de ensayo y la diferencia más común es el tiempo de contacto entre el

microorganismo y el líquido iónicos. Por ello se seleccionan específicamente los ensayos de 15 minutos para *Vibrio fischeri*, de 48 horas para *Daphnia magna*, y de 72 horas para el alga *Pseudokirchneriella subcapitata*. Estos tiempos de ensayo son los más estandarizados en los modelos. Con la selección de tiempo de ensayos específicos para cada microorganismo pretendemos reducir la variabilidad de los modelos creados.

Posteriormente las bases de datos deben ser curadas. El procedimiento de curado en nuestras bases de datos ha sido el siguiente:

- Normalización de los valores de toxicidad de forma que se encuentre entre los valores “0” de mínimo y “1” de máximo.
- Cuando se presenten valores de toxicidad para moléculas iguales medidas por diferentes autores se va calculara la desviación estándar de la muestra y se precederá a la realización de la media de los valores que se encuentren dentro de la desviación estándar de la muestra.

En la etapa siguiente, las bases de datos que han sido sometidas a un proceso de curación se dividen en dos conjuntos: (i) el conjunto de entrenamiento, utilizado para construir el modelo QSAR, y (ii) el conjunto de prueba, utilizado para evaluar la capacidad predictiva del modelo. Durante este proceso, se establece el número de datos que se incluirán en cada conjunto y se emplea un método de selección que cumple con el segundo principio de la OCDE [Tropsha, 2010]. En nuestro caso emplearemos un conjunto de datos de prueba aleatorio que será aproximadamente el 10% de los datos de totales.

La ecuación matemática que constituye el modelo QSAR se deriva a través de dos enfoques diferentes: (i) utilizando algoritmos para reducir la complejidad de la matriz de descriptores [Roy et al., 2015], o (ii) seleccionando los descriptores que mejor explican la variabilidad en el resultado final y, a continuación, generando una ecuación de regresión lineal múltiple (MLR) o una ecuación de regresión no lineal [Walker et al., 2003]. En ambos casos, es necesario adherirse al segundo principio de la OCDE.

Los modelos QSAR deben ser sometidos a una validación estadística de acuerdo con el cuarto principio de la OCDE. La validación interna permite evaluar la calidad del ajuste y la robustez del modelo QSAR en el conjunto de entrenamiento [Roy et al., 2015b],

que consiste en los datos que contribuyen directamente a la construcción de la ecuación. Posteriormente, los modelos QSAR se ponen a prueba en el conjunto de prueba, que consta de datos independientes, para evaluar su capacidad predictiva (Dearden et al., 2009; NAFTA, 2012).

En función del éxito en ambas validaciones, se determina si se debe mantener o rechazar el modelo propuesto. Si se rechaza, es común proponer nuevos descriptores moleculares. Si se acepta, se definen el alcance de aplicación y la interpretación mecanicista del modelo QSAR, en concordancia con los principios 3 y 5 de la OCDE.

Por último, algunos autores sugieren una validación experimental adicional que complemente y respalde el alcance de aplicación. Esta validación consiste en aplicar el modelo QSAR para proponer escenarios que optimicen el objetivo deseado [Tropsha, 2010], por ejemplo, determinar qué tipo de estructura molecular mostraría una mayor adsorción bajo cierto mecanismo, sintetizarla y evaluar si la predicción se cumple.

4.3. MÉTODO DE APRENDIZAJE DE MÁQUINAS (ML) EMPLEADO

Existen muchos métodos de aprendizaje de máquinas aplicados en modelos QSAR. Como se ha comentado anteriormente, se utilizará la regresión de mínimos cuadrados parciales “partial least squares” (PLS). PLS (Partial Least Squares) permite reducir el número de predictores a un conjunto más pequeño de componentes no correlacionados y lleva a cabo la regresión de mínimos cuadrados en estos componentes, en lugar de hacerlo en los datos originales. El software utilizado para este propósito es el paquete estadístico XLSTAT para Microsoft Excel, que incorpora la herramienta PLS, la cual describiremos a continuación.

PLS es una técnica útil cuando una matriz de respuestas $\mathbf{Y}(\mathbf{n} \times \mathbf{r})$ es observada con una matriz de variables predictoras $\mathbf{X}(\mathbf{n} \times \mathbf{m})$, en el mismo número de casos n que es más pequeño que el número de variables predictoras m y, además, las variables x podrían estar correlacionadas. Es decir, cuando tenemos muchas más variables que observaciones.

La técnica se basa en extraer sucesivamente factores de ambas matrices de manera que la covarianza entre dichos factores es máxima. El PLS puede trabajar tanto si en la matriz \mathbf{Y} $r = 1$ o $r > 1$.

Formalmente esta técnica intenta encontrar una descomposición lineal de \mathbf{X} e \mathbf{Y} , tal que:

$$\mathbf{X} = \mathbf{T}\mathbf{P}' + \mathbf{E}$$

$$\mathbf{Y} = \mathbf{U}\mathbf{Q}' + \mathbf{F}$$

donde:

$\mathbf{T}_{n \times k}$ son las puntuaciones de \mathbf{X}

$\mathbf{U}_{n \times k}$ son las puntuaciones de \mathbf{Y}

$\mathbf{P}_{m \times k}$ son las cargas de \mathbf{X}

$\mathbf{Q}_{r \times k}$ son las cargas de \mathbf{Y} (si sólo tenemos un variables dependiente $r=1$)

$\mathbf{E}_{n \times m}$ = Los residuos de \mathbf{X}

$\mathbf{F}_{n \times r}$ = Los residuos de \mathbf{Y} .

de forma que la covarianza sea máxima entre \mathbf{T} y \mathbf{U} .

En la Figura 4.2 se muestra el esquema general de los resultados que proporciona PLS. La operación de transponer es aquí indicada por una prima en lugar de \mathbf{T} , para evitar confusiones con la matriz de puntuaciones.

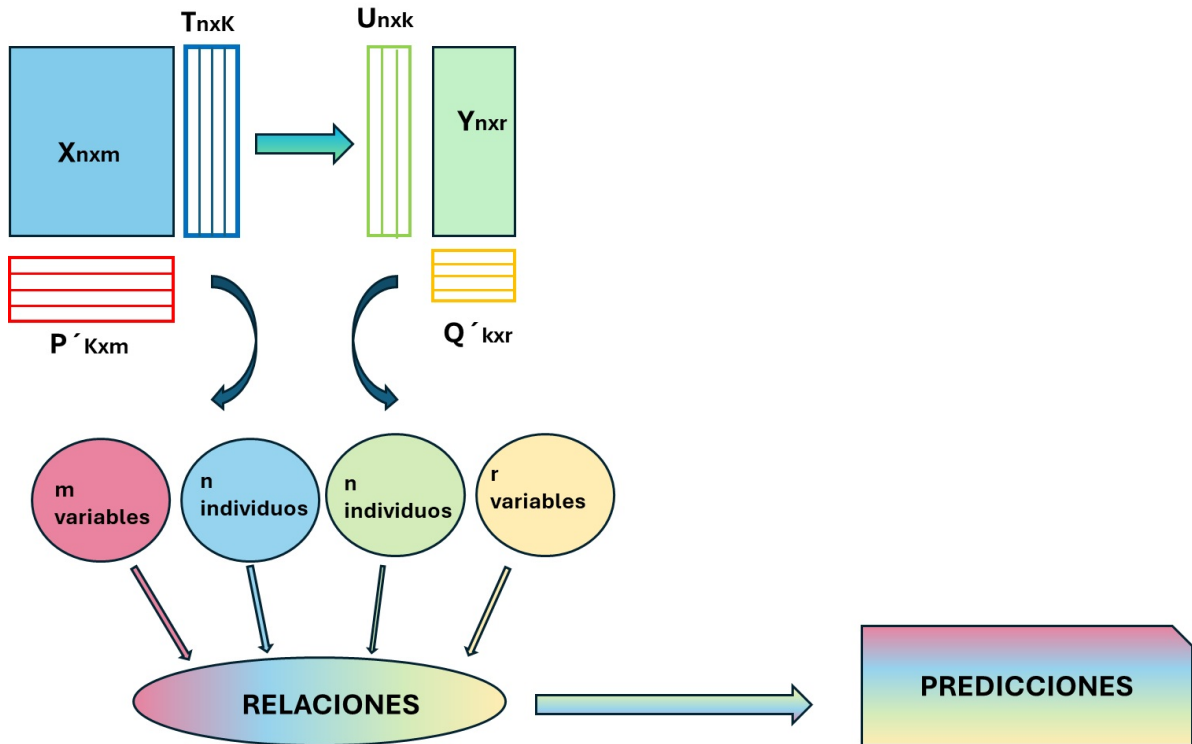


Figura 4.2. Esquema general de los resultados que proporciona PLS.

Existen un gran número de algoritmos PLS. Herman Wold desarrolló un primer algoritmo iterativo no lineal, sencillo pero eficiente, denominado *NIPALS* (*Nonlinear Iterative Partial Least Squares*) [Wold, 1975]. La técnica PLS es muy interesante cuando se analizan datos caracterizados por muchas variables predictoras, con problemas de multicolinealidad y pocas unidades experimentales de estudio. PLS reduce la cantidad de descriptores al extraer componentes no correlacionados basados en la covarianza entre las variables predictoras y las de respuesta. La regresión PLS es pues un método estadístico multivariante de aplicación actualmente generalizada. Combina y generaliza conceptos de Análisis de Componentes Principales y de análisis de Regresión Lineal Múltiple. Es particularmente útil cuando se desea predecir un conjunto de variables dependientes (Y) desde un conjunto (relativamente grande y posiblemente correlacionadas) de variables predictoras (X). De este modo es posible maximizar no solo la varianza de las X del sistema, sino también la varianza de las Y.

La regresión PLS reemplaza el espacio inicial de numerosas variables explicativas por un nuevo espacio de menor dimensionalidad definido por un pequeño número de variables, llamadas “factores” o “variables latentes”, que son construidas una después de la otra, consecutivamente de forma iterativa. Estos factores, serán las nuevas

variables explicativas de un modelo de regresión lineal clásica. Específicamente, busca un conjunto de componentes (denominados vectores latentes) que ejecutan una descomposición simultánea de X y de Y con la restricción de que estos componentes explican tanto como sea posible la covarianza entre X e Y . Este paso generaliza aproximación de componentes principales y es seguido por un paso de regresión donde la descomposición de X se usa para predecir Y .

El algoritmo de PLS genera una secuencia de modelos, en la que cada modelo adicional contiene un componente adicional. Estos componentes se calculan uno por uno, comenzando con las matrices estandarizadas de X y Y . Los componentes subsiguientes se derivan de las matrices de residuos de X y Y . El proceso se detiene cuando se alcanza el número máximo de componentes o cuando los residuos de X se convierten en una matriz de ceros. Cuando el número de componentes es igual al número de descriptores, el modelo PLS se asemeja al modelo de regresión de mínimos cuadrados. La validación cruzada se utiliza para determinar el número óptimo de componentes que minimiza el error de predicción. Un aspecto distintivo de PLS es que descompone tanto los descriptores como las respuestas simultáneamente. Después de que se determina el número de componentes y calcula las influencias, procede a calcular los coeficientes de regresión para cada predictor. Para obtener información más detallada acerca de PLS y NIPALS, se pueden consultar referencias adicionales, como [Geladi y Kowalski, 1986; Hoskuldsson, 1988; Lorber et al., 1987].

Este método es rápido, eficiente y óptimo para un criterio basado en covarianzas. Se recomienda en casos donde el número de variables es alto y donde es probable que las variables explicativas estén correlacionadas.

La idea de la regresión PLS es crear, a partir de una tabla con n observaciones descritas por p variables, un conjunto de h componentes con $h < p$. La determinación del número de componentes a conservar suele basarse en un criterio que implica una validación cruzada. El usuario también puede configurar la cantidad de componentes a utilizar.

Como hemos comentado, el algoritmo evalúa la capacidad predictiva de los posibles modelos para ayudarte a determinar cuántos componentes debes conservar en tu modelo. Cuando los datos contienen múltiples variables de respuesta, el algoritmo valida simultáneamente los componentes para todas las respuestas. El procedimiento de validación cruzada se lleva a cabo de la siguiente manera:

1. Para cada modelo potencial, se omite una observación o un grupo de observaciones, dependiendo del método de validación cruzada utilizado.
2. Luego, recalcula el modelo sin la observación o grupo de observaciones omitido.
3. Utiliza el modelo recalculado para predecir la respuesta o el valor ajustado con validación cruzada para la observación o grupo de observaciones omitido, y calcula el valor de residuo con validación cruzada.
4. Estos pasos se repiten hasta que todas las observaciones hayan sido omitidas y ajustadas.

Algunos programas diferencian PLS1 de PLS2. PLS1 corresponde al caso donde solo hay una variable dependiente, como es nuestro caso. PLS2 corresponde al caso donde existen varias variables dependientes. Los algoritmos utilizados por XLSTAT son tales que el PLS1 es sólo un caso particular del PLS2.

La ecuación del modelo de regresión PLS con h componentes se escribe:

$$\begin{aligned} Y &= T_h C'_h + E_h \\ &= X W_k^* C'_h + E_h \end{aligned}$$

donde Y es la matriz de las variables dependientes, X es la matriz de las variables explicativas. T_h , C_h , W_k^* , W_h y P_h son las matrices generadas por el algoritmo PLS, y E_h es la matriz de los residuales. La matriz de los coeficientes de regresión de Y en X con h componentes generados por el algoritmo de regresión PLS viene dada por:

$$B = W_h (P_h' W_h)^{-1} C'_h$$

La regresión PLS conduce a un modelo lineal.

Análisis de los para PLS por XLSTAT.

Vamos comentar en este apartado los resultados que proporciona la regresión PLS por XLSTAT.

Primeramente, se muestra los índices de calidad del modelo. La calidad corresponde aquí a la contribución acumulada de los componentes:

- El índice **Q²cum** mide la contribución global de los primeros componentes a la calidad predictiva del modelo (y de los submodelos si hay varias variables dependientes). El índice $Q^2cum(h)$ escribe:

$$Q^2cum(h) = 1 - \prod_{j=1}^h \frac{S_j}{S_0}$$

El índice involucra el estadístico PRESS (que requiere una validación cruzada) y la Suma de Cuadrados de Errores (SSE) para un modelo con un componente menos. La búsqueda del máximo del índice $Q^2cum(h)$ equivale a encontrar el modelo más estable.

- El índice **R²Ycum** es la suma de los coeficientes de determinación entre las variables dependientes y los primeros h componentes. Por tanto, es una medida del poder explicativo de los primeros componentes de las variables dependientes del modelo.

- El índice **R²Xcum** es la suma de los coeficientes de determinación entre las variables explicativas y los primeros h componentes. Es por tanto una medida del poder explicativo de los primeros componentes de las variables explicativas del modelo.

Se muestra un gráfico de barras para permitir visualizar la evolución de los tres índices cuando aumenta el número de componentes. Si bien los índices R^2Ycum y R^2Xcum aumentan necesariamente con el número de componentes, este no es el caso de Q^2cum .

También se muestra una tabla corresponde a la matriz de correlación de las variables explicativas y dependientes con las componentes t y u. Un gráfico muestra las correlaciones con los componentes t.

La siguiente tabla muestra los vectores w, seguidos de los vectores w* y los vectores c, que están directamente involucrados en el modelo, como se mostró anteriormente. Si para h=2 le corresponde un modelo válido, se demuestra que la proyección de los vectores x sobre los vectores y y sobre las variables en el gráfico de ejes w*/c, da una idea bastante aproximada del signo y del peso relativo de los correspondientes coeficientes en el modelo.

También se muestran en una tabla las puntuaciones de las observaciones en el espacio de los t componentes, así como el gráfico correspondiente. Si se han seleccionado algunas observaciones para la validación, se muestran en el gráfico.

También se muestra en forma de tabla las puntuaciones estandarizadas de las observaciones en el espacio de los componentes t . Estas puntuaciones equivalen a calcular las correlaciones de cada observación (representada por una variable indicadora) con los componentes. Esto permite mostrar las observaciones en el mapa de correlaciones que sigue donde se muestran simultáneamente los X s, los Y s y las observaciones.

También se muestra una tabla que corresponde a las puntuaciones de las observaciones en el espacio de las componentes u y luego $u\sim$. Se muestra el gráfico basado en u . Si se han seleccionado algunas observaciones para la validación, se muestran en el gráfico.

Otra de las tablas que muestra es la tabla con los **índices de calidad Q^2** que permite visualizar cómo los componentes contribuyen a la explicación de las variables dependientes. La tabla de **índices de calidad Q^2 acumulados** permite medir la calidad que corresponde a un espacio con un número creciente de dimensiones.

La tabla del **R^2 y redundancias** entre las variables de entrada (dependientes y explicativas) y los componentes t y u permiten evaluar el poder explicativo de t y u . La redundancia entre una tabla X (n filas y p variables) y un c componente es la parte de la varianza de X explicada por c . Lo definimos como la media de los cuadrados de los coeficientes de correlación entre las variables y el componente:

$$Rd(X, c) = \frac{1}{p} \sum_{j=1}^p R^2(x_j, c)$$

De las redundancias se pueden deducir las VIPs (“Variable Importance for the Projection”) que miden la importancia de una variable explicativa para la construcción de los componentes t . El VIPs para la j variables explicativa y los h componentes se define por:

$$VIP_{hj} = \sqrt{\frac{p}{\sum_{i=1}^h R^2(x_j, t_i)}} \sum_{i=1}^h R^2(x_j, t_i)$$

En los gráficos VIPs (un gráfico de barras por componente), se traza una línea de borde para identificar los VIPs mayores que 0,8 y superiores: estos umbrales permiten identificar los variables que son moderadamente ($0.8 < \text{VIP} < 1$) o muy influyentes ($\text{VIP} > 1$).

Otro valor reportado es el análisis de valores atípicos. Las DModX (distancias de cada observación al modelo en el espacio de las variables X) permiten identificar los valores atípicos para las variables explicativas, mientras que las DModY (distancias de cada observación al modelo en el espacio de las variables Y) permiten identificar los valores atípicos para las variables dependientes.

En los gráficos correspondientes también se muestran los valores umbral DCrit para ayudar a identificar los valores atípicos: los valores DMod que están por encima del umbral DCrit corresponden a valores atípicos. Los DCrit se calculan utilizando los valores umbral utilizados clásicamente en los diagramas tipo caja. El valor de DModX para la observación i -ésima escribe:

$$DModX_i = \sqrt{\frac{1}{n} \sum_{j=1}^p e(X, t)_{ij}^2}$$

donde $e(X, t)_{ij}$ ($i = 1 \dots n$) son los residuos de la regresión de X en el j -ésimo componente.

El valor del DModY para la i -ésima observación escribe:

$$DModY_i = \sqrt{\sum_{j=1}^q e(Y, t)_{ij}^2}$$

donde q es el número de variables dependientes y $e(Y, t)_{ij}$ ($i = 1 \dots n$) son los residuos de la regresión de Y en el j -ésimo componente.

También se presenta una tabla donde se presenta los parámetros de los modelos correspondientes a una o más variables dependientes. También puede aparecer la ecuación correspondiente a cada modelo, si el número de variables explicativas no supera las 20.

Para cada variable dependiente del modelo se muestra también una serie de tablas y gráficos que analizan la bondad del ajuste :

La tabla de coeficientes estandarizados (también llamados coeficientes beta) permite comparar el peso relativo de las variables en el modelo. Para calcular los intervalos de confianza, en el caso de la regresión PLS, no se aplican las fórmulas clásicas basadas en las hipótesis de normalidad utilizadas en la regresión mínimos cuadrados ordinarios. Un método bootstrap permite estimar los intervalos de confianza. Cuanto mayor sea el valor absoluto de un coeficiente, mayor será el peso de la variable en el modelo. Cuando el intervalo de confianza alrededor de los coeficientes estandarizados incluye 0, lo que se puede observar fácilmente en el gráfico, el peso de la variable en el modelo no es significativo.

En la tabla de predicciones y residuos se muestra el peso, el valor observado de la variable dependiente, la predicción correspondiente, los residuos y los intervalos de confianza para cada observación. Se muestran dos tipos de intervalos de confianza: un intervalo alrededor de la media (corresponde al caso en el que la predicción se realiza para un número infinito de observaciones con un conjunto determinado de valores de las variables explicativas) y un intervalo alrededor de una predicción individual (corresponde al caso donde la predicción se realiza para una sola observación). El segundo intervalo es siempre más amplio que el primero, ya que, por supuesto, la incertidumbre es mayor. Si se han seleccionado algunas observaciones para la validación, se muestran en esta tabla.

También se muestran una serie de gráficos que permiten visualizar: (i) los residuos versus la variable dependiente, (ii) la distancia entre los valores predichos y observados (para un modelo ideal, todos los puntos estarían en la línea bisectriz) y (ii) el gráfico de barras de los residuos.

Si ha seleccionado datos para usar en el modo de predicción, una tabla muestra las predicciones sobre las nuevas observaciones y los intervalos de confianza correspondientes.

Para la evaluación del modelo emplearemos como índices de calidad los que se comentan a continuación:

- El índice **Q²cum** mide la contribución global de los primeros componentes a la calidad predictiva del modelo
- El índice **R²Ycum** es la suma de los coeficientes de determinación entre las variables dependientes y los primeros h componentes.
- El índice **R²Xcum** es la suma de los coeficientes de determinación entre las variables explicativas y los primeros h componentes.
- El índice **R²** de la representación de los valores experimentales frente a los calculados.
- La **pendiente** de la representación de los valores experimentales frente a los calculados.
- La **representación de los valores residuales** de los valores experimentales y calculados por el modelo.
- La **ecuación del modelo y los coeficientes para los descriptores de la ecuación de regresión del modelo.**
- De manera novedosa la relación del **coeficiente del descriptor** pirrolidinio entre el descriptor imidazolio o la diferencia entre ellos (cuando el valor para el catión imidazolio se negativo). Es un hecho experimental muy fuertemente constatado que el catión pirrolidinio es menos tóxico que el catión imidazolio. Así el cociente de sus coeficientes o la diferencia de los mismos según el caso tiene que ser lo mayor posible.
- Se propondrá también un **modelo mecanicista de toxicidad** que corroborará los resultados obtenidos mediante el modelo estadístico matemático.

5. RESULTADOS Y DISCUSIÓN

En la sección de Resultados y Discusión se procederá en primer lugar a estudiar y comparar la toxicidad de los líquidos iónicos en relación a los disolventes orgánicos convencionales, para posteriormente analizar de forma específica la toxicidad de los líquidos iónicos a cada uno de los microorganismos objeto de estudio, es decir, *Vibrio fischeri*, *Daphnia magna* y *Pseudokirchneriella subcapitata*. Se analizarán de forma cualitativa los hallazgos más importantes para cada uno de los microorganismos, lo que nos ayudará a definir los diferentes descriptores para cada especie. Una vez definidos los descriptores se desarrollará el modelo QSAR para cada microorganismo, previa curación de los datos experimentales. El desarrollo de los modelos cualitativos nos va a permitir establecer relaciones cuantitativas entre la estructura de líquidos iónicos y su toxicidad. Los resultados de los modelos y la comparación de los modelos para los diferentes microorganismos ayudarán al establecimiento de mecanismos generales de toxicidad de los líquidos iónicos y al diseño de nuevos líquidos iónicos de baja o nula toxicidad.

5.1. CONSIDERACIONES SOBRE LA TOXICIDAD DE LÍQUIDOS IÓNICOS Y LOS DISOLVENTES ORGÁNICOS CONVENCIONALES

En la Tabla 5.1 se presentan los valores de ecotoxicidad de líquidos iónicos representativos y de disolventes orgánicos para los organismos acuáticos anteriormente citados. Las tablas con los valores de toxicidad para todos los líquidos iónicos encontrados en bibliografía se encuentran recogidas en el ANEXO I (*V. fischeri*), ANEXO II (*D. magna*) y ANEXO III (*P. Subcapitata*).

Disolvente orgánico	<i>D. magna</i> log LC50 (µM) (48h)	<i>P. subcapitata</i> Log EC50 (µM)	<i>V. fischeri</i> Microtox® Log EC50 (µM) (15 min)	<i>D. subspicatus</i> IC50 (mg/L) (72h)	Toxicidad en peces LC50 (mg/L) (96h)
Acetona	5,37 ^[32,33]	5,85 (10min) ^[23]	5,39 ^[30]	—	- Oncorhynchus mykiss (Trucha irisada): 5.540 ^[1]
Acetonitrilo	5,39 ^[32,33]	4,67 (48h) ^[1]	5,77 ^[33]	—	- Pimephales promelas (Piscardo de cabeza gorda): 1640 ^[1]
Cloroformo	2,24 ^[32,33]	2,28 (48h) ^[1]	4.00 ^[8] 3.35-4.32 ^[33]	—	-Leuciscus idus (Carpa dorada) (48 h): 162 ^[1] -Danio rerio (pez cebra) (96 h):: 121 ^[1]
Diclorometano	3,42 ^[32,33]	3,88 (72h) ^[1]	4,47 ^[8]	—	- Pimephales promelas (Piscardo de cabeza gorda): 193 ^[1]
Tolueno	1,81 ^[1]	2,03 (24 h) ^[1]	2,54 ^[8] 2,29-2,64 ^[33]	—	- Lepomis macrochirus (Pez): - 74- 340 ^[1] - Oncorhynchus mykiss (Trucha irisada): 7,63 ^[1]
Benceno	—	—	3,14 ^[11b]	—	—

Disolventes Orgánicos	<i>D. magna</i> log LC50 (µM) (48h)	<i>P. subcapitata</i> Log EC50 (µM)	<i>V. fischeri</i> Microtox® Log EC50 (µM) (15 min)	<i>D. subspicatus</i> IC50 (mg/L) (72h)	Toxicidad en peces LC50 (mg/L) (96h)
n-Hexano	1,65 ^[1]	—	—	—	- Pimephales promelas (Piscardo de cabeza gorda): 2,5 ^[1]
MTBE	3,87 ^[4]	—	3,89 ^[33]	—	—
Isopropanol	5,22 ^[32,33]	5,77(10min) ^[23]	—	—	—
Etanol	5,33 ^[32,33]	5,94(10min) ^[23]	—	—	—
Metanol	5,88 ^[14] 5,85 ^[32,33]	6,41(10min) [11,23]	6,50 ^[33]	—	—
Amoniaco	2,46 ^[21]	—	—	—	—
Fenol	2,16 ^[22]	—	2,51 ^[33]	—	—
Piridina	—	—	3,87 ^[2]	—	—

Líquidos iónicos Imidazolio.	<i>D. magna</i> log LC50 (µM) (48h)	<i>P. subcapitata</i> Log EC50 (µM)	<i>V. fischeri</i> Microtox® Log EC50 (µM) (15 min)	<i>D. subspicatus</i> IC50 (mg/L) (72h)	Toxicidad en peces LC50 (mg/L) (96h)
[C ₁ mim][MeSO ₄] Metilsulfato de 1,3- dimetilimidazolio	—	—	> 4,76 ^[7]	—	—
[C ₂ mim][Cl] Cloruro de 1-etil-3- metilimidazolio	—	—	4,55 ^[13]	—	—
[C ₄ mim][PF ₆] Hexafluorofosfato de 1-butil-3-metil imidazolio	1,93 ^[4]	2,20 (72h) ^[4]	3,07 ^[5]	—	- Danio rerio (pez cebra) (96h):>100 ^[6]
[C ₄ mim][Cl] Cloruro de 1-butil-3- metilimidazolio	1,85 ^[5]	2,34 (72h) ^[4]	3,34 ^[5]	—	—
[C ₄ mim][BF ₄] Tetrafluoroborato de 1-butil-3- metilimidazolio	1,67 ^[3]	—	3,20 ^[19]	—	- Danio rerio (pez cebra) (96h): >100 ^[6]
[C ₄ mim][Br] Bromuro de 1-butil- 3-metilimidazolio	1,78 ^[5]	3,36 (72h) ^[12]	4,01 ^[8]	—	—

Líquidos iónicos Imidazolio.	D, magna log LC50 (µM) (48h)	P, subcapitata Log EC50 (µM)	V. fischeri Microtox® Log EC50 (µM) (15 min)	D, subspicatus IC50 (mg/L) (72h)	Toxicidad en peces LC50 (mg/L) (96)
[C ₄ mim][NTf ₂] Bis[{trifluorometil} s ulfonil]imida de 1- butil-3- metilimidazolio	1,65 ^[14]	1,80 (72h) ^[14]	2,48 ^[29]	—	- Danio rerio (pez cebra) (96h): >100 ^[6]
[C ₄ mim][dca] Dicianamida de 1-butil-3-metil imidazolio	1,70 ^[19]	—	3,11 ^[19]	>100 ^[1]	- Danio rerio (pez cebra) (96h): >100 ^[6]
[C ₆ mim][BF ₄] Tetrafluoroborato de 1-hexil-3- metilimidazolio	1,13 (24 h) ^[5]	—	3,18 (30 min) ^[9]	—	—
[C ₈ mim][Br] Bromuro de 3-metil- 1-octilimidazolio	0,94 ^[10]	1,63 (72h) ^[12]	0,63 ^[8]	—	—
[C ₂ (Him) ₂] ₂ [Cl] ₂ Cloruro de 1,10-(1,2- etanodiil)bis- imidazolio	—	2,46 (72h) ^[14]	—	—	- Danio rerio (pez cebra) (48h): >100 ^[14]
[C ₂ Clmim][Cl] Cloruro de 1- (2- cloroetil)-3- metilimidazolio	0,04 (24 h) ^[5]	2,62 (72h) ^[14]	2,32 ^[5]	—	- Danio rerio (pez cebra) (48h): >100 ^[14]
[C ₂ Clmim][NTf ₂] Bis[{trifluorometil} s ulfonil]imida de 1- cloroetil-3-metil- imidazolio	—	2,22 (72h) ^[14]	—	—	- Danio rerio (pez cebra) (48h): >100 ^[14]

Líquidos iónicos Piridinio	<i>D. magna</i> log LC50 (µM) (48h)	<i>P. subcapitata</i> Log EC50 (µM)	<i>V. fischeri</i> Microtox® Log EC50 (µM) (15 min)	<i>D. subspicatus</i> IC50 (mg/L) (72h)	Toxicidad en peces LC50 (mg/L) (96h)
[BM ₃ Py][Br] Bromuro de N-butil- 3-metilpiridinio	1,76 ^[2]	3,70 (72h) ^[12]	2,75 ^[8]	—	—
[BM ₃ Py][dca] Dicianamida de N- butil-3-metilpiridinio	—	—	2,66 ^[8]	<100 ^[1]	—
[BDM ₃ Py][Br] Bromuro de N-butil- 3,5-dimetilpiridinio	1,99 ^[8]	—	2,69 ^[8]	—	—
[OM ₃ Py][Br] Bromuro de N-octil- 3-metilpiridinio	0,4 ^[2]	1,74 (10 min) ^[11]	0,79 ^[8]	—	—

Líquidos iónicos Pirrolidinio y morfolinio	<i>D. magna</i> log LC50 (µM) (48h)	<i>P. subcapitata</i> Log EC50 (µM)	<i>V. fischeri</i> Microtox® Log EC50 (µM) (15 min)	<i>D. subspicatus</i> IC50 (mg/L) (72h)	Toxicidad en peces LC50 (mg/L) (96h)
[BMPyrr][NTf ₂] Bis[{trifluorometil} s ulfonil]imida de 1- butil-3- metilpirrolidinio	—	—	2,54 ^[27]	—	- Danio rerio (pez cebra) (96h): >100 ^[6]
[BMPyrr][Cl] Cloruro de 1-butyl-4 -metilpirrolidinio	—	—	> 4,30 ^[27]	—	—
[BMPyrr][Br] Bromuro de 1-butyl- 3- metilpirrolidinio	—	3,97 (72h) ^[12]	—	—	—
[EMmor][Br] Bromuro de etil- metilmorfolinio	—	—	5,21 (30 min) ^[28]	—	- Danio rerio (pez cebra) (48h): >100 ^[14]
[BMmor][Br] Bromuro de butilmetil morfilinio	—	—	>4.30 ^[27]	—	—

Líquidos iónicos Amonio, fosfonio y sulfonio	<i>D. magna</i> log LC50 (µM) (48h)	<i>P. subcapitata</i> Log EC50 (µM)	<i>V. fischeri</i> Microtox® Log EC50 (µM) (15 min)	<i>D. subspicatus</i> IC50 (mg/L) (72h)	Toxicidad en peces LC50 (mg/L) (96h)
[N _{1,1,1,1}][Br] Bromuro de tetrametilamonio	—	—	>5 ^[2]	—	—
[N _{4,4,4,4}][Br] Bromuro de tetrabutilamonio	1,47 ^[2]	—	3,27 ^[2]	—	—
[N _{6,2,2,2}][Br] Bromuro de hexiltriethylamonio	—	—	2,46 ^[2]	—	—
[Chol][PF ₆] Hexafluorofosfato de colinio	—	2,18 (72h) ^[14]	—	—	- Danio rerio (pez cebra) (48h):>100 ^[14]
[P _{4,4,4,4}][Br] Bromuro de tetrabutilfosfonio	1,45 ^[14]	2,19 (72h) ^[12]	2,71 ^[2]	—	-Leuciscus idus (Carpa dorada) (48h): 100- 1000 ^[1]
[S _{2,2,2}][Br] Bromuro de trietilsulfonio	—	2,34 (72h) ^[14]	—	—	- Danio rerio (pez cebra) (48h): >100 ^[14]

[1] MSDS (acetino, acetonitrilo, cloroformo, diclorometano, tolueno, hexano, Bmimdca, P444Br; [2] Couling *et al.* (2005); [4] Wells and Coombe (2006); [5] García *et al.* (2005); [6] Pretti *et al.* (2006); [7] Romero *et al.* (2008); [8] Docherty *et al.* (2005); [9] Ranke *et al.* (2004); [10] Yu *et al.* (2009); [11] Pham *et al.* (2008); [12] Cho *et al.* (2007); [13] Luis *et al.* (2007); [14] Pretti *et al.* (2009); [19] Samori *et al.* (2010); [21] Kaniewska-Prus *et al.* (1982); [22] Cowgill and Milazzo (1991); [23] García *et al.* (2001); [27] Stolte *et al.* (2007); [28] Pretti *et al.* (2011); [29] Matzke *et al.* (2007); [30] Chem and Que Hee (1995); [32] Kaiser *et al.* (1987) y [33] Kaiser *et al.* (1991).

En primer lugar, al comparar los valores de toxicidad de los líquidos iónicos y de los disolventes orgánicos podemos observar como algunos líquidos iónicos son más tóxicos que los disolventes orgánicos convencionales y otros menos tóxicos. Este comportamiento es perfectamente lógico si pensamos que el término líquido iónico engloba a un conjunto de compuestos con estructuras químicas muy diferentes que por lo tanto presentarán comportamiento toxicológico diferentes. La propiedad que tienen en común todos los líquidos iónicos es que presentan una presión de vapor muy baja, al contrario que los disolventes orgánicos convencionales, lo que evita la contaminación del aire y la intoxicación por los mismos al disminuir su movilidad. Por esto último se conocen como “*disolventes verdes*”. Es importante destacar, que se observan notables diferencias de toxicidad entre los líquidos iónicos relacionadas con las diferencias en su estructura (composición catiónica y aniónica), lo que sugiere que modificando ésta se pueden sintetizar líquidos iónicos con un menor grado de toxicidad. Esta posibilidad supondría una enorme ventaja añadida a su baja presión de vapor, de cara a la utilización de estos compuestos como sustitutos de los disolventes tradicionales. En este contexto, los modelos QSAR nos podrían ser de gran utilidad para establecer reglas que permitiesen el diseño de líquidos iónicos menos tóxicos.

5.2. RELACIONES CUALITATIVAS ENTRE LAS ESTRUCTURA Y LA TOXICIDAD Y DEFINICIÓN DE DESCRIPTORES DE LOS MODELOS QSAR.

Debido a su extensión, se recogen en los Anexos I, II y III en forma de tablas, los datos de toxicidad de líquidos iónicos para los tres microorganismos estudiados *V. fischeri*, *D. magna* y *P. subcapitata*, respectivamente. En ellos se refleja el nombre abreviado de los líquidos iónicos, el logaritmo de la toxicidad expresada en micromoles L⁻¹, los descriptores basados en la estructura química de los líquidos iónicos y la referencia bibliográfica de donde se han obtenido los valores empíricos.

En una primera etapa es necesario definir los descriptores de la forma más simplificada posible, pero sin perder información sobre la influencia de estos en la toxicidad. Para ello se han establecido relaciones cualitativas que nos permitan una definición racional de los descriptores. La metodología PLS que nos va a permitir seleccionar aquellos descriptores o estructuras que tengan menos influencia en los valores de toxicidad. A pesar de ellos vamos a considerar los máximos descriptores o estructuras posibles con el

fin de poder comparar entre ellas y poder determinar cuáles de los mismos son más o menos tóxicas y obtener de esta forma un criterio cualitativo de selección de las estructuras menos tóxicas.

Para establecer las relaciones cualitativas necesarias para la definición de los descriptores vamos a emplear el nombre abreviado de los líquidos iónicos que se recogen en la Tabla 5.2.

Tabla 5.2. Nombre abreviado de los diferentes líquidos iónicos de la presente memoria empleados en el estudio de (a) *D. magna*, (b) *V. fisheri* y (c) *P. subcapitata*.

Nombre	Nombre abreviado	
	Catión	Anión
Trifluoroacetato de imidazolio	[im]	[CF ₃ COO]
Acetato de imidazolio	[im]	[CH ₃ COO]
Trifluorometanosulfonato de imidazolio	[im]	[CF ₃ SO ₃]
Caprilato de imidazolio	[im]	[Cap]
Trifluoroacetato de 1-metilimidazolio	[C ₁ im]	[CF ₃ COO]
Acetato de 1-metilimidazolio	[C ₁ im]	[CH ₃ COO]
Trifluorometanosulfonato de 1-metilimidazolio	[C ₁ im]	[CF ₃ SO ₃]
Caprilato de 1-metilimidazolio	[C ₁ im]	[Cap]
Formiato de 1-metilimidazolio	[C ₁ im]	[HCOO]
Cloruro de 1-metilimidazolio	[C ₁ im]	[Cl]
Cloruro de 1-metil-2-metilimidazolio	[C ₁ C ₁ im]	[Cl]
Metilsulfato de metiloxazolinio	[Moxa]	[C ₁ OSO ₃]
Metilsulfato de 1-metil-3-metilimidazolio	[C ₁ mim]	[C ₁ OSO ₃]
Bis(trifluorometilsulfonil)imida de 1-metil-1-metilimidazolio	[C ₁ mim]	[NTf ₂]
Bis(trifluorometilsulfonil)imida de 1-etilimidazolio	[C ₂ im]	[NTf ₂]
Cloruro de 1-etilimidazolio	[C ₂ im]	[Cl]
Etilsulfato de 1-etil-3-metilimidazolio	[C ₂ mim]	[C ₂ OSO ₃]
Bromuro de 1-etil-3-metilimidazolio	[C ₂ mim]	[Br]
Cloruro de 1-etil-3-metilimidazolio	[C ₂ mim]	[Cl]
Tetracianoborato de 1-etil-3-metilimidazolio	[C ₂ mim]	[B(CN) ₄]
Tiocianato de 1-etil-3-metilimidazolio	[C ₂ mim]	[SCN]
Tetracloroferrato de 1-etil-3-metilimidazolio	[C ₂ mim]	[FeCl ₄]
Hexafluorofosfato de 1-etil-3-metilimidazolio	[C ₂ mim]	[PF ₆]
Tris(pentafluoruroetil)trifluorofosfato de 1-etil-3-metilimidazolio	[C ₂ mim]	[(C ₂ F ₅) ₃ PF ₃]
Acetato de 1-etil-3-metilimidazolio	[C ₂ mim]	[CH ₃ COO]

Nombre	Nombre abreviado	
	Catión	Anión
Trifluorometanosulfonato de 1-etil-3-metilimidazolio	[C ₂ mim]	[CF ₃ SO ₃]
Bis(trifluorometilsulfonil)imida de 1-etil-3-metilimidazolio	[C ₂ mim]	[NTf ₂]
Bis(trifluorometilsulfonil)imida de 1-etil-3-etilimidazolio	[C ₂ C ₂ mim]	[NTf ₂]
Dicianamida de 1-etil-3-metilimidazolio	[C ₂ mim]	[N(CN) ₂]
Perfluorobutanatosulfonato de 1-etil-3-metilimidazolio	[C ₂ mim]	[C ₂ F ₉ SO ₃]
Perfluoropentanoato de 1-etil-3-metilimidazolio	[C ₂ mim]	[C ₂ F ₉ CO ₂]
Nitrato de 1-etil-3-metilimidazolio	[C ₂ mim]	[NO ₃]
Perfluorobutanatosulfonato de 1-hidroxietil-3-metilimidazolio	[C ₂ OHmim]	[C ₄ F ₉ SO ₃]
Perfluoropentanonato de 1-hidroxietil-3-metilimidazolio	[C ₂ OHmim]	[C ₄ F ₉ SO ₃]
Bis(trifluorometilsulfonil)imida de 1-etil-2,3-dimetilimidazolio	[C ₂ -23mim]	[NTf ₂]
Bis(trifluorometilsulfonil)imida de 1-etil-3-propilimidazolio	[C ₂ C ₃ mim]	[NTf ₂]
Tricianometanuro de 1-etil-3-metilimidazolio	[C ₂ mim]	[TCM]
Glicinato de 1-hidroxietil-3-metilimidazolio	[OHC ₂ mim]	[Gly]
Alanato de 1-hidroxietil-3-metilimidazolio	[OHC ₂ mim]	[Ala]
Serinato de 1-hidroxietil-3-metilimidazolio	[OHC ₂ mim]	[Ser]
Prolinato de 1-hidroxietil-3-metilimidazolio	[OHC ₂ mim]	[Pro]
Cloruro de 1-(2-cloroetil)imidazolio	[12ClC ₂ mim]	[Cl]
Cloruro de 1-(2-cloroetil)-3-metilimidazolio	[12ClC ₂ mim]	[Cl]
Bis(trifluorometilsulfonil)imida de 1-(2-cloroetil)-3-metilimidazolio	[12ClC ₂ mim]	[NTf ₂]
Bis(trifluorometilsulfonil)imida de 1-(2-hidroxietil)-3-metilimidazolium	[1,2OHC ₂ mim]	[NTf ₂]
Hexafluorofosfato de 1-propil-3-metilimidazolio	[C ₃ mim]	[PF ₆]
Tetrafluoroborato de 1-propil-3-metilimidazolio	[C ₃ mim]	[BF ₄]
Bromuro de 1-propil-3-metilimidazolio	[C ₃ mim]	[Br]
Cloruro de 1-hidroxipropil-3-metilimidazolio	[HOC ₃ mim]	[Cl]
Dicianimida de 1-hidroxipropil-3-	[HOC ₃ mim]	[dca]

Nombre	Nombre abreviado	
	Catión	Anión
metilimidazolio		
Bis(trifluorometilsulfonil)imida de 1-propil-3-metilimidazolio	[C ₃ mim]	[NTf ₂]
Bis(trifluorometilsulfonil)imida de 1-propil-2,3-dimetilimidazolio	[C ₃ -23mim]	[NTf ₂]
Bis(trifluorometilsulfonil)imida de 1-propil-3-propilimidazolio	[C ₃ -C ₃ im]	[NTf ₂]
Acetato de 1-butilimidazolio	[C ₄ im]	[CH ₃ COO]
Caprilato de 1-butilimidazolio	[C ₄ im]	[Cap]
Trifluorometanosulfonato de 1-butilimidazolio	[C ₄ im]	[CF ₃ SO ₃]
Formiato de 1-butilimidazolio	[C ₄ im]	[HCOO]
Trifluoroacetato de 1-butilimidazolio	[C ₄ im]	[CF ₃ COO]
Hexafluorofosfato de 1-butil-3-metilimidazolio	[C ₄ mim]	[PF ₆]
Cloruro de 1-butil-3-metilimidazolio	[C ₄ mim]	[Cl]
Acetato de 1-butil-3-metilimidazolio	[C ₄ mim]	[OAC]
Tetrafluoroborato de 1-butil-3-metilimidazolio	[C ₄ mim]	[BF ₄]
Bromuro de 1-butil-3-metilimidazolio	[C ₄ mim]	[Br]
Bromuro de 1-butil-2,3-dimetilimidazolio	[C ₄ 23mim]	[Br]
Bromuro de 1-butil-3-metilimidazolio	[C ₄ mim]	[Br]
Metilsulfato de 1-butil-3-metilimidazolio	[C ₄ mim]	[CH ₃ SO ₄]
Nitrato de 1-butil-3-metilimidazolio	[C ₄ mim]	[NO ₃]
Bis(trifluorometilsulfonil)imida de 1-butil-3-metilimidazolio	[C ₄ mim]	[NTf ₂]
Bis(trifluorometilsulfonil)imida de 1-isobutil-3-metilimidazolio	[iC ₄ mim]	[NTf ₂]
Dicianamida de 1-butil-3-metilimidazolio	[C ₄ mim]	[N(CN) ₂]
Tiocianato de 1-butil-3-metilimidazolio	[C ₄ mim]	[SCN]
Tosilato de 1-butil-3-metilimidazolio	[C ₄ mim]	[pTS]
Octilsulfato de 1-butil-3-metilimidazolio	[C ₄ mim]	[C ₈ OSO ₃]
Hidrogenosulfato de 1-butil-3-metilimidazolio	[C ₄ mim]	[HOSO ₃]
Metilsulfato de 1-butil-3-metilimidazolio	[C ₄ mim]	[C ₁ OSO ₃]
Etilsulfato de 1-butil-3-metilimidazolio	[C ₄ mim]	[C ₂ OSO ₃]
Metilsulfato de 1-butil-2-fenil-3-metilimidazolio	[C ₄ Femim]	[C ₁ OSO ₃]
Bis(trifluorometilsulfonil)imida de 1-butil-3-metilimidazolio	[C ₄ mim]	[(CF ₃) ₂ CN]
Trifluorometanosulfonato de 1-butil-3-metilimidazolio	[C ₄ mim]	[CF ₃ SO ₃]

Nombre	Nombre abreviado	
	Catión	Anión
Tetracloroferrato de 1-butil-3-metilimidazolio	[C ₄ mim]	[FeCl ₄]
Tetrafluoroborato de 1-butil-3-etilimidazolio	[C ₄ C ₂ im]	[BF ₄]
Tricianometanuro de 1-butil-3-metilimidazolio	[C ₄ mim]	[TCM]
2-(2-metoxietoxi)etilsulfato de 1-butil-3-metilimidazolio	[C ₄ mim]	[C ₅ SO ₆]
Bis(trifluorometilsulfonil)imida de 1-butil-2,3-dimetilimidazolio	[C ₄ -23mim]	[NTf ₂]
Bis(trifluorometilsulfonil)imida de 1-butil-3-butilimidazolio	[C ₄ -C ₄ im]	[NTf ₂]
Hexafluoroantimoniato de 1-butil-3-metilimidazolio	[C ₄ mim]	[SbF ₆]
Octilsulfato de 1-butil-3-metilimidazolio	[C ₄ mim]	[C ₈ H ₁₇ SO ₄]
Tetrafluoroborato de 1-pentil-3-metilimidazolio	[C ₅ mim]	[BF ₄]
Bis(trifluorometilsulfonil)imida de 1-pentil-3-metilimidazolio	[C ₅ mim]	[NTf ₂]
Bis(trifluorometilsulfonil)imida de 1-pentil-3-pentilimidazolio	[C ₅ C ₅ im]	[NTf ₂]
Cloruro de 1-pentil-3-metilimidazolio	[C ₅ mim]	[Cl]
Hexafluorofoafato de 1-hexil-3-metilimidazolio	[C ₆ mim]	[PF ₆]
Cloruro de 1-hexil-3-metilimidazolio	[C ₆ mim]	[Cl]
Bromuro de 1-hexil-3-metilimidazolio	[C ₆ mim]	[Br]
Tetrafluoroborato de 1-hexil-3-metilimidazolio	[C ₆ mim]	[BF ₄]
Nitrato de 1-hexil-3-metilimidazolio	[C ₆ mim]	[NO ₃]
Bromuro de 1-hexil-3-metilimidazolio	[C ₆ mim]	[Br]
Bromuro de 1-hexil-2,3-metilimidazolio	[C ₆ 23mim]	[Br]
Bis(trifluorometilsulfonil)imida de 1-hexil-3-metilimidazolio	[C ₆ mim]	[NTf ₂]
Bis(trifluorometilsulfonil)imida de 1-hexil-3-hexilimidazolio	[C ₆ C ₆ im]	[NTf ₂]
Cloruro de 1-hexil-2,3-dimetilimidazolio	[C ₆ -23mim]	[Cl]
Tetrafluoroborato de 1-hexil-3-etilimidazolio	[C ₆ C ₂ im]	[BF ₄]
Bis(trifluorometilsulfonil)imida de 1-heptil-3-metilimidazolio	[C ₇ mim]	[NTf ₂]
Tetrafluoroborato de 1-heptil-3-metilimidazolio	[C ₇ mim]	[BF ₄]
Bromuro de 1-octil-1-metilimidazolio	[C ₈ mim]	[Br]

Nombre	Nombre abreviado	
	Catión	Anión
Bromuro de 1-octil-2,3-metilimidazolio	[C ₈ 23mim]	[Br]
Tetrafluoroborato de 1-octil-3-metilimidazolio	[C ₈ mim]	[BF ₄]
Cloruro de 1-octil-3-metilimidazolio	[C ₈ mim]	[Cl]
Nitrato de 1-octil-3-metilimidazolio	[C ₈ mim]	[NO ₃]
Hexafluorofosfato de 1-octil-3-metilimidazolio	[C ₈ mim]	[PF ₆]
Bis(trifluorometilsulfonyl)imida de 1-octil-3-metilimidazolio	[C ₈ mim]	[NTf ₂]
Hexafluoroantimonato de 1-octil-3-metilimidazolio	[C ₈ mim]	[SbF ₆]
Tetrafluoroborato de 1-nonil-3-metilimidazolio	[C ₉ mim]	[BF ₄]
Nitrato de 1-decil-3-metilimidazolio	[C ₁₀ mim]	[NO ₃]
Bromuro de 1-decil-3-metilimidazolio	[C ₁₀ mim]	[Br]
Tetrafluoroborato de 1-decil-3-metilimidazolio	[C ₁₀ mim]	[BF ₄]
Cloruro de 1-decil-3-metilimidazolio	[C ₁₀ mim]	[Cl]
Bromuro de 1-C ₂ COC10-3-metilimidazolio	[C ₂ OCOC ₁₀ mim]	[Br]
Tetracloroferrato de 1-decil-3-metilimidazolio	[C ₁₀ mim]	[FeCl ₄]
Nitrato de 1-dodecil-3-metilimidazolio	[C ₁₂ mim]	[NO ₃]
Bromuro de 1-dodecil-3-metilimidazolio	[C ₁₂ mim]	[Br]
Cloruro de 1-dodecil-3-metilimidazolio	[C ₁₂ mim]	[Cl]
Cloruro de 1-tetradecil-3-metilimidazolio	[C ₁₄ mim]	[Cl]
Cloruro de 1-hexadecil-3-metilimidazolio	[C ₁₆ mim]	[Cl]
Cloruro de 1-octadecil-3-metilimidazolio	[C ₁₈ mim]	[Cl]
Tetrafluoroborato de 1-(2-metoxietil)-3-metilimidazolio	[MOC ₂ mim]	[BF ₄]
Dicianamida de 1-(2-metoxietil)-3-metilimidazolio	[MOC ₂ mim]	[N(CN) ₂]
Tetrafluoroborato de 1-(2-metoxietil)2-3-metilimidazolio	[M(OC ₂) ₂ mim]	[BF ₄]
Cloruro de 1-(2-metoxietil)2-3-metilimidazolio	[M(OC ₂) ₂ mim]	[Cl]
Dicianamida de 1-(2-metoxietil)2-3-metilimidazolio	[M(OC ₂) ₂ mim]	[N(CN) ₂]
Tetrafluoroborato de 1-(2-metoxietil)3-3-metilimidazolio	[M(OC ₂) ₃ mim]	[BF ₄]
Dicianamida de 1-(2-metoxietil)3-3-metilimidazolio	[M(OC ₂) ₃ mim]	[N(CN) ₂]
Dicianamida de 1-(2-metoxietil)4-3-	[M(OC ₂) ₄ mim]	[N(CN) ₂]

Nombre	Nombre abreviado	
	Catión	Anión
metilimidazolio		
Cloruro de 1-(2-metoxietil)-3-metilimidazolio	[MOC ₂ mim]	[Cl]
Bis(trifluorometilsulfonil)imida de 1-(2-metoxietil)-3-metilimidazolio	[MOC ₂ mim]	[NTf ₂]
Bis(trifluorometilsulfonil)imida de 1-(3-metoxipropil)-3-metilimidazolio	[MOC ₃ mim]	[NTf ₂]
Cloruro de 1-(etoximetil)-3-metilimidazolio	[EOC ₁ mim]	[Cl]
Bis(trifluorometilsulfonil)imida de 1-(etoximetil)-3-metilimidazolio	[EOC ₁ mim]	[NTf ₂]
Bromuro de 1-(2-etoxietil)-3-metilimidazolio	[EOC ₂ mim]	[Br]
Bis(trifluorometilsulfonil)imida de 1-(2-etoxietil)-3-metilimidazolio	[EOC ₂ mim]	[NTf ₂]
Yoduro de 1-(2-hidroxietil)-3-metilimidazolio	[OHC ₂ mim]	[I]
Cloruro de 1-(2-hidroxietil)-3-metilimidazolio	[OHC ₂ mim]	[Cl]
Bis(trifluorometilsulfonil)imida de 1-(2-hidroxietil)-3-metilimidazolio	[OHC ₂ mim]	[NTf ₂]
Bis(trifluorometilsulfonil)imida de 1-(3-hidroxipropil)-3-metilimidazolio	[OHC ₃ mim]	[NTf ₂]
Perfluorobutanosulfonato de 1-(3-hidroxipropil)-3-metilimidazolio	[OHC ₃ mim]	[SO ₃ (CF ₂) ₃ CF ₃]
Perfluoropentanoato de 1-(3-hidroxipropil)-3-metilimidazolio	[OHC ₃ mim]	[CO ₂ (CF ₂) ₃ CF ₃]
Bis(trifluorometilsulfonil)imida de 1-(cianometil)-3-metilimidazolio	[CNC ₁ mim]	[NTf ₂]
Dicianamida de 1-benzil-3-metilimidazolio	[Femim]	[N(CN) ₂]
Bromuro de fenilalaninaderivado C ₂ imidazolio	[ImidC ₂ Fe]	[Br]
Bromuro de fenilalaninaderivado C ₄ imidazolio	[ImidC ₄ Fe]	[Br]
Bromuro de fenilalaninaderivado C ₆ imidazolio	[ImidC ₆ Fe]	[Br]
Bromuro de fenilalaninaderivado C ₈ imidazolio	[ImidC ₈ Fe]	[Br]
Bromuro de fenilalaninaderivado C ₁₀ imidazolio	[ImidC ₁₀ Fe]	[Br]
Bromuro de fenilalaninaderivado C ₁₂ imidazolio	[ImidC ₁₂ Fe]	[Br]

Nombre	Nombre abreviado	
	Catión	Anión
Bromuro de fenilalaninaderivado C ₁₄ imidazolio	[ImidC ₁₄ Fe]	[Br]
Bromuro de fenilalaninaderivado C ₁₆ imidazolio	[ImidC ₁₆ Fe]	[Br]
Cloruro de 1-decil-3- hexiloximetilimidazolio	[C ₁₀ C ₆ O _{mim}]	[Cl]
Cloruo de 1-decil-3- ciclohexiloximetilimidazolio	[C ₁₀ cC ₆ O _{mim}]	[Cl]
Cloruro de 1-decil-3- hexiltiometilimidazolio	[C ₁₀ C ₆ S _{mim}]	[Cl]
Bis(trifluorometilsulfonil)imida de 1,3- dimetilimidazolio	[C ₁ mim]	[NTf ₂]
Bis(trifluorometilsulfonil)imida de 1-alil- 3-metilimidazolio	[Amim]	[NTf ₂]
Dicianamida de 1-alil-3-metilimidazolio	[Amim]	[N(CN) ₂]
Cloruro de 1-alil-3-metilimidazolio	[Amim]	[Cl]
Cloruro de 1,3- bis(octiloxicarbonilmetil)imidazolio	[im(CH ₂ COOC ₈) ₂]	[Cl]
Cloruro de 1-dodeciloxicarbonilmetil-3- metiloxicarbonilmetilimidazolio	[im(CH ₂ COOC ₁₂ CH ₂ COOC ₁)]	[Cl]
Cloruro de 1-(3-hidroxiopropil)-3- metilimidazolio	[3OHC ₃ mim]	[Cl]
Bromuro de 1-((trimetilsilil)metil)-3-metil- imidazolio	[TMSimim]	[Br]
Bis(trifluorometilsulfonil)imida de 1-etil- 4-metilpiridinio	[C ₂ -4mPy]	[NTf ₂]
Etilsulfato de 1-etil-4-metilpiridinio	[C ₂ -4mPy]	[C ₂ OSO ₃]
Cloruro de 1-(4-piridil)piridinio hidrocloruro	[1-4PPy]	[Cl]
Perfluorobutanopentanoato de 1-etil-4- metilpiridinio	[C ₂ -4mPy]	[CO ₂ (CF ₂) ₃ CF ₃]
Bis(trifluorometilsulfonil)imida de 1-etil- 4-metilpiridinio	[C ₂ -4mPy]	[NTf ₂]
Bis(trifluorometilsulfonil)imida de 1- propil-3-metilpiridinio	[C ₃ -3mPy]	[NTf ₂]
Hexafluorofosfato de 1-propil-3- metilpiridinio	[C ₃ -3mPy]	[PF ₆]
Bromuro de 1-propil-3-metilpiridinio	[C ₃ -3mPy]	[Br]
Bromuro de phenylalaninaderivadoC2 piridinio	[PyC ₂ FeA]	[Br]
Bromuro de phenylalaninaderivadoC4 piridinio	[PiC ₄ FeA]	[Br]
Bromuro de phenylalaninaderivadoC6	[PiC ₆ FeA]	[Br]

Nombre	Nombre abreviado	
	Catión	Anión
piridinio		
Bromuro de phenylalaninaderivadoC8 piridinio	[PiC ₈ FeA]	[Br]
Bromuro de phenylalaninaderivadoC10 piridinio	[PiC ₁₀ FeA]	[Br]
Bromuro de phenylalaninaderivadoC12 piridinio	[PiC ₁₂ FeA]	[Br]
Bromuro de phenylalaninaderivadoC14 piridinio	[PiC ₁₄ FeA]	[Br]
Bromuro de phenylalaninaderivadoC16 piridinio	[PiC ₁₆ FeA]	[Br]
Trifluorometanosulfonato de piridinio	[Py]	[CF ₃ SO ₃]
Dicianamida de 1-butilpiridinio	[C ₄ Py]	[N(CN) ₂]
Bromuro de 1-butilpiridinio	[C ₄ Py]	[Br]
Cloruro de 1-butilpiridinio	[C ₄ Py]	[Cl]
Bis(trifluorometilsulfonil)imida de 1-butilpiridinio	[C ₄ Py]	[NTf ₂]
Perfluoropentanoato de 1-etil-3-metilpiridinio	[C ₂ -3mPy]	[C ₄ F ₉ CO ₂]
Bis(trifluorometilsulfonil)imida de 1-propil-3-metilpiridionio	[C ₃ -3mPy]	[NTF ₂]
Bromuro de 1-butil-3-metilpiridinio	[C ₄ -3mPy]	[Br]
Dicianamida de 1-butil-3-metilpiridinio	[C ₄ -3mPy]	[N(CN) ₂]
Tetrafluoroborato de 1-butil-3-metilpiridinio	[C ₄ -3mPy]	[BF ₄]
Tetrafluoroborato de 1-butil-4-metilpiridinio	[C ₄ -4mPy]	[BF ₄]
Cloruro de 1-butil-4-metilpiridinio	[C ₄ -4mPy]	[Cl]
Cloruro de 1-butil-3-metilpiridinio	[C ₄ -3mPy]	[Cl]
Tricianometanuro de 1-butil-4-metilpiridinio	[C ₄ -4mPy]	[TCM]
Bis(trifluorometilsulfonil)imida de 1-butil-4-metilpiridinio	[C ₄ -4mPy]	[NTf ₂]
Bromuro de 1-butil-2,3-dimetilpiridinio	[C ₄ -23mPy]	[Br]
Trifluorometanosulfonato de 1-butil-2,3-dimetilpiridinio	[C ₄ -23mPy]	[CF ₃ SO ₃]
Dicianamida de 1-butil-3,5-dimetilpiridinio	[C ₄ -35mPy]	[N(CN) ₂]
Bromuro de 1-butil-3,5-dimetilpiridinio	[C ₄ -35mPy]	[Br]
Tiocianato de 1-butil-3,5-dimetilpiridinio	[C ₄ -35mPy]	[SCN]
Bis(trifluorometilsulfonil)imida de 1-butil-3,5-dimetilpiridinio	[C ₄ -35mPy]	[NTf ₂]
Bromuro de 1-butil-2,3,5-trimetilpiridinio	[C ₄ -235mPy]	[Br]

Nombre	Nombre abreviado	
	Catión	Anión
Bis(trifluorometilsulfonil)imida de 1-butil-2,3,5-trimetilpiridinio	[C ₄ -235mPy]	[NTf ₂]
Cloruro de 1-butil-4-(dimetilamino)piridinio	[C ₄ -4C ₂ NPy]	[Br]
Cloruro de 1-butil-4-(dimetilamino)piridinio	[C ₄ -4C ₂ NPy]	[Cl]
Bis(trifluorometilsulfonil)imida de 1-butil-4-(dimetilamino)piridinio	[C ₄ -4C ₂ NPy]	[NTf ₂]
Bromuro de 1-hexilpiridinio	[C ₆ Py]	[Br]
Bromuro de 1-hexil-3-metilpiridinio	[C ₆ -3mPy]	[Br]
Bromuro de 1-hexil-4-metilpiridinio	[C ₆ -4mPy]	[Br]
Cloruro de 1-hexil-4-metilpiridinio	[C ₆ -4mPy]	[Cl]
Bromuro de 1-hexil-3-metil-4-dimetilamin(O)piridinio	[C ₆ -3mC ₁ -4mC ₁ NPy]	[Br]
Hexafluoroantimonato de 1-octilpiridinio	[C ₈ Py]	[SbF ₆]
Bromuro de 1-octilpiridinio	[C ₈ Py]	[Br]
Bis(trifluorometilsulfonil)imida de 1-octilpiridinio	[C ₈ Py]	[NTf ₂]
Bromuro de 1-octil-3-metilpiridinio	[C ₈ -3mPy]	[Br]
Bromuro de 1-octil-2,3-dimetilpiridinio	[C ₈ -23mPy]	[Br]
Bromuro de 1-octil-3,5-dimetilpiridinio	[C ₈ -35mPy]	[Br]
Bis(trifluorometilsulfonil)imida de 1-octil-3,5-dimetilpiridinio	[C ₈ -35mPy]	[NTf ₂]
Tetrafluoroborato de 1-octil-3,5-dimetilpiridinio	[C ₈ -35mPy]	[BF ₄]
Bromuro de 1-octil-2-metil-5-etilpiridinio	[C ₈ -2m5ePy]	[Br]
Bromuro de 1-octil-2,3,5-trimetilpiridinio	[C ₈ -235mPy]	[Br]
Bis(trifluorometilsulfonil)imida de 1-octil-2,3,5-trimetilpiridinio	[C ₈ -235mPy]	[NTf ₂]
Cloruro de N-dodeciltiometilpiridinio	[C ₁₂ SmPy]	[Cl]
Cloruro de 3-metil-N-dodeciltiometilpiridinio	[3C ₁ -C ₁₂ SmPy]	[Cl]
Cloruro de 3,5-dimetil-N-dodeciltiometilpiridinio	[35C ₁ -C ₁₂ SmPy]	[Cl]
2-etilhexanoato de (2-hidroxi)etilamonio	[N ₀₀₀ -2OH]	[Ehexato]
2-etilhexanoato de (2-hidroxi)etilmetilamonio	[N ₀₀₁ -2OH]	[Ehexato]
2-etilhexanoato de (2-hidroxi)etildimetilamonio	[N ₀₁₁ -2OH]	[Ehexato]
4-dodecylbencenosulfonato de (2-hidroxi)etilamonio	[N ₀₀₀ -2OH]	[DBS]
4-dodecylbencenosulfonato de (2-	[N ₀₀₁ -2OH]	[DBS]

Nombre	Nombre abreviado	
	Catión	Anión
hidroxietil)metilamonio		
4-dodecibencenosulfonato de (2-hidroxietil)dimetilamonio	[N ₀₁₁ -2OH]	[DBS]
Formiato de (2-hidroxietil)amonio	[N ₀₀₀ -2OH]	[HCO ₂]
Formiato de (2-hidroxi dietil)amonio	[N ₀₀₂ OH-2OH]	[HCO ₂]
Acetato de (2-hidroxi dietil)amonio	[N ₀₀₂ OH-2OH]	[Ac]
Propionato de (2-hidroxi dietil)amonio	[N ₀₀₂ OH-2OH]	[Prop]
Butirato de (2-hidroxi dietil)amonio	[N ₀₀₂ OH-2OH]	[But]
Ibutirato de (2-hidroxi dietil)amonio	[N ₀₀₂ OH-2OH]	[iBut]
Pentanoato de (2-hidroxi dietil)amonio	[N ₀₀₂ OH-2OH]	[Pent]
Butirato de (2-hidroxi trietil)amonio	[N ₀₂ OH2OH-2OH]	[But]
Pentanoato de (2-hidroxi trietil)amonio	[N ₀₂ OH2OH-2OH]	[Pent]
Butirato de (2-hidroxietil)amonio	[N ₀₀₀ -2OH]	[But]
Nitrato de etilamonio	[N ₀₀₀₂]	[NO ₃]
Hexafluorofosfato de colina	[Chol]	[PF ₆]
Dihidrogenofosfato de (2-hidroxietil)trimetilamonio	[Chol]	[H ₂ PO ₄]
Bis(trifluorometilsulfonyl)imida de (2-hidroxietil)trimetilamonio	[Chol]	[NTf ₂]
Dihidrogenocitrato de colinio	[Chol]	[DHCit]
Dihidrogenofosfato de colina	[Chol]	[DHPhost]
Cloruro de colinio	[Chol]	[Cl]
Cloruro de bencildimetil(2-hidroxietil)amonio	[Bzchol]	[Cl]
Bitartrato de colinio	[Chol]	[Bit]
Butirato de colinio	[Chol]	[But]
Propionato de colinio	[Chol]	[Prop]
Acetato de colinio	[Chol]	[Ac]
Salicilato de colinio	[Chol]	[Sal]
Gálico de colinio	[Chol]	[Gal]
Cafeico de colinio	[Chol]	[Caf]
Vallínico de colinio	[Chol]	[Val]
Siríngica de colinio	[Chol]	[Sig]
Neodecanoato de colinio	[Chol]	[Neod]
Decanoato de colinio	[Chol]	[Dec]
Isostearato de colinio	[Chol]	[Isost]
Sacarinato de colinio	[Chol]	[Sach]
Acesulfato de colinio	[Chol]	[AcSO]
Bicarbonato de colinio	[Chol]	[Bic]
Dihidrogenofosfato de colinio	[Chol]	[DHphost]
Perfluorobutanosulfonato de colinio	[Chol]	[C ₄ F ₉ SO ₃]
Perfluoropentanonato de colinio	[Chol]	[C ₄ F ₉ CO ₂]
Metilsulfato de metoxicolina	[C ₁ OChol]	[C ₁ SO ₄]

Nombre	Nombre abreviado	
	Catión	Anión
Bis(trifluorometilsulfonil)imida de metocolina	[C ₁ OChol]	[NTf ₂]
Bromuro de fenilalaninaderivadoC2 de colinio	[coliderC ₂ Feala]	[Br]
Bromuro de fenilalaninaderivadoC4 de colinio	[coliderC ₄ Feala]	[Br]
Bromuro de fenilalaninaderivadoC6 de colinio	[coliderC ₆ Feala]	[Br]
Bromuro de fenilalaninaderivadoC8 de colinio	[coliderC ₈ Feala]	[Br]
Bromuro de fenilalaninaderivadoC10 de colinio	[coliderC ₁₀ Feala]	[Br]
Bromuro de fenilalaninaderivadoC12 de colinio	[coliderC ₁₂ Feala]	[Br]
Bromuro de fenilalaninaderivadoC14 de colinio	[coliderC ₁₄ Feala]	[Br]
Bromuro de fenilalaninaderivadoC16 de colinio	[coliderC ₁₆ Feala]	[Br]
Cloruro de bencildimetil(2-hidroxi)etil)amonio	[N ₁₁ -2OHPH]	[Cl]
Bis(trifluorometilsulfonil)imida de butiletildimetilamonio	[N ₁₁₂₄]	[NTf ₂]
Mesilato de trietilamonio	[N ₂₂₂₀]	[CH ₃ SO ₄]
Bromuro de hexiltriethylamonio	[N ₂₂₂₆]	[Br]
Bromuro de tetrabutilamonio	[N ₄₄₄₄]	[Br]
Cloruro de tetrabutilamonio	[N ₄₄₄₄]	[Cl]
Yoduro de tetrabutilamonio	[N ₄₄₄₄]	[I]
Hexafluorofosfato de tetrabutilamonio	[N ₄₄₄₄]	[PF ₆]
Bromuro de tetrabutilamonio	[N ₄₄₄₄]	[Br]
Teobromato de tetrabutilamonio	[N ₄₄₄₄]	[Theob]
Teofilinato de tetrabutilamonio	[N ₄₄₄₄]	[Theop]
Xantinato de tetrabutilamonio	[N ₄₄₄₄]	[Xan]
Urato de tetrabutilamonio	[N ₄₄₄₄]	[Ur]
Cloruro de metiltriocetilamonio	[N ₈₈₈₁]	[Cl]
Bis(trifluorometilsulfonil)imida de metiltriocetilamonio	[N ₈₈₈₁]	[NTf ₂]
Hexanoato de metiltriocetilamonio	[N ₈₈₈₁]	[C6:0]
Octanoato de metiltriocetilamonio	[N ₈₈₈₁]	[C8:0]
Laureato de metiltriocetilamonio	[N ₈₈₈₁]	[C12:0]
Palmitato de metiltriocetilamonio	[N ₈₈₈₁]	[C16:0]
Esterato metiltriocetilamonio	[N ₈₈₈₁]	[C18:0]
Oleato metiltriocetilamonio	[N ₈₈₈₁]	[C18:1]
2(hexiltio)acetato de metiltriocetilamonio	[N ₈₈₈₁]	[C ₆ SAc]

Nombre	Nombre abreviado	
	Catión	Anión
3-hidroxi-2-naptoato de metiltrioctilamonio	[N ₈₈₈₁]	[HNA]
AMMOENG 130	[AMMOENG]	[Cl]
Bromuro de dodeciltrimetilamonio	[N ₁₁₁₁₂]	[Br]
Bromuro de dodecilbencildimetilamonio	[N _{1,1,Bz, 12}]	[Br]
Cloruro de bencildodecildimetilamonio	[N _{1,1,12,Bz}]	[Cl]
Cloruro de octildimetil(deciloximetil)amonio	[N _{1,1,8,C₁₀OC₁}]	[Cl]
Bromuro de tetradeciltrimetilamonio	[N ₁₁₁₁₄]	[Br]
Cloruro de tetradecilbencildimetilamonio	[N _{1,1,Bz, 14}]	[Cl]
Bromuro de hexadeciltrimetilamonio	[N ₁₁₁₁₆]	[Br]
Cloruro de hexadecilbencilamonio	[N _{1,1,Bz, 16}]	[Cl]
AMMOENG 130	AMMOENG 130 39C ₂ OH	[Cl]
Cloruro de dodecildimetil(octiloximetil)amonio	[N _{1,1,12,C₈OC₁}]	[Cl]
Cloruro de dodecildimetil(noniloximetil)amonio	[N _{1,1,12,C₉OC₁}]	[Cl]
Cloruro de dodecildimetil(deciloximetil)amonio	[N _{1,1,12,C₁₀OC₁}]	[Cl]
Bromuro de benciltetradecildimetilamonio	[N _{1,1,14,Bz}]	[Br]
Bromuro de bencilhexadecildimetilamonio	[N _{1,1,16,Bz}]	[Br]
Cloruro de bencildimetil(2-hidroxietil)amonio	[N _{1,1,2OH,Bz}]	[Cl]
Cloruro de bencildimetil(octiloximetil)amonio	[N _{11,Bz,C₈OC₁}]	[Cl]
Cloruro de bencildimetil(deciloximetil)amonio	[N _{11,Bz,C₁₀OC₁}]	[Cl]
Cloruro de bencildimetil(dodeciloximetil)amonio	[N _{11,Bz,C₁₂OC₁}]	[Cl]
Sacarinato de N,N,N-tri(n-butil)(4-etoxi-4-oxobutil)-1-amonio	[Bu ₃ NC ₄]	[Sac]
Sacarinato de N,N,N-tri(n-butil)(2-etoxi-2-oxoetil)-1-amonio	[Bu ₃ NC ₂]	[Sac]
Bromuro de N,N,N-tri(n-butil)[2-etoxi-2-oxoetil]amonio	[Bu ₃ NC ₂]	[Br]
Bromuro de N,N,N-tri(n-butil)[4-etoxi-4-oxoetil]amonio	[Bu ₃ NC ₄]	[Br]
Bromuro de N,N,N-tri(n-butil)[2-etoxi-2-oxoetil]fosfonio	[Bu ₃ NC ₂]	[Br]
Bromuro de N,N,N-tri(n-butil)[4-etoxi-4-oxoetil]fosfonio	[Bu ₃ NC ₄]	[Br]
Docusato de N,N,N-tri(metil)(2-dodeciloxi-	[Me ₃ NC ₂ OC ₁₂]	[Doc]

Nombre	Nombre abreviado	
	Catión	Anión
2-oxometil)-1-amonio		
Tiocianato de N,N,N-tri(metil)(2-dodeciloxi-2-oxometil)-1-amonio	[Me ₃ NC ₂ OC ₁₂]	[SCN]
Docusato de N,N,N-tri(metil)(2-tetradeciloxi-2-oxometil)-1-amonio	[Me ₃ NC ₂ OC ₁₄]	[Doc]
Tiocianato de N,N,N-tri(metil)(2-tetradeciloxi-2-oxometil)-1-amonio	[Me ₃ NC ₂ OC ₁₄]	[SCN]
Hexafluoroantimonato de 1-metil-1-octilpirrolidinium	[C ₈ mPyrr]	[SbF ₆]
Hexafluorofosfato de 1-propil-1-metilpirrolidinio	[C ₃ mPyrr]	[PF ₆]
Bis(trifluorometilsulfonil)imida de 1-propil-1-metilpirrolidinio	[C ₃ mPyrr]	[NTf ₂]
Bis(trifluorometilsulfonil)imida de 1-butil-1-metilpirrolidinio	[C ₄ mPyrr]	[NTf ₂]
Bromuro de 1-butil-1-metilpirrolidinio	[C ₄ mPyrr]	[Br]
Dicianamida de 1-butil-1-metilpirrolidinio	[C ₄ mPyrr]	[N(CN) ₂]
Trifluorometanosulfonato de 1-butil-1-metilpirrolidinio	[C ₄ mPyrr]	[CF ₃ SO ₃]
Cloruro de 1-hexil-1-metilpirrolidinio	[C ₆ mPyrr]	[Cl]
Bromuro de 1-hexil-1-metilpirrolidinio	[C ₆ mPyrr]	[Br]
Cloruro de 1-octil-1-metilpirrolidinio	[C ₈ mPyrr]	[Cl]
Bis(trifluorometilsulfonil)imida de 1-octil-1-metilpirrolidinio	[C ₈ mPyrr]	[NTf ₂]
Hexafluorostibina de 1-octil-1-metilpirrolidinio	[C ₈ mPyrr]	[SbF ₆]
Bromuro de 1-octil-1-metilpirrolidinio	[C ₈ mPyrr]	[Br]
Bromuro de 1-octil-3-metilpirrolidinio	[C ₈ -3mPyrr]	[Br]
Bromuro de 1-butil-1-butironitriropirrolidinio	[C ₄ -C ₃ CNPyrr]	[Br]
Bromuro de 4-etil-4-metilmorfolinio	[C ₂ mMorp]	[Br]
Bis(trifluorometilsulfonil)imida de 4-butil-4-metilmorfolinio	[C ₄ mMorp]	[NTf ₂]
Bromuro de 1-butil-1-metilmorfolinio	[C ₄ mMorp]	[Br]
Dicianamida de 1-butil-1-metilmorfolinio	[C ₄ mMorp]	[N(CN) ₂]
Trifluorometanosulfonato de 1-butil-1-metilmorfolinio	[C ₄ mMorp]	[CF ₃ SO ₃]
Bromuro de 4-hexil-4-metilmorfolinio	[C ₆ mMorp]	[Br]
Bromuro de 4-octil-4-metilmorfolinio	[C ₈ mMorp]	[Br]
Bromuro de 4-decil-4-metilmorfolinio	[C ₁₀ mMorp]	[Br]
Acetato de 6-azoniaspiro[4.5]decano	Azo[4,5]dec	[Ac]

Nombre	Nombre abreviado	
	Catión	Anión
Acetato de 6-azoniaspiro[5.5]decano	Azo[5,5]dec	[Ac]
Acetato de 6-azoniaspiro[5.6]decano	Azo[5,6]dec	[Ac]
Hexafluorofosfato de 1-propil-1-metilpiperidinio	[C ₃ mPip]	[PF ₆]
Bis(trifluorometilsulfonyl)imida de 1-propil-1-metilpiperidinio	[C ₃ mPip]	[NTf ₂]
Bromuro de 1-butil-1-metilpiperidinio	[C ₄ mPip]	[Br]
Bis(trifluorometilsulfonyl)imida de 1-butil-1-metilpiperidinio	[C ₄ mPip]	[NTf ₂]
Bromuro de 1-hexil-1-metilpiperidinio	[C ₆ mPip]	[Br]
Bromuro de 1-octil-1-metilpiperidinio	[C ₈ mPip]	[Br]
Bromuro de 1-octil-1-etilpiperidinio	[C ₄ C ₂ Pip]	[Br]
Bromuro de 1-octil-1-etilpiperidinio	[C ₈ C ₂ Pip]	[Br]
Yoduro de 1-octil-1-etilpiperidinio	[C ₈ C ₂ Pip]	[I]
Tiocianato de 1-octil-1-etilpiperidinio	[C ₈ C ₂ Pip]	[SCN]
Bromuro de butiltropinio	[C ₄ TROP]	[Br]
Yoduro de butiltropinio	[C ₄ TROP]	[I]
Bis(trifluorometilsulfonyl)imida de butiltropinio	[C ₄ TROP]	[NTf ₂]
Tiocianato de butiltropinio	[C ₄ TROP]	[SCN]
Bis(trifluorometilsulfonyl)imida de octiltropinio	[C ₈ TROP]	[NTf ₂]
Dicianamida de octiltropinio	[C ₈ TROP]	[N(CN) ₂]
Tetrafluoroborato de octiltropinio	[C ₈ TROP]	[BF ₄]
Docusato de N,N,N-tri(metil)(2-dodeciloxi-2-oxometil)-1-amonio	[Me ₃ NC ₂ OC ₁₂]	[Doc]
Tiocianato de N,N,N-tri(metil)(2-dodeciloxi-2-oxometil)-1-amonio	[Me ₃ NC ₂ OC ₁₂]	[SCN]
Docusato de N,N,N-tri(metil)(2-tetradeciloxi-2-oxometil)1-amonio	[Me ₃ NC ₂ OC ₁₄]	[Doc]
Tiocianato de N,N,N-tri(metil)(2-tetradeciloxi-2-oxometil)1-amonio	[Me ₃ NC ₂ OC ₁₄]	[SCN]
Sacarinato de tri(n-butil)(2-etoxi-2-oxoetil)-1-fosfonio	[Bu ₃ pC ₂]	[Sac]
Sacarinato de tri(n-butil)(4-etoxi-4-oxobutil)-1-fosfonio	[Bu ₃ pC ₄]	[Sac]
Dietilfosfato de tributiletilfosfonio	[P ₂₄₄₄]	[dC ₂ -PO ₄]
Bromuro de tetrabutilfosfonio	[P ₄₄₄₄]	[Br]
Tosilato de tributilmetilfosfonio	[P _{i4441}]	[Tosilate]
Metilsulfato de tributilmetilfosfonio	[P ₄₄₄₁]	[CH ₃ SO ₃]
Bromuro de trihexiltetradecilfosfonio	[P ₆₆₆₋₁₄]	[Br]
Cloruro de trihexiltetradecilfosfonio	[P ₆₆₆₋₁₄]	[Cl]
Metilsulfato de trihexiltetradecilfosfonio	[P ₆₆₆₋₁₄]	[CH ₃ SO ₃]

Nombre	Nombre abreviado	
	Catión	Anión
3-hidroxi-2-naftoato de trihexiltetradecilfosfonio	[P ₆₆₆₁₄]	[HNA]
Acetato de metiltriocilfosfonio	[P ₈₈₈₋₁]	[Ac]
3-hidroxi-2-naftoato de metiltriocilfosfonio	[P ₈₈₈₋₁]	[HNA]
2-(hexiltio)acetato de metiltriocilfosfonio	[P ₈₈₈₁]	[C ₆ Sac]
Sacarinato de tri(n-butil)(2-etoxi-2-oxoetil)-1-fosfonio	[Bu ₃ pC ₂]	[Sac]
Sacarinato de tri(n-butil)(4-etoxi-4-oxobutil)-1-fosfonio	[Bu ₃ pC ₄]	[Sac]
Bormuro de etilmetil-1,4-diazabicyclo[2.2.2]octanio	[C ₂ mDABCO]	[Br]
Bormuro de butilmetil-1,4-diazabicyclo[2.2.2]octanio	[C ₄ mDABCO]	[Br]
Bormuro de hexilmetil-1,4-diazabicyclo[2.2.2]octanio	[C ₆ mDABCO]	[Br]
Bormuro de octilmetil-1,4-diazabicyclo[2.2.2]octanio	[C ₈ mDABCO]	[Br]
Bormuro de decilmetil-1,4-diazabicyclo[2.2.2]octanio	[C ₁₀ mDABCO]	[Br]
Mesilato de tetrametilguanidinio	[G ₁₁₁₁]	[CH ₃ SO ₃]
Trifluoroacetato de tetrametilguanidinio	[G ₁₁₁₁]	[CF ₃ COO]
Acetato de tetrametilguanidinio	[G ₁₁₁₁]	[Ac]
Trifluorometanosulfonato de tetrametilguanidinio	[G ₁₁₁₁]	[CF ₃ SO ₃]
Caprilato de tetrametilguanidinio	[G ₁₁₁₁]	[Cap]
Isostearato de tetrametilguanidinio	[G ₁₁₁₁]	[Isost]
Neodecanoato de tetrametilguanidinio	[G ₁₁₁₁]	[Neod]
Yoduro de guanidinio	[TMGC ₄]	[I]
Yoduro de guanidinio	[TMGC ₇]	[I]
Yoduro de guanidinio	[TMGC ₁₂]	[I]
Cloruro de guanidinio	[(di-h) ₂ DMG]	[Cl]
Cloruro de guanidinio	[(C ₃ O) ₄ DMG]	[Cl]
Isostearato de guanidinio	[(C ₃ O) ₄ DMG]	[Isost]
Neodecanoato de guanidinio	[(C ₃ O) ₄ DMG]	[Neod]
Bromuro de butilquinuclidinio	[C4QUINU]	[Br]
Bromuro de octilquinuclidinio	[C8QUINU]	[Br]
Dicianamida de octilquinuclidinio	[C8QUINU]	[N(CN) ₂]
Acetato de melamina	[Mel]	[Ac]
Trifluoroacetato de melamina	[Mel]	[CF ₃ COO]
Trifluorometanosulfonato de melamina	[Mel]	[CF ₃ SO ₃]
Mesilato de 1,5-diazabicyclo[4.3.0]non-5-	[DBNH]	[CH ₃ SO ₄]

Nombre	Nombre abreviado	
	Catión	Anión
enio		
Mesilato de 1,8-diazabicyclo[5.4.0]undec-7-enio	[DBUH]	[CH ₃ SO ₄]
Mesilato de 5-metil-1,5,7-triazabicyclo[4.3.0]non-6-enio	5,7[MTBNH]	[CH ₃ SO ₄]
Mesilato de 7-metil-1,5,7-triazabicyclo[4.3.0]non-5-enio	5,7[MTBNH]	[CH ₃ SO ₄]
Mesilato de 7-metil-1,5,7-triazabicyclo[4.4.0]dec-5-enio	[MTBDH]	[CH ₃ SO ₄]
Bromuro de trietilsulfonio	[S ₂₂₂]	[Br]
Bromuro de etiltetrahidrotiofenio	[ETHT]	[Br]

A continuación, vamos a definir los diferentes descriptores en función de las relaciones cualitativas con sus valores de toxicidad.

5.2.1. Descriptores sustituyentes

Descriptor S

Uno de los descriptores definidos es la longitud de la cadena carbonada de la sustitución alquímica más larga unida a los nitrógenos de los cationes imidazolio, piridinio, pirrolinio, piperidinio y morfolinio. Para la observación de la tendencia y definición del descriptor se ha representado la influencia en los valores de toxicidad de la longitud de cadena para los tres organismos analizados. En este caso, el análisis está basado en la comparativa de datos, a veces a distintos tiempos de contacto, ya que lo que buscamos únicamente es una relación cualitativa. En las Figuras 5.1, 5.2 y 5.3 se presenta la influencia de la longitud de cadena en los valores de la ecotoxicidad expresada como log EC50.

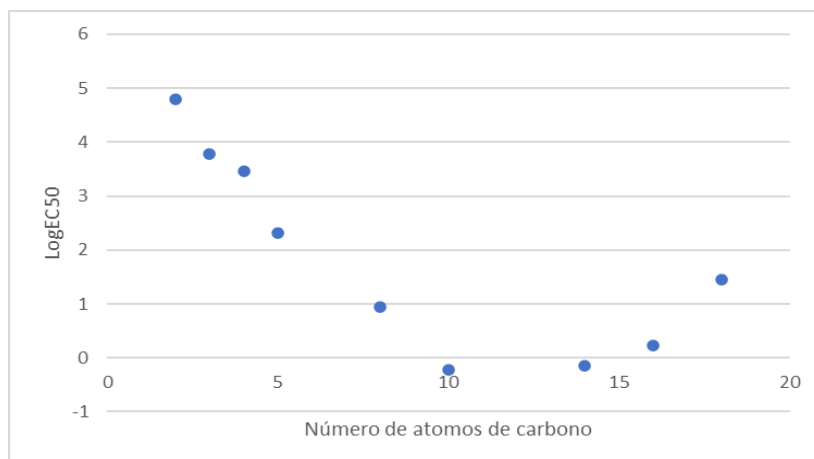


Figura 5.1. Efecto de la longitud de la cadena carbonada de la sustitución alquílica más larga unida a los nitrógenos de los cationes imidazolio sobre el valor de **LogEC₅₀** para *V. fischeri*. [Cnmim][Cl] donde $n=2,3,4,5,6,8,10, 16,18$.

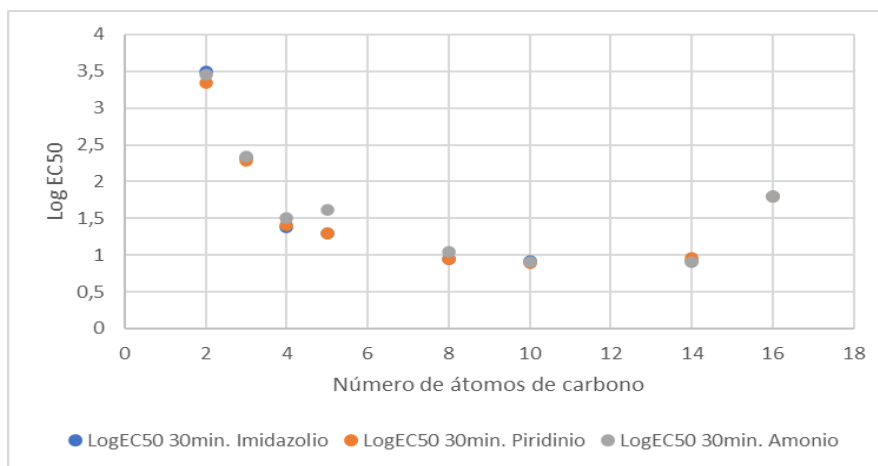


Figura 5.2. Efecto de la longitud de la cadena carbonada de la sustitución alquílica más larga unida a los nitrógenos de líquidos iónicos derivados de la fenil alanina sobre el valor de **LogEC₅₀** (30 min.) para *V. fischeri*. (La estructura de los líquidos iónicos se presenta en la Figura 5.2.1 donde $n= 2,3,4,5,8,10,14,16$. El valor para $n=16$ es mayor de 1,80, pero lo representaremos como 1,80).

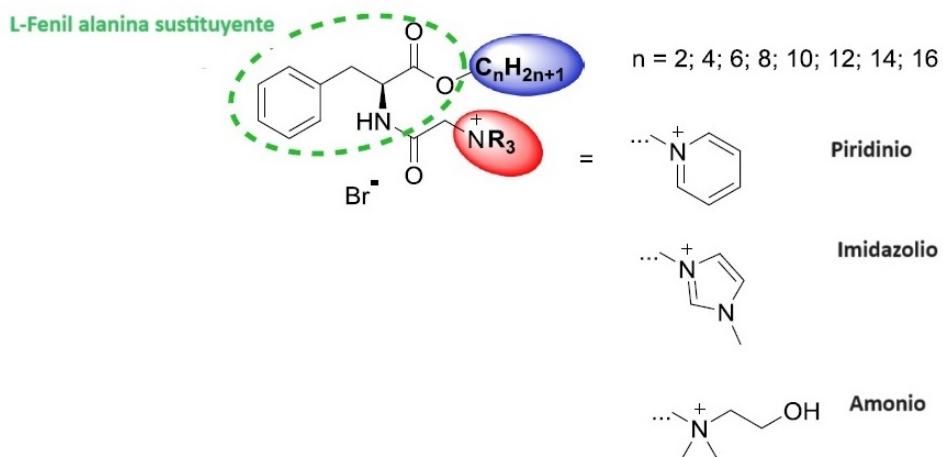


Figura 5.2.1. Líquido iónico derivado de la fenil alanina y sus sustituyentes.

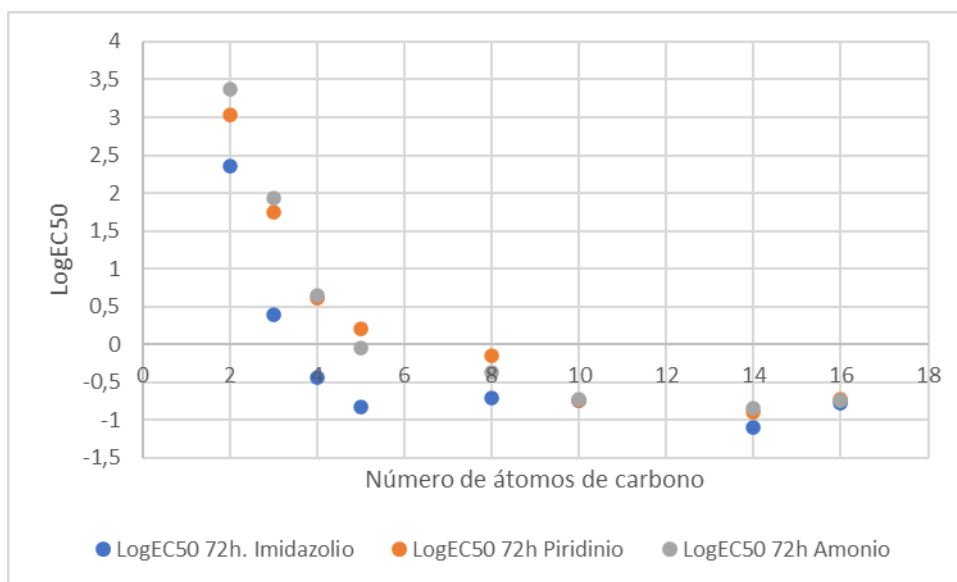


Figura 5.3 Efecto de la longitud de la cadena carbonada de la sustitución alquílica más larga unida a los nitrógenos de líquidos iónicos derivado de la fenil alinina sobre el valor de LogEC_{50} para *P. subcapitata*.

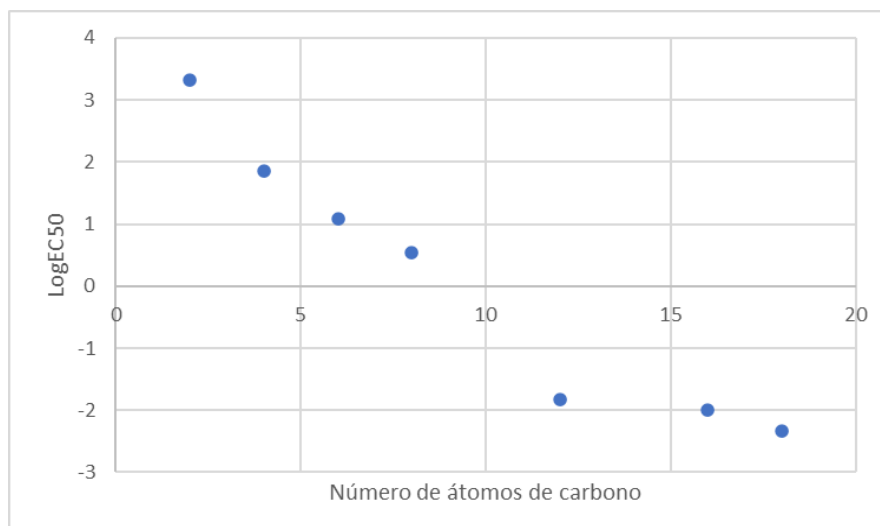


Figura 5.4. Efecto de la longitud de la cadena carbonada de la sustitución alquílica más larga unida a los nitrógenos de los cationes sobre el valor de **LogEC₅₀** para D. magna. [Cnmim][Cl] donde $n=2,4,6,8,12,16,18$.

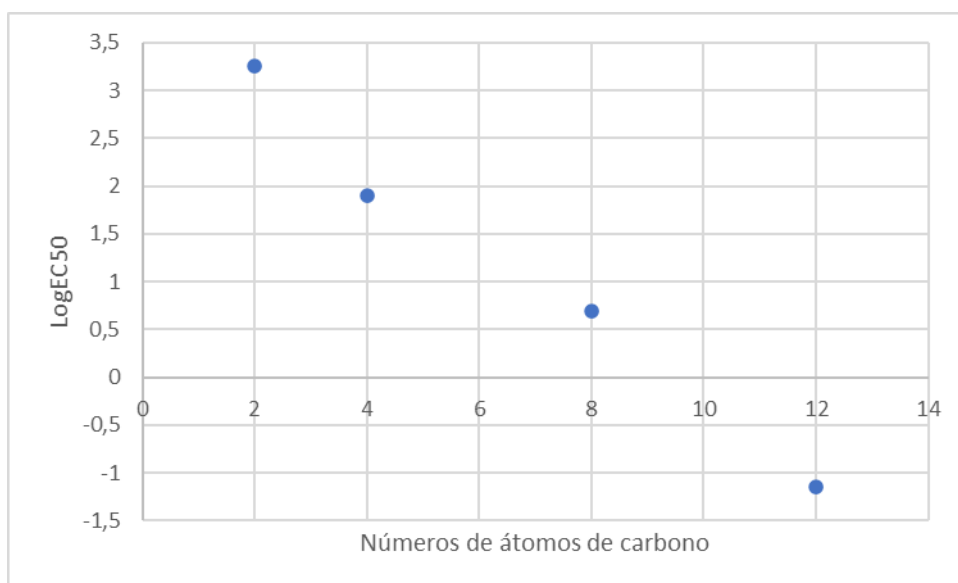


Figura 5.5. Efecto de la longitud de la cadena carbonada de la sustitución alquílica más larga unida a los nitrógenos de los cationes sobre el valor de **LogEC₅₀** para P. subcapitata. [Cnmim][Cl] donde $n=2,4,8,12$.

Del análisis de los datos se observa como comportamiento general, que cuando aumenta la longitud de esta cadena alquílica va aumentando la toxicidad del líquido iónico. Pero este aumento no es indefinido, sino que llega un momento en el que la toxicidad vuelve

de nuevo a disminuir a partir de un determinado número de átomos de carbono. Para *V. fischeri* el valor mínimo de toxicidad se encuentra entre 10 y 14 átomos de carbono; para *P. subcapitata* entre 16 y 18 átomos de carbono; y para *D. magna* la toxicidad siempre disminuye con la longitud de cadena. Por ello, este descriptor lo vamos a diferenciar en dos, uno hasta 10 y 16 para *V. fischeri* y *P. subcapitata* respectivamente, y otro para longitudes de la cadena carbonada mayores a los citados valores en el caso de *V. fischeri* y *P. subcapitata*.

Descriptor S₁

S_1 es la longitud de la cadena carbonada de la sustitución alquímica más corta unida a los nitrógenos de los anillos imidazolio, pirrolinio, piperidinio y morfolinio o en la posición *para* del anillo piridinio. En la tabla 5.3 se observa la influencia de la longitud más corta unida al nitrógeno para *V. fischeri*, *D. magna* y *P. subcapitata*.

Tabla 5.3. Efecto de la longitud de la cadena carbonada de la sustitución alquímica más corta unida a los nitrógenos de los cationes imidazolio sobre el valor de **LogEC₅₀** para *V. fischeri*.

Líquido iónico	LogEC ₅₀ (15min)
[C ₂ im][Cl]	4,16
[C ₂ mim][Cl]	4,80
[C ₄ im][CH ₃ COO]	3,32
[C ₄ mim][CH ₃ COO]	3,47

Como se observa en la Tabla 5.3, al introducir un segundo metilo en el nitrógeno del anillo imidazolio, disminuye la toxicidad. Este átomo de carbono tiene un efecto contrario que el carbono que introducimos en la cadena más larga unida a nitrógeno. Así, definimos este descriptor para diferenciarlo del anterior.

Descriptor S₂

S_2 es la longitud de la cadena carbonada de una sustitución alquímica en un átomo de carbono en los anillos imidazolio, pirrolinio, morfolinio, piperidinio o piridinio, en este

último caso en la posición *orto* o *meta*. En las Tablas 5.4, 5.5 y 5.6 se muestra el efecto de la sustitución de un grupo metilo sobre un átomo de carbono en cationes imidazolio y piridinio.

Tabla 5.4. Efecto de la longitud de la cadena carbonada de la sustitución alquílica más corta unida a carbono de cationes imidazolio y piridinio sobre el valor de **LogEC₅₀** para *V. fischeri*.

Líquido iónico	LogEC ₅₀ (15min.)
[C ₂ mim] [NTf ₂]	3,62
[C ₂ -23mim] [NTf ₂]	3,09
[C ₄ -C ₄ im] [NTf ₂]	3,46
[C ₄ -23mim] [NTf ₂]	2,36
[C ₃ mim] [NTf ₂]	3,00
[C ₃ -23mim] [NTf ₂]	2,67
[C ₆ mim] [Br]	3,13
[C ₆ mmim] [Br]	3,06
[C ₆ mim] [Cl]	2,37
[C ₆ -23mim] [Cl]	1,74
[C ₄ Py] [Br]	3,38
[C ₄ -3mPy] [Br]	3,14
[C ₄ -23mPy] [Br]	2,24
[C ₄ -235mPy] [Br]	2,37
[C ₆ Py] [Br]	2,69
[C ₆ -3mPy] [Br]	2,11
[C ₈ Py] [Br]	1,69
[C ₈ -3mPy] [Br]	1,36
[C ₈ -23mPy] [Br]	1,08
[C ₈ -235mPy] [Br]	0,65

Tabla 5.5. Efecto de la longitud de la cadena carbonada de la sustitución alquílica más corta unida a carbono de cationes imidazolio y piridinio sobre el valor de **LogEC₅₀** para *D. magna*.

Líquido iónico	LogEC ₅₀
[C ₄ mim][Br]	1,84
[C ₄ -23mim][Br]	1,88
[C ₆ mim][Br]	0,99
[C ₆ -23mim][Br]	0,86

[C4Py][Br]	1,72
[C4-3mPy][Br]	1,66
[C6Py][Br]	1,16
[C6-3mPy][Br]	0,63
[C8Py][Br]	-0,19
[C8-3mPy][Br]	0,57
[C8-235mPy][Br]	-0,21

Tabla 5.6. Efecto de la longitud de la cadena carbonada de la sustitución alquílica más corta unida carbono en cationes imidazolio y piridinio sobre el valor de **LogEC₅₀** para *P. subcapitata*.

Líquido iónico	LogEC ₅₀
[C4mim] [Br]	1,84
[C4-23mim] [Br]	1,88
[C6mim] [Br]	0,99
[C6-23mim] [Br]	0,86
[C4Py] [Br]	1,72
[C4-3mPy] [Br]	1,66
[C6Py] [Br]	1,16
[C6-3mPy] [Br]	0,63
[C8Py] [Br]	-0,19
[C8-3mPy] [Br]	0,57
[C8-235mPy] [Br]	-0,21

Como se observa, para todos los microorganismos estudiamos, con un número muy pequeño de excepciones, la inclusión de un sustituyente metílico sobre un átomo de carbono aumenta la toxicidad del líquido iónicos. La inclusión de un segundo sustituyente metílico, como es el caso de los trisustituídos, aumenta la toxicidad de los líquidos iónicos.

Descriptor S₃ (O)

El descriptor S₃ representa el número total de átomos de oxígeno de la cadena de la sustitución alquílica más larga unida a nitrógeno de los cationes imidazolio, piridinio, pirrolinio, piperidinio y morfolinio. En las Tablas 5.7 y 5.8 se muestra el efecto sobre

los valores de toxicidad de la introducción de un átomo de oxígeno en sustitución de un grupo metilo sobre un átomo de carbono en cationes imidazolio. Para el estudio de este efecto se ha comparado el valor de la toxicidad de un líquido iónico con cadena lateral sin átomos de oxígeno con otros con átomos de oxígeno, de forma que la suma de los átomos de carbono o los átomos de oxígeno y carbono sea la misma en los dos casos.

Tabla 5.7. Efecto de introducción de una longitud de la cadena carbonada de un átomo de oxígeno en imidazolio sobre el valor de LogEC_{50} para *V. fischeri*.

Líquido iónico	LogEC_{50} (15min.)
[C ₄ mim] [BF ₄]	3,20
[MOC ₂ mim] [BF ₄]	4,15
[C ₄ mim] [Cl]	3,49
[MOC ₂ mim] [Cl]	4,18
[C ₄ mim] [NTf ₂]	2,51
[MOC ₂ mim] [NTf ₂]	2,83
[C ₄ mim] [N(CN) ₂]	3,44
[MOC ₂ mim] [N(CN) ₂]	4,06
[C ₅ mim] [NTf ₂]	2.03
[MOC ₃ mim] [NTf ₂]	3,20
[C ₇ mim] [BF ₄]	2,44
[MOC ₂ OC ₂ mim] [BF ₄]	3,79
[C ₁₀ mim] [BF ₄]	-0,18
[MOC ₂ OC ₂ OC ₂ mim] [BF ₄]	3,45

Tabla 5.8. Efecto de introducción de una longitud de la cadena carbonada de un átomo de oxígeno en imidazolio sobre el valor de LogEC_{50} para para *D. magna*.

Líquido iónico	LogEC_{50} 15min.
[C ₄ mim] [BF ₄]	1,68
[MOC ₂ mim] [BF ₄]	2,89

En todos los casos analizados se encuentra una disminución en los valores de toxicidad al sustituir un átomo de carbono por un átomo de oxígeno. Así se han considerado el número de átomos de oxígeno en la cadena carbonada como un nuevo descriptor.

Descriptor S₄(Cl)

S₄(Cl) es el número total de átomos de cloro de la cadena de la sustitución alquílica más larga unida a nitrógeno de los cationes imidazolio, piridinio, pirrolinio, piperidinio y morfolinio.

Como se observa en la Tabla 5.9, la introducción de un átomo de Cl en sustitución de un grupo metilo en la cadena carbona de cationes imidazolio reduce los valores de toxicidad del líquido iónicos.

Tabla 5.9. Efecto de introducción de Cl en la cadena carbonada de un catión imidazolio sobre el valor de **LogEC₅₀** para *P. supcapitata*.

Líquido iónico	LogEC ₅₀ (15min.)
[C ₃ mim] [NTf ₂]	1,55
[ClC ₂ mim] [NTf ₂]	3,49

Descriptor S₅(Si)

El descriptor S₅ representa al número total de átomos de silicio de la cadena de la sustitución alquílica más larga unida a nitrógeno de los cationes imidazolio, piridinio, pirrolinio, piperidinio y morfolinio. En las Tablas 5.10 y 5.11 se representan los valores de toxicidad de los líquidos iónicos que presentan átomos de silicio en su cadena carbonada.

Tabla 5.10. Efecto de introducción de Si en la cadena carbonada de un catión imidazolio sobre el valor de LogEC_{50} para *D. magna*.

Líquido iónico	LogEC_{50} (15min.)
[TMSiMmim][Br]	1,85
[C ₄ mim] [Br]	1,84
[C ₆ mim] [Br]	0,99

Tabla 5.11. Efecto de introducción de Si en la cadena carbonada de un catión imidazolio sobre el valor de LogEC_{50} para *P. Phophoreum*.

Líquido iónico	LogEC_{50} (15min.)
[TMSiMmim][Br]	1,63
[C ₄ mim] [Br]	3,36
[C ₆ mim] [Br]	2,54

Como se observa, hay descritos pocos valores de toxicidad para *D. magna* y *P. Phosphoreum*. Para el análisis de su efecto se ha comparado con líquidos iónicos análogos con un átomo de carbono más y un átomo de carbono menos en la cadena carbonada. No se observa una tendencia clara para los datos disponibles. El modelo nos ayudará a poder establecer una tendencia definida en este descriptor.

Descriptor S₆(N)

El descriptor S₆(N) representa el número total de átomos de nitrógeno de la cadena de la sustitución alquílica más larga unida a nitrógeno de los cationes imidazolio, piridinio, pirrolinio, piperidinio y morfolinio. En las Tablas 5.12 y 5.13 se muestran ejemplos de inclusión de un átomo de nitrógeno en la cadena carbonada que nos pueden permitir saber la influencia de este átomo en los valores de toxicidad.

Tabla 5.12. Efecto de introducción de un átomo de nitrógeno en la cadena carbonada de un catión imidazolio sobre el valor de **LogEC₅₀** para *V. fischeri*.

Líquido iónico	LogEC ₅₀ 15min.
[C ₆ NPy] [Br]	2,69
[C ₄ -4C ₁ NPy] [Br]	2,32
[C ₈ NPy] [Br]	1,69

Tabla 5.13. Efecto de introducción de un átomo de nitrógeno en la cadena carbonada de un catión imidazolio sobre el valor de **LogEC₅₀** para *D. magna*.

Líquido iónico	LogEC ₅₀ (15min.)
[C ₆ NPy][Br]	1,07
[C ₄ -4C ₁ NPy][Br]	3,28
[C ₈ NPy][Br]	0,20

Como se puede observar, no hay muchos ejemplos que nos permitan establecer relaciones cualitativas. Para su análisis se han considerado líquidos iónicos análogos de 6 y 8 átomos de carbono de la cadena carbonada. Como conclusión general, parece que la inclusión de un nitrógeno reduce la toxicidad del líquido iónico con relación a la inclusión de un átomo de carbono. Este análisis cualitativo tendrá que ser ratificado posteriormente con el modelo cualitativo QSAR.

Descriptor S₇(S)

El descriptor S₇(S) es el número total de átomos de azufre de la cadena de la sustitución alquílica más larga unida a nitrógeno de los cationes imidazolio, piridinio, pirrolinio, piperidinio y morfolinio. Para este descriptor no tenemos datos experimentales que nos permitan una comparación objetiva y con ellos una tendencia cualitativa.

Descriptor S₈ (OH)

El descriptor S₈ se refiere al número total de grupos OH de la cadena de la sustitución alquílica más larga unida a nitrógeno de los cationes imidazolio, piridinio, pirrolinio,

piperidinio y morfolinio. En las Tablas 5.14 y 5.15 se representan el efecto de la introducción de un grupo OH en la cadena carbonada para *V. fischeri* y *D. magna*.

Tabla 5.14. Efecto de introducción de un grupo OH en la cadena carbonada de la sustitución alquílica unida a cationes imidazolio sobre el valor de **LogEC₅₀** para *V. fischeri*.

Líquido iónico	LogEC ₅₀ (15min.)
[C ₂ mim][NTf ₂]	2,93
[OHC ₂ mim][NTf ₂]	4,05
[C ₃ mim][NTf ₂]	3,00
[OHC ₃ mim][NTf ₂]	3,81
[C ₂ mim][Cl]	4,80
[OHC ₂ mim][Cl]	5,34

Tabla 5.15. Efecto de introducción de un grupo OH en la cadena carbonada de la sustitución alquílica unida a cationes imidazolio sobre el valor de **LogEC₅₀** para *D. magna*.

Líquido iónico	LogEC ₅₀
[C ₂ mim][C ₄ F ₉ SO ₃]	2,91
[C ₂ OHmim][C ₄ F ₉ SO ₃]	3,46
[C ₂ mim][C ₄ F ₉ CO ₂]	3,03
[C ₂ OHmim][C ₄ F ₉ CO ₂]	3,44

Del análisis de las gráficas se observa que la introducción de un grupo OH en la cadena alquílica permite reducir la toxicidad del líquido iónicos. Este efecto es importante y se observa para todos los casos donde es posible establecer la comparación.

Descriptor S₉ (CN)

El descriptor S₉ representa el número total de grupos CN de la cadena de la sustitución alquílica más larga unida a nitrógeno de los cationes imidazolio, piridinio, pirrolinio,

piperidinio y morfolinio. En la Tabla 5.16 se presentan dos ejemplos donde se puede apreciar de forma cualitativa la influencia de la presencia de un grupo CN en la cadena carbonada de un cation imidazolio y piridinio. Se observa de forma inequívoca para ambos ejemplos que la sustitución de un grupo metilo por un grupo CN disminuye de forma importante la toxicidad de los líquidos iónicos.

Tabla 5.16. Efecto de introducción de un grupo CN en la cadena carbonada de la sustitución alquílica unida a cationes imidazolio sobre el valor de **LogEC₅₀** para *V. fischeri*.

Líquido iónico	LogEC ₅₀ 15min.
[C ₂ mim][NTf ₂]	3,17
[CNC ₁ mim][NTf ₂]	3,81
[C ₃ Pyrr][Br]	1,53
[C ₄ -C ₃ CNPyrr][Br]	5,33

Descriptor S₁₀(Cy6)

Este descriptor representa el número total de anillos de 6 átomos de carbono de la cadena de la sustitución alquílica más larga unida a nitrógeno de los cationes imidazolio, piridinio, pirrolinio, piperidinio y morfolinio. Respecto a este descriptor no tenemos datos experimentales que nos permitan establecer relaciones cualitativas. Así que estableceremos conclusiones mediante el empleo del modelo QSAR.

Descriptor S_{P/N/S}

Este descriptor se refiere al número total de átomos de carbonos de los grupos alquilo que sustituyen a los cationes amonio, fosfonio o sulfonio. Se tienen datos comparativos para *V. fisheri* y *D. magna* que se representan en las Tablas 5.17 y 5.18.

Tabla 5.17. Efecto del número total de átomos de carbonos de los grupos alquilo que sustituyen a los cationes amonio y fosfonio sobre el valor de **LogEC₅₀** para *V. fischeri*.

Líquido iónico	LogEC ₅₀	Nº Carbonos
[N ₂₂₂₆] [Br]	2,46	12
[N ₄₄₄₄] [Br]	2,32	12
[N ₁₁₁₋₁₂] [Br]	-0,11	15
[N ₁₁₁₋₁₄] [Br]	-0,08	17
[N ₁₁₁₋₁₆] [Br]	0,24	19
[P ₄₄₄₄] [Br]	2,71	12
[P ₆₆₆₋₁₄] [Br]	1,05	32

Tabla 5.18. Efecto del número total de átomos de carbonos de los grupos alquilo que sustituyen a los cationes amonio sobre el valor *sobre el valor de LogEC₅₀* para *D. magna*.

Líquido iónico	LogEC ₅₀	Nº Carbonos
[N ₄₄₄₄] [Br]	1,47	12
[N ₁₁₁₋₁₂] [Br]	0,09	15
[N ₁₁₁₋₁₄] [Br]	-0,38	17
[N ₁₁₁₋₁₆] [Br]	-0,45	19

Del análisis cualitativo de los datos se observa el parámetro importante es el número de carbonos que sustituyen al átomo principal, así los líquidos iónicos [N₂₂₂₆][Br] y [N₄₄₄₄][Br] con distinta distribución de los sustituyentes, presentan similar valor de toxicidad. También se observa un aumento de la toxicidad con el número de átomos de carbono sustituyentes con un mínimo en los valores de EC50 entre 17 y 19 átomos de carbono, por ello se considerarán dos descriptores uno para un número de átomos de carbono hasta 17 y otro para un número de átomos de carbono a partir de 18 incluido para *V. fisheri*. Lo mismo se para *D. magna* con 20 o más de átomos de carbono y *subcapitata* con 23 o más de 23 átomos de carbono.

5.2.2. Descriptores aniónicos

Los descriptor aniónicos incluyen bromuro (Br^-), cloruro (Cl^-), yoduro (I^-), tetrafluoroborato (BF_4^-), hexafluorofosfato (PF_6^-), bis{(trifluorometil)sulfonyl}imida (NTf_2^-), bis(trifluorometil)imida ($\text{N}(\text{CF}_3)_2^-$), dicianamida (dca^-), nitrato (NO_3^-), tiociano (SCN^-), tetracianoborato ($\text{B}(\text{CN})_4^-$), triclanometanida (TCM), sacarinato (sac), dihidrogeno citrato (DHCit), docusato (doc), bitartrato (Bit), salicilato (Sal), ácido gálico (gal), ácido cafeico (caf), ácido valínico (vall), ácido siringico (sig), glicinato (gly), alanina (ala), serina (ser), prolina (pro), trifluorotris(pentafluoroethyl)phosphate ($(\text{C}_2\text{F}_5)_3\text{PF}_3$), hidrogeno sulfato (HSO_4^-), metilsulfato (MeSO_4^-), trifluorometanosulfonato (CF_3SO_4^-), etilsulfato (EtSO_4^-), octilsulfato (OcSO_4^-), perfluorobutanosulfonate ($\text{CF}_3(\text{CF}_2)_3\text{SO}_3^-$), toxilato (pTS), 2-(2-methoxyethoxy)ethylsulfate (C_5SO_6^-), 4-dodecylbenzenesulfonate (DBS), formiato (HCOO^-), acetato (CH_3COO^-), trifluoro acetato (CF_3COO^-), propionato (C_2CO_2^-), butirato e iso (C_3CO_2^-), pentanoato (C_4CO_2^-), perfluorobutanepentanoato ($\text{CF}_3(\text{CF}_2)_3\text{CO}_2^-$), hexanoato ([c6:0]), caprilato (C_7COO^-), octanoato (c8:0), 2-etilhexanoato (Ehexato), neodecanoato (neod), decanoato (dec), laurato (c12:0), palmitato (c16:0), esterarato (c18:0), isoesteroato (isost), oleato (c18:1), dihidrogenofosfato (H_2PO_4^-), dietilfosfato (Et_2P^-), tetracloroferrato (FeCl_4^-), hexafluoroantimonato (SbF_6^-).

Para intentar la simplificación del modelo, vamos a agrupar los posibles descriptores por familias, vamos a ver la influencia de cada componente de la familia para determinar si es posible la agrupación por familias y con ello la simplificación del modelo. Para los descriptores que son claramente diferentes desde un punto de vista químico se van a mantener como tal. Posteriormente la metodología PLS nos dirá si es posible se agrupación y la simplificación del modelo.

A continuación, procederemos a analizar las diferentes posibles familias.

Halogenuros

En este grupo incluimos a bromuro (Br^-), cloruro (Cl^-), yoduro (I^-). Mediante la selección de los líquidos iónicos apropiados analizaremos la influencia del tipo de halogenuro y la posible simplificación o no del descriptor. En las Tablas 5.19, 5.20 y

5.21 se comparan la toxicidad de líquidos iónicos con igual catión y diferentes aniones halogenuro para *V. fisheri*, *D. Magna* y *P. subcapitata*, respectivamente.

Tabla 5.19. Efecto del tipo de halogenuro en el anión de líquidos iónicos equivalentes con cationes imidazolio, piridinio, amonio, pirrolidinio y amonio en el valor de $LogEC_{50}$ para *V. fisheri*.

Catión	$LogEC_{50}$ (Br ⁻)	$LogEC_{50}$ (Cl ⁻)	$LogEC_{50}$ (I ⁻)
[C ₂ mim]	4,27	4,80	
[C ₄ mim]	4,01	3,71	
[C ₆ mim]	2,82	2,37	
[MOC ₂ mim]		5,34	3,89
[C ₄ Py]	3,39	3,30	
[C ₄ -4C1NPy]	2,32	2,52	
[C ₆ -4mPy]	2,07	1,44	
[N ₄₄₄₄]		3,39	3,27
[C ₆ mPyrr]	3,19	2,99	
[C ₈ ePip]	1,80	2,20	
[C ₄ TROP]		5,36	4,74
[P ₆₆₆₋₁₄]	1,05	1,14	

Tabla 5.20. Efecto del tipo de halogenuro en el anión de líquidos iónicos equivalentes con cationes imidazolio, piridinio y amonio en el valor de $LogEC_{50}$ para *D. Magna*.

Catión	$LogEC_{50}$ (Br ⁻)	$LogEC_{50}$ (Cl ⁻)
[C ₂ mim]	2,59	2,33
[C ₄ mim]	1,57	1,93
[C ₆ mim]	0,99	1,09
[C ₈ mim]	-0,95	0,54
[C ₁₂ mim]	-0,82	1,49
[C ₄ Py]	1,72	2,07
[N ₄₄₄₄]	1,47	0,74

Tabla 5.21. Efecto del tipo de halogenuro en el anión de líquidos iónicos equivalentes con cationes imidazolio y amonio en el valor de **LogEC₅₀** para *P. subcapitata*.

Catión	LogEC ₅₀ (Br ⁻)	LogEC ₅₀ (Cl ⁻)
[C ₄ mim]	3,08	1,90
[C ₈ mim]	1,63	0,70
[N ₄₄₄₄]	3,68	1,28

Como primera observación cabe destacar que las diferencias entre diferentes halogenuros en algunas ocasiones son importantes y en otras no tanto. En efecto de los aniones en la toxicidad de los líquidos iónicos se ha visto en ocasiones que no es un muy pronunciada al contrario de lo que ocurre cuando se compara la toxicidad para distintos cationes manteniendo el anión fijo. A pesar de todo para los datos experimentales disponibles se observa una tendencia clara. La toxicidad para *V. fischeri* y *P. subcapitata* sigue la siguiente tendencia: bromuro > cloruro > yoduro. En el caso de *D. magna* no se observa de forma clara ninguna tendencia. Por ello mantendremos estos descriptores por separado inicialmente para la aplicación del modelo.

Sulfatos

La siguiente familia estudiada será la de los sulfatos, es decir: hidrógeno sulfato (HSO₄⁻), metilsulfato (MeSO₄⁻), trifluorometanosulfonato (CF₃SO₄⁻), etilsulfato (EtSO₄⁻), octilsulfato (OcSO₄⁻), perfluorobutanosulfonate (CF₃(CF₂)₃SO₃⁻), toxilato (pTS), 2-(2-methoxyethoxy)ethylsulfate (C₅SO₆⁻), 4-dodecylbenzenesulfonate (DBS). Para el estudio de la influencia se han comparado los valores de toxicidad para líquidos iónicos con igual catión pero diferente anión tipo sulfato.

Tabla 5.22. Efecto de anión tipo sulfato de líquidos iónicos equivalentes con cationes imidazolio en el valor de LogEC_{50} para *V. fischeri*.

Catión	LogEC_{50} HSO_4^-	LogEC_{50} MeSO_4^-	LogEC_{50} CF_3SO_4^-	LogEC_{50} EtSO_4^-	LogEC_{50} OcSO_4^-	LogEC_{50} $\text{CF}_3(\text{CF}_2)_3\text{SO}_3^-$	LogEC_{50} pTS	LogEC_{50} C_5SO_6^-	LogEC_{50} DBS
[C ₂ mim]			3,74	4,10		3,76			
[C ₄ mim]	2,12	3,57	2,77	3,20	1,85		3,32	3,48	

Tabla 5.23. Efecto de anión tipo sulfato de líquidos iónicos equivalentes con cationes imidazolio en el valor de LogEC_{50} para *P. subcapitata*.

Catión	LogEC_{50} HSO_4^-	LogEC_{50} MeSO_4^-	LogEC_{50} CF_3SO_4^-	LogEC_{50} EtSO_4^-	LogEC_{50} OcSO_4^-	LogEC_{50} $\text{CF}_3(\text{CF}_2)_3\text{SO}_3^-$	LogEC_{50} pTS	LogEC_{50} C_5SO_6^-	LogEC_{50} DBS
[C ₄ mim]		2,42	3,34		3,35				

Del análisis de las Tablas 5.22 y 5.23 no se observa ninguna correlación clara que nos ayude a simplificar los descriptores aniónicos para sulfato. Aun así, se ha considerado analizar la influencia en la longitud de la cadena carbonada para los sulfatos en *V. fischeri*. Para ello se han empleado dos descriptores uno referente a la cadena carbona y otro referente al grupo sulfato. De esta forma mediante la aplicación del algoritmo PLS podremos observar de forma individual la influencia de la cadena carbonada del anión y del propio sulfato de forma independiente.

Ácidos carboxílicos

La serie de los ácidos carboxílicos la componen formiato (HCOO^-), acetato (CH_3COO^-), trifluoro acetato (CF_3COO^-), propionato (C_2CO_2^-), butirato e iso (C_3CO_2^-), pentanoato (C_4CO_2^-), perfluorobutanepentanoato ($\text{CF}_3(\text{CF}_2)_3\text{CO}_2^-$), hexanoato ([C₆:0]), caprilato (C_7COO^-), octanoato (C₈:0), 2-etilhexanoato (Ehexato), neodecanoato (neod), decanoato (dec), laurato (C₁₂:0), palmitato (C₁₆:0), esterarato (C₁₈:0), isoesteroato (isost), oleato (C₁₈:1). Para analizar la influencia de esos se comparan los valores de toxicidad de líquidos iónicos con igual catión y diferente anión basados en ácidos

carboxílicos. Para el análisis de relaciones cualitativas entre la familia de los ácidos carboxílicos se han comparado los valores de toxicidad de líquidos iónicos con igual catión y diferente anión. La comparación se refleja en las Tablas 5.24, 5.25 y Figura 5.6 y se ha realizado para *V. fisheri* y *P. subcapitata*, que disponían de datos de experimentales para poder hacer estas comparaciones. De las tablas comparativas se obtienen relaciones cualitativas muy interesantes que nos puede permitir definir los descriptores. Como tendencia general, se observa que la toxicidad se reduce al pasar de ácido fórmico a ácido acético y aumenta al pasar de ácido acético a ácido fórmico. Este hecho puede deberse a las propiedades ácido y base de las distintas especies. También se observa en general una disminución de la toxicidad al disminuir la longitud de la cadena del ácido carboxílico. Un comportamiento similar se observaba con el incremento de la longitud de la cadena carbonada sustituyente en cationes imidazolio. Esta disminución normalmente es baja al aumentar de átomo a átomo. No se observa una tendencia clara al compara la toxicidad de dos formas isoméricas como las del ácido butírico e isobutírico.

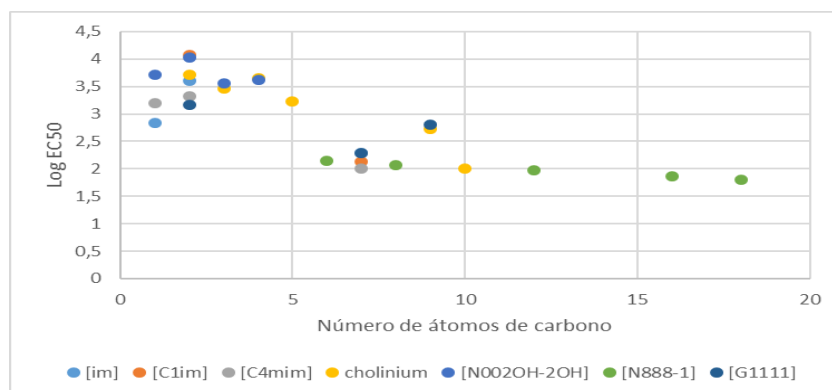
Tabla 5.24. Efecto de la longitud de la cadena del grupo carboxílico del anión en el valor de **LogEC₅₀** para *V. fischeri*.

<i>Catión</i>	LogEC ₅₀ HCOO	LogEC ₅₀ CH ₃ COO	LogEC ₅₀ CF ₃ COO	LogEC ₅₀ C ₂ CO ₂ ⁻	LogEC ₅₀ C ₃ CO ₂ ⁻	LogEC ₅₀ iC ₃ CO ₂	LogEC ₅₀ CF ₃ (CF ₂) ₃ CO ₂	LogEC ₅₀ C ₄ CO ₂ ⁻	LogEC ₅₀ c6:0	LogEC ₅₀ C7COO ⁻	LogEC ₅₀ c8:0	LogEC ₅₀ neod	LogEC ₅₀ dec	LogEC ₅₀ c12:0	LogEC ₅₀ c16:0	LogEC ₅₀ c18:0	LogEC ₅₀ isost	LogEC ₅₀ c18:1
[im]	2,83	3,61	4,07							2,29								
[C ₁ im]		4,07	3,57							2,13								
[C ₂ mim]		3,89					4,15											
[C ₄ mim]	3,19	3,32	3,28							2,00								
[N ₁₁₁ -2OH]		4,34					4,52											
Cholinium		3,72		3,47	3,65	3,64		3,23				2,72	2,00				1,87	
[N ₀₀₂ OH-2OH]	3,72	4,03		3,56	3,62													
[N ₈₈₈ -1]									2,14		2,06			1,98	1,86	1,80		1,25
[G ₁₁₁₁]		3,17	0,47							2,29		2,81					1,79	
[(C ₃ O) ₄ DMG]												2,84					1,82	

Tabla 5.25. Efecto de la longitud de la cadena del grupo carboxílico del anión en el valor de **LogEC₅₀** para *P. subcapitata*..

<i>Catión</i>	LogEC ₅₀ HCOO	LogEC ₅₀ CH ₃ COO	LogEC ₅₀ CF ₃ COO	LogEC ₅₀ C ₂ CO ₂ ⁻	LogEC ₅₀ C ₃ CO ₂ ⁻	LogEC ₅₀ iC ₃ CO ₂ ⁻	LogEC ₅₀ CF ₃ (CF ₂) ₃ CO ₂ ⁻	LogEC ₅₀ C ₄ CO ₂ ⁻
[N ₁₁₁ -2OH]	3,81	3,72		4,16	3,18	3,82		3,44
Colinio		2,88		2,43	2,64			

Figura 5.6 Efecto de la longitud de la cadena carbonada del anión tipo sulfato de líquidos iónicos equivalentes con cationes imidazolio en el valor de LogEC_{50} para *V. fischeri*.



5.3 DESARROLLO DE MODELOS QSAR PARA LA PREDICCIÓN DE LA ECOTOXICIDAD DE LÍQUIDOS IÓNICOS

Considerando el número de datos toxicológicos que se encuentran en la literatura se han desarrollado modelos QSAR para los organismos *V. fischeri*, *D. magna* y *P. subcapitata*. Se han considerado únicamente líquidos iónicos monocationicos y no se han considerado los disolventes eutécnico profundo (DES). Estas limitaciones constituyen parte del dominio de los modelos que se van a desarrollar.

También es importante considerar que para los valores de toxicidad de *V. fischeri*, *D. magna* y *P. subcapitata*, los datos bibliográficos reflejan valores de toxicidad a diferentes tiempos de contacto de los microorganismos con los líquidos iónicos. Para *V. fischeri* se presentan valores de toxicidad para 5, 10, 15 y 30 minutos. Para *D. magna* 24 y 48 horas y para *P. subcapitata* 48, 72 y 96 horas. Algunos de los modelos que se presentan en la bibliografía consideran los datos a diferentes tiempos, argumentando que no hay diferencias importantes entre los valores de toxicidad EC50 a diferentes tiempos. En realidad, si hay diferencias, a veces no son significativas pero en otras ocasiones sí son importantes. Problemente en el desarrollo de los primeros modelos QSARs se emplearon todos los datos ya que los datos experimentales disponibles eran escasos. En la actualidad el mayor número de datos experimentales nos pueden permitir prescindir de estos datos con el fin de aumentar la fiabilidad del modelo, ya que el uso de la toxicidad de un líquido iónico a distintos tiempos de contacto puede añadir incertidumbre al modelo. En nuestro caso, emplearemos los tiempos de 15 minutos para *V. fischeri*, 48 horas para *D. magna* y 72 horas para *P. subcapitata* que son los tiempos más usuales empleados en los ensayos y para los que se dispone de un mayor número de datos experimentales. En las Tablas 5.26, 5.27 y 5.28 queremos reflejar la variabilidad de los datos de toxicidad para un líquido iónicos específico a distintos tiempos, realizados por un mismo autor. Como se puede observar de los gráficos, la variabilidad a veces es pequeña, incluso casi nula, pero en otros casos llega a ser casi del 50%, o incluso llegando al 100%, aunque en la mayoría de los casos no llega al 10%. En cualquier caso, es otro grado de incertidumbre que nos interesa, a priori, eliminar, sobre todo cuando los datos disponibles son considerables. Otra de las observaciones interesantes que podemos hacer es que normalmente al aumentar los tiempos de contacto aumentan

los valores de EC50, hecho que es esperable. Sin embargo, en algunas ocasiones ocurre el efecto contrario, como por ejemplo en el caso del líquido iónico [C4mPyrr][Br]. Este resultado experimental puede explicarse por la adaptación del microorganismo al líquido iónico.

Tabla 5.26. Se presentan ejemplos de variaciones de los valores de **LogEC₅₀** medidos a diferentes tiempos para *V. fischeri*. La variabilidad de los datos se expresa como $\Delta(\max)\%$ que es el % la diferencia entre el valor máximo y mínimo en relación al valor mínimo.

Líquido iónico	LogEC ₅₀ 5min.	LogEC ₅₀ 10min.	LogEC ₅₀ 30min.	$\Delta(\max)\%$
[C4mim][Br]	3,27	3,11		10,3
[C4mim][1OSO ₃]	3,16	3,04		3,9
[Chol][DHCit]	1,99	2,08	2,10	3,6
[Chol][Cl]	2,77	2,77	2,73	1,4
[Bzchol][Cl]	3,44	3,23	3,22	6,8
[Chol][Sal]	2,95	2,80	2,65	11,3
[Chol][gal]	4,13	3,85	3,78	9,2
[Me ₃ NC ₂ OC ₁₂][SCN]		0,35	0,25	40
[Bu ₃ pC ₄][Sac]		2,12	2,12	0

Tabla 5.27. Se presentan ejemplos de variaciones de los valores de **LogEC₅₀** medidos a diferentes tiempos para *D. magna*. La variabilidad de los datos se expresa como $\Delta(\text{max})\%$ que es el % la diferencia entre el valor máximo y mínimo en relación al valor mínimo en valor absoluto.

Líquido iónico	LogEC ₅₀ 24h.	LogEC ₅₀ 48h.	$\Delta(\text{max})\%$
[C ₂ mim][NO ₃]	2,59	2,44	6,1
[C ₄ mim] [Br]	2,14	2,07	3,4
[C ₆ mim] [[NO ₃]	0,48	0,19	153
[C ₁₂ mim] [NO ₃]	-1,35	-1,42	5,2
[Py] [CF ₃ SO ₃]	1,73	1,64	5,5
[N ₄₄₄₄] [i]	0,87	0,78	11,5

Tabla 5.28. Se presentan ejemplos de variaciones de los valores de **LogEC₅₀** medidos a diferentes tiempos para *P. subcapitata*. La variabilidad de los datos se expresa como $\Delta(\text{max})\%$ que es el % la diferencia entre el valor máximo y mínimo en relación al valor mínimo.

Líquido iónico	LogEC ₅₀ 48 h	LogEC ₅₀ 72 h	LogEC ₅₀ 96h	$\Delta(\text{max})\%$
[C ₄ mim][Br]	-	3,08	2,90	6,2
[C ₄ mim][MeSO ₄]	-	2,61	2,42	7,9
[C ₃ mim][[Br]	3,46	3,29	3,14	10,2
[C ₆ mim][Br]	2,57	2,54	2,46	4,5
[Py][CF ₃ SO ₃]	-	2,88	2,46	17,1
[N ₄₄₄₄][Br]	2,97	3,68	2,65	38,9
[Chol][gal]	4,13	3,85	3,78	9,3
[C ₄ mPyrr][Br]	3,67	3,97	4,09	11,4

Considerando el número de datos toxicológicos que se encuentran en la literatura, se han desarrollado modelos QSAR para los organismos *V. fischeri*, *D. magna* y *P. subcapitata* en el que se han considerado aproximadamente unos 900 datos de toxicidad que han permitido la generación de matrices de más de 65.000 datos. Todos estos datos

se recogen en las tablas de datos presentadas como Anexos (Anexo I, II y III) en la presente memoria.

La aplicación de las metodologías de contribución de grupos supone que las propiedades de una molécula se pueden atribuir a la suma de las contribuciones de sus átomos y/o fragmentos. Para el desarrollo del modelo QSAR se considera que la toxicidad de un líquido iónico depende de tres contribuciones principales: aniones (A), cationes (C) y sustituciones alquílicas del catión (S). A continuación, se considera los descriptores considerados y los resultados obtenidos con la máquina de aprendizaje PLS del paquete XLSTAT para Microsoft excel.

En la **Figura 5.7** se representan las estructuras de los líquidos iónicos empleados en el método de contribución de grupos, mostrándose también cómo se consideran los distintos sustituyentes alquílicos de los cationes.

ANIONES

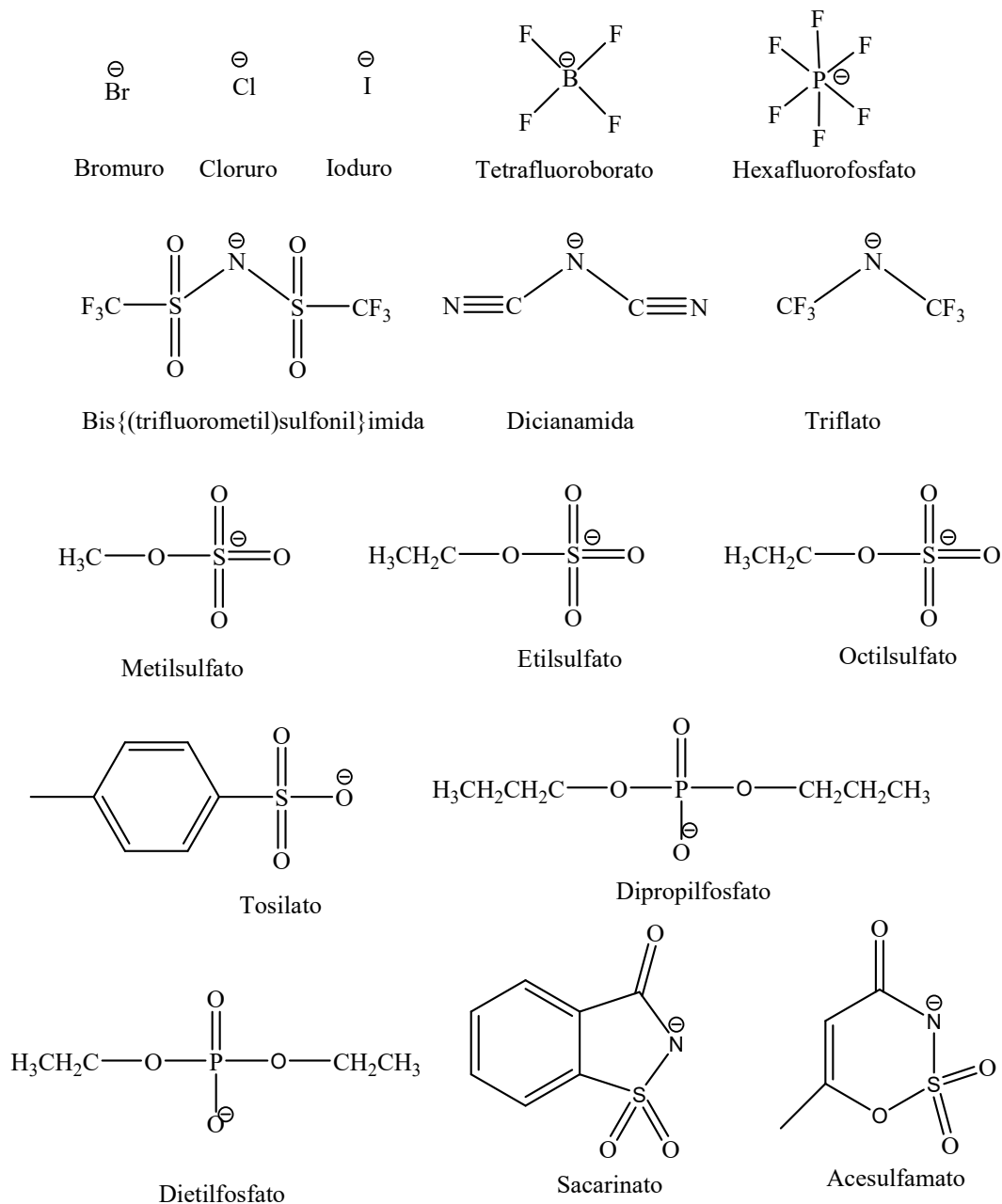


Figura 5.8. Representaciones estructurales de los líquidos iónicos empleados en el método de contribución de grupos.

Para los cálculos del modelo de contribución de grupos se define el término de *toxicidad adimensional* (Y^*) que se determina a través de la Ec. (5.1),

$$Y^* = \frac{\log EC_{50} - \log EC_{50_min}}{\log EC_{50_max} - \log EC_{50_min}} \quad (5.1)$$

donde $\log EC_{50max}$ y $\log EC_{50min}$ son los valores máximo y mínimo de $\log EC_{50}$ de los datos bibliográficos de toxicidad, respectivamente. Por tanto, el término de *toxicidad adimensional* (Y^*) variará entre 0 y 1, siendo $Y^*=0$ la toxicidad mínima de los líquidos iónicos estudiados y $Y^*=1$ la toxicidad máxima de los líquidos iónicos estudiados.

De acuerdo a la Ec. (5.1), los valores de $\log EC_{50}$ se pueden calcular mediante la Ec. (5.2).

$$\text{Log } EC_{50} (\mu\text{M}) = \log EC_{50_min} + (\log EC_{50_max} - \log EC_{50_min}) \cdot Y^* \quad (5.2)$$

La ecotoxicidad adimensional se puede estimar mediante el modelo QSAR como la suma de las contribuciones de cada grupo:

$$Y^* = \sum_i a_i \cdot A_i + \sum_j c_j \cdot C_j + \sum_k s_k \cdot S_k. \quad (5.3)$$

Donde A_i , C_j , y S_k son los descriptores moleculares para los líquidos iónicos. A_i , y C_j tienen un valor de 1 cuando el grupo está presente en la molécula y cero cuando no lo está. Por ejemplo, si un líquido iónico contiene un anión Br^- y un catión imidazolio su descriptor aniónico es $A_I=1$ y su descriptor catiónico $C_1(\text{IM})=1$. El valor de S , S_1 , S_2 es igual al número de carbonos que componen la cadena alquílica. Por ejemplo, si el catión constituyente del líquido iónico es el 1-butil-3-metilimidazolio, sus descriptores de sustituciones alquílicas del catión son $S=4$ y $S_1=1$. Por tanto, el líquido iónico bromuro de 1-butil-3-metilimidazolio viene definido por los descriptores $A_I=1$, $C_1(\text{Imi})=1$, $S=4$ y $S_1=1$. a_i , c_j , y s_k son las contribuciones de cada descriptor a la toxicidad de la molécula. Los subíndices indican aniones (i), cationes (j) y sustituciones (k). Los Anexos I, II y III muestran los valores de Y^* para *Vibrio fischeri*, *Daphnia magna* y *Pseudokirchneriella subcapitata*, respectivamente, así como los descriptores moleculares empleados para desarrollar los modelos QSAR mediante análisis de regresión lineal.

5.3.1. Modelo QSAR para la predicción de la ecotoxicidad de líquidos iónicos para *Vibrio fischeri*

La serie de 551 datos de toxicidad recogidos de la bibliografía, después de un proceso de curación (comentado en la metodología) se han ajustado a un modelo QSAR mediante un algoritmo PLS usando para ello el paquete XLSTAT para Microsoft Excel. Se han analizado la influencia de algunas variables del algoritmo PLS en el ajuste del modelo con el fin de fijar las mejores condiciones de ajuste del modelo. Para ello se ha analizado condiciones de paro automáticas o prefijadas (3, 5, 10, 20, 30 y 50) para fijar el número de componentes de la modelización. También se ha variado el número de datos para validaciones externas del modelo, se ha considerado o ninguna validación externa o un 10% de datos respecto al total para la validación externa. El algoritmo empleado por defecto para la validación cruzada es el de Jackknife(LOO). En la Tabla 5.3.1 se muestra los resultados estadísticos obtenidos para cada uno de los datos de ajuste empleados.

Tabla 5.3.1. Resultados estadísticos obtenidos para diferentes datos de ajuste empleados.

	Q ² acum	R ² Yacum	R ² Xacum	R ²	CPyrr/Im
Condiciones de paro: Automático Validación cruzada: Jackknife(LOO) 1	0,471	0,596	0,029	0,596	0,62
Condiciones de paro: Automático Validación cruzada: Jackknife(LOO) Número de observaciones para la validación: 27 1	0,446	0,588	0,029	0,588	0,78
G8 Condiciones de paro: Número fijado 3 (max acum) Validación cruzada: Jackknife(LOO)	Q 0,415	0,782	0,067	0,782	0,83
Condiciones de paro: Número fijado 3 Validación cruzada: Jackknife(LOO) Número de observaciones para la validación: 27	0,363	0,760	0,084	0,760	0,82
Condiciones de paro: Número fijado 5 Validación cruzada: Jackknife(LOO)	0,115	0,826	0,105	0,826	1,28
Condiciones de paro: Número fijado 5 Validación cruzada: Jackknife(LOO) Número de observaciones para la validación: 27	0,057	0,810	0,136	0,810	1,34
Condiciones de paro: Número fijado 10 Validación cruzada: Jackknife(LOO)	-1,346	0,836	0,230	0,836	1,98
Condiciones de paro: Número fijado 10 Validación cruzada: Jackknife(LOO) Número de observaciones para la validación: 27	-1,385	0,834	0,230	0,834	2,26
Condiciones de paro: Número fijado 20 Validación cruzada: Jackknife(LOO)	-15,273	0,838	0,355	0,838	1,96
Condiciones de paro: Número fijado 20 Validación cruzada: Jackknife(LOO) Número de observaciones para la validación: 27	-19,591	0,851	0,370	0,851	2,50
Condiciones de paro: Número fijado 30 Validación cruzada: Jackknife(LOO)	-70,776	0,838	0,480	0,838	1,96
Condiciones de paro: Número fijado 30 Validación cruzada: Jackknife(LOO) Número de observaciones para la validación: 27	-92,466	0,848	0,478	0,835	2,03
Condiciones de paro: Número fijado 50 Validación cruzada: Jackknife(LOO) Número de observaciones para la validación:	-223,299	0,838	0,716	0,838	1,96
Condiciones de paro: Número fijado 50 Validación cruzada: Jackknife(LOO) Número de observaciones para la validación: 27	-762,909	0,841	0,717	0,841	1,87

La Tabla 5.3.1 se organiza de menos a más componentes considerados sin validación externa y con validación externa. Se observa que conforme aumentan el número de componentes del modelo disminuye el estadístico Q^2_{acum} debido a la menor influencia de los primeros componentes en el modelo. El valor de R^2_{Yacum} y R^2_{Xacum} va aumentando de forma indefinida, aunque con incrementos cada vez menores conforme aumenta el número de componentes. Este hecho significa que el modelo explica estadísticamente mejor la variación de la componente Y y X conforme incrementamos el número de componentes. El coeficiente de regresión R^2 y la relación pirrolidinio/imidazolio aumenta ligeramente conforme aumenta el número de componentes para luego mantenerse constante e incluso bajar un poco a partir de 20 componentes. Siempre se obtienen mejores resultados, cuando se valida el modelo con valores de validación externos, que en nuestro caso se ha considerado un 10% de los totales, escogidos mediante un procedimiento aleatorio. Se observa que el incremento del número de componentes aumenta el tiempo de computación, aunque en el rango de componentes que nos movemos y con la potencia de los ordenadores convencionales actuales no supone un gran problema. Considerando todas estas variables y sus resultados se ha optado por un modelo de regresión en el que fijan 20 componentes y donde se emplean el 10% de los datos para una validación externa aleatoria.

A continuación, se muestran los parámetros de regresión para el modelo QSAR que ajusta los datos de toxicidad de *Vibrio fischeri*.

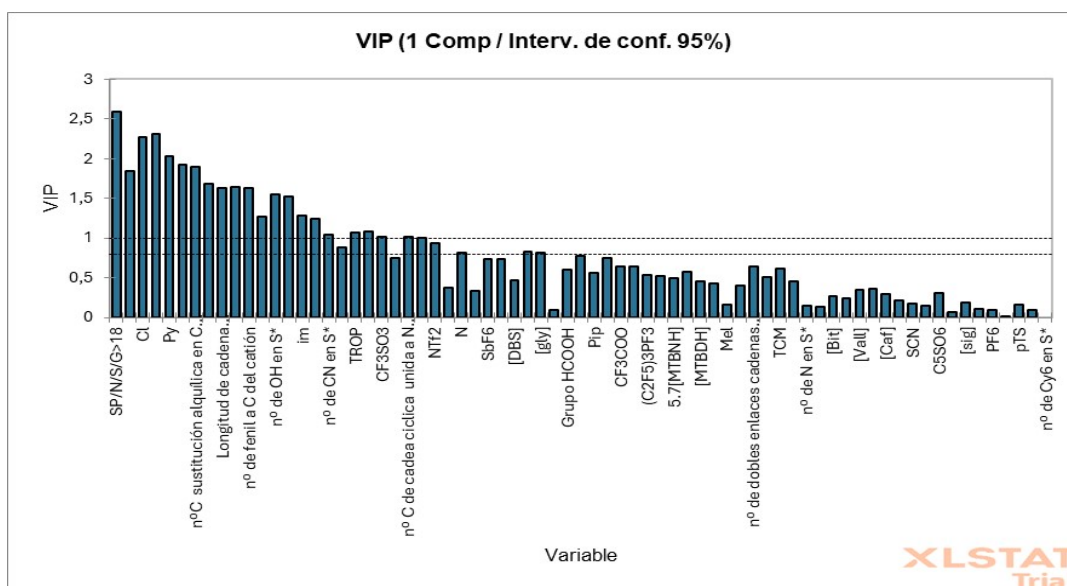


Figura 5.3.1. Estadístico VIP de diferentes variables para el primer componente.

El modelo estadístico nos permite conocer los valores del estadístico VIP para las diferentes variables y todos los componentes del modelo. En la Figura 5.3.1, se muestran los valores del estadístico VIP para el primer componente. Aunque este estadístico puede ser muy interesante a la hora de discernir que descriptores tienen más peso en el modelo y con ello se puede simplificar el mismo, en nuestro caso el principal interés es la comparación de las diferentes estructuras químicas (descriptores) para el diseño de líquidos iónicos de baja toxicidad.

Para visualizar en mejor medida la bondad del ajuste se ha realizado una comparación gráfica entre los datos observados para la *ecotoxicidad adimensional* (Y^*) de los líquidos iónicos y los datos predichos por el nuevo modelo de estimación (Figura 5.3.2).

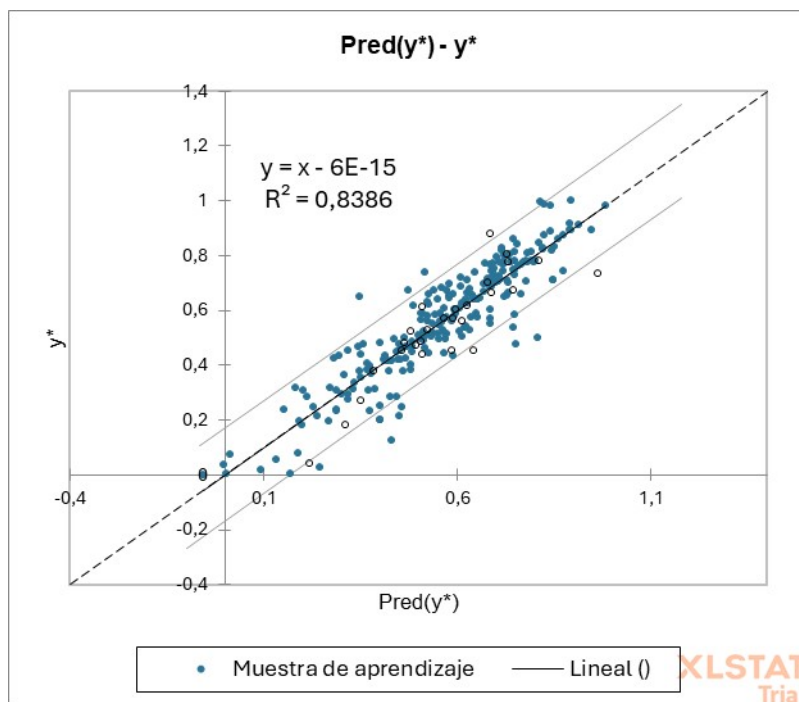


Figura 5.3.2 Representación de valores de toxicidad aparente experimentales de los líquidos iónicos en estudio vs estimados para los mismos por el modelo QSAR para *Vibrio fischeri*.

Como se puede observar, la pendiente de la regresión obtenida es la unidad y el coeficiente de correlación obtenido (R^2) es de 0,8386, lo que corrobora la bondad de la correlación entre los datos observados y estimados mediante el modelo propuesto.

En la Figura 5.3.3 se muestra el histograma de los residuos frente a su frecuencia. Los residuos se obtienen como la diferencia entre la ecotoxicidad adimensional observada y la calculada por el nuevo modelo.

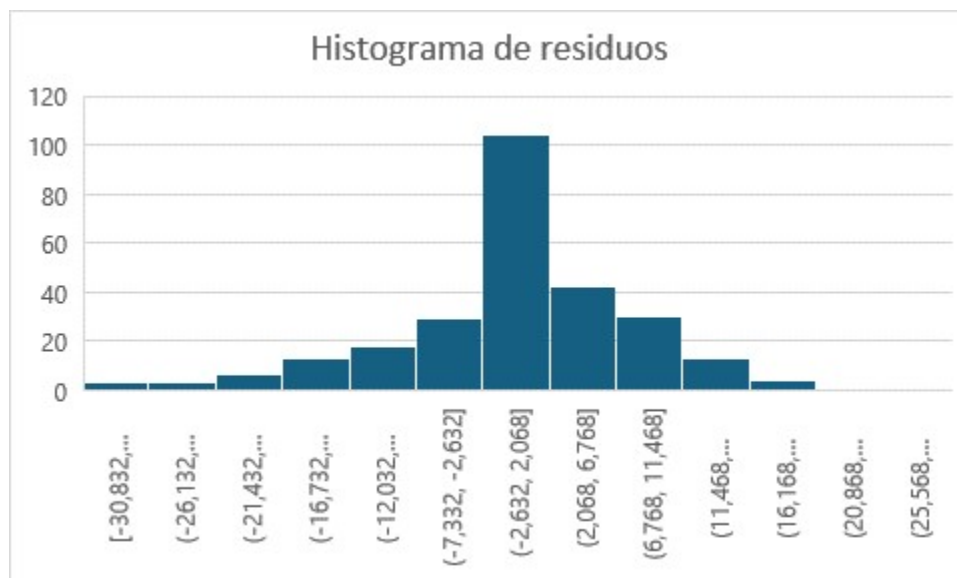


Figura 5.3.3. Histograma de los residuos frente a su frecuencia.

El histograma sigue una campana de Gauss lo que evidencia un adecuado ajuste de los datos. El 40% de los datos tienen un error menor del $\pm 3\%$ y casi el 70% de los tiene un error menor de $\pm 8\%$.

En la Tabla 5.3.2 vamos a presentar los parámetros del modelo. Específicamente se presenta los coeficientes que acompañan a los términos independientes (descriptores) y el valor de la intersección de con el eje de ordenadas. A continuación, vamos a analizar la información aportada por el modelo. Para ello, tenemos que recordar que debido a la normalización de la toxicidad adimensional, cuando la toxicidad es mínima el valor de la toxicidad adimensional es 1 y cuando la toxicidad es máxima, el valor de la toxicidad adimensional es cero. Valores positivos de los coeficientes implican menor toxicidad de las estructuras que representan los descriptores. Valores negativos de la toxicidad implican que estas estructuras van a general líquidos iónicos de menor toxicidad. La comparación de los coeficientes para los distintos descriptores va a permitir establecer la toxicidad relativa de unos descriptores en relación con otros descriptores, o lo que lo mismo unas estructuras químicas con otras.

Tabla 5.3.2. Parámetros del modelo.

Variable	y*
Intercepción	0,750
Br ⁻	0,115
Cl ⁻	0,009
I ⁻	0,131
NTf ₂ ⁻	-0,023
BF ₄ ⁻	0,087
PF ₆ ⁻	0,059
(C ₂ F ₅) ₃ PF ₃ ⁻	-0,323
N(CN) ₂ ⁻	0,135
SCN ⁻	0,069
FeCl ₄ ⁻	-0,216
NO ₃ ⁻	0,166
B(CN) ₄ ⁻	0,034
CF ₃ SO ₃ ⁻	0,072
CF ₃ COO ⁻	-0,056
[c18:1]	-0,005
C ₅ SO ₆ ⁻	0,123
dC ₂ -PO ₄ ⁻	0,206
pTS ⁻	0,124
SbF ₆ ⁻	-0,024
TCM ⁻	0,106
sacariato	0,338
docusat	0,030
[DHCit] ⁻	-0,182
[Bit] ⁻	-0,193
[Sal] ⁻	-0,041
[Gal] ⁻	0,099
[Caf] ⁻	0,036
[Vall] ⁻	0,056
[sig] ⁻	-0,007
[gly] ⁻	0,181
[ala] ⁻	0,151
[ser] ⁻	0,164
[pro] ⁻	0,183
[neod] ⁻	0,036
[Ehexato] ⁻	-0,154
[DBS] ⁻	-0,219
Longitud de cadena carbonada de C1 a c17 en RCOOH	-0,006
Grupo COO ⁻	0,050
Grupo SO ₄ ⁻	0,301
Longitud de cadena carbonada de C1 a C2 en RSO ₄ ⁻	-0,087
Im ⁺	0,054
Py ⁺	-0,007
N ⁺	-0,066

Pirr ⁺	0,103
Morp ⁺	0,270
Pip ⁺	0,082
TROP ⁺	0,198
P ⁺	-0,137
G ⁺	-0,188
QUINU ⁺	0,115
Mel ⁺	-0,257
[DBNH] ⁺	-0,191
[DBUH] ⁺	0,000
5.7[MTBNH] ⁺	-0,200
[MTBDH] ⁺	-0,217
S n° C más larga unida a N del catión de C1 a C10	-0,056
S n° C más larga unida a N del catión C>10	-0,036
n° C más corta unida a N del catión	-0,016
n°C sustitución alquílica en C del catión	-0,041
n° de O en S* (cualquiera de las sustituciones alquílicas)	0,026
n° de N en S*	-0,048
n° de azufres en S*	-0,148
n° de OH en S*	0,034
n° de CN en S*	0,303
n° de Cy6 en S*	-0,261
SP/N/S/G número de carbonos de C1 a C17	-0,014
SP/N/S/G número de carbonos mayor o igual a C18	-0,014
n° de dobles enlaces cadenas más larga unida a N	0,087
n° de COO- en S*	-0,266
n° de fenil a C del catión	-0,309
n° C de cadea ciclica unida a N del catión	-0,013

A continuación, vamos a comentar los resultados más trascendentes que se derivan del análisis de los valores de los coeficientes de los descriptores. Dentro del grupo de aniones más comumente empleado en líquidos iónicos, es decir: Br⁻, Cl⁻, NTf₂⁻, BF₄⁻, PF₆⁻, N(CN)₂⁻, NO₃⁻, COO⁻, y SO₄⁻, los que más toxicidad aportan son los NTf₂⁻ y los que menos los Br⁻, NO₃⁻ y SO₄⁻. El grupo de los aniones derivados de aminoácidos naturales tales como glicina, alanina, serina y prolina ([gly], [ala], [ser] y[pro]) también aportan baja toxicidad a líquidos iónico, lo que puede ser derivado de su origen natural. Otro comportamiento muy interesante observado es que conforme aumentamos la longitud de cadena carbonada en los aniones carboxilato y sulfato aumenta la toxicidad ya que cada vez que aumentamos un átomo de carbono en la cadena disminuimos el valor de la toxicidad adimensional en -0,006 para el caso de los aniones alquil carboxilato y en un valor de -0,087 para los aniones alquil sulfato. Es decir, un incremento en la hidrofobicidad del anión supone un incremento en su toxicidad. En relación a los

caciones cabe destacar que los cationes pirrolidinio son menos tóxicos que los imidazolio y piridinio ya que tiene el descriptor para pirolidinio tiene un valor de su coeficiente mayor que para los imidazolio y los piridinio. Los cationes amonio y fosfonio son más tóxicos que los anteriores (menor valor de su coeficiente). Nos encontramos también cationes como el morfolinio con uno de los coeficientes más altos (0,270), lo que lo hace un catión muy interesante para formular líquidos iónicos de baja toxicidad para aplicación en procesos biotecnológicos. En relación a la relación entre la composición de la cadena carbonada y su relación con la toxicidad la tabla 5.3.2 nos permite extraer importantes conclusiones del análisis de los coeficientes de los descriptores. El incremento en la longitud de cadena va a implicar en todos los casos un aumento en la toxicidad de los líquidos iónicos, ya que la inclusión de un átomo de carbono implica la disminución del valor de toxicidad adimensional en el valor negativo que viene expresado por su coeficiente. Así la inclusión de un átomo de carbono en la cadena más larga unidad a N disminuye el valor de la toxicidad adimensional (aumenta por tanto la toxicidad) en $-0,056$. El incremento en un átomo de carbono en los sustituyentes alquílicos de cationes amonio, fosfonio y sulfonio disminuye la toxicidad adimensional en $-0,014$ y de igual forma ocurre para todos los descriptores en los que se expresa la longitud de cadena carbonada en un sustituyente alquílico. Así de forma general podemos decir que el incremento de la hidrofobicidad por incremento de la longitud de la cadena alquílica en una cadena hidrocarbonada se traduce en un incremento de toxicidad del líquido iónicos. Debemos considerar los casos particulares en los que cadenas carbonadas muy largas producen una disminución de la toxicidad, como hemos comentado en apartados anteriores. Esto hecho lo hemos intentado reflejar en el modelo mediante la definición de un descriptor distinto cuando la cadena carbonada superaba un determinado número de átomos de carbono. Este número es de 10 para cadena carbonadas más largas unidas a Nitrógeno y 18 para número de carbonos totales unidos a aniones amonio, fosfonio y sulfonio en el caso de toxicidades para *Vibrio fisheri*. El modelo creado es capaz de reflejar esta particularidad para el caso de la cadena carbonada más larga unidad a N ya que cuando el número de carbono excede de 10 el valor de coeficiente es negativo y menor en valor absoluto. Sin embargo, no se refleja adecuadamente para aniones amonio, fosfonio y amonio ya que el coeficiente para el descriptor que considera cadenas más largas se mantiene igual ($-0,014$). Posiblemente este descriptor también sería más pequeño en valor absoluto, pero al considerar las mismas cifras significativas para los dos se pierde la posible diferencia

entre ambos. Otro hallazgo muy interesante, es que cuando introducimos un átomo electronegativo en la cadena carbona tipo O o OH (con coeficientes de descriptores 0,026 y 0,034 respectivamente) la toxicidad del líquido iónico disminuye. Esto compuestos electronegativos disminuyen la hidrofobicidad de la cadena carbonada. Así en términos generales cadenas más hidrofóbicas aumentan la toxicidad del líquido iónico y cadenas más hidrofílicas disminuyen la toxicidad del líquido iónico.

5.3.2. Modelo QSAR para la predicción de la ecotoxicidad de líquidos iónicos para *Daphnia magna*

La serie de los 174 recopilados para *Daphnia magna*, después de un proceso de curación inicial de los datos, se ha ajustado a un modelo QSAR mediante análisis de regresión múltiple lineal mediante un algoritmo PLS usando para ello el paquete XLSTAT para Microsoft Excel. De forma similar que para *Vibrio fisheri* y basándonos en los resultados obtenidos para esta, se han analizado la influencia de algunas variables del algoritmo PLS en el ajuste del modelo con el fin de fijar las mejores condiciones de ajuste del modelo. Específicamente se han analizado la influencia del número de componentes de la modelización (10, 20, 30) para fijar el número de componentes de la modelización. También se ha variado el número de datos para validaciones externas del modelo, se ha considerado o ninguna validación externa o un 10% de datos respecto al total para la validación externa. El algoritmo empleado por defecto para la validación cruzada es el de Jackknife(LOO). En la Tabla 5.3.3 se muestra los resultados estadísticos obtenidos para cada uno de los datos de ajuste empleados.

Tabla 5.3.3. Resultados estadísticos obtenidos para diferentes datos de ajuste empleados.

	Q^2_{acum}	R^2_{Yacum}	R^2_{Xacum}	R^2	Diferencia Pyrr-Im
Condiciones de paro: Número fijado 10 Validación cruzada: Jackknife(LOO)	0,065	0,952	0,414	0,952	0,063
Condiciones de paro: Número fijado 10 Validación cruzada: Jackknife(LOO) Número de observaciones para la validación: 9	-0,283	0,961	0,421	0,961	0,051
Condiciones de paro: Número fijado 20 Validación cruzada: Jackknife(LOO)	-3,789	0,952	0,627	0,952	0,63

Condiciones de paro: Número fijado 20 Validación cruzada: Jackknife(LOO) Número de observaciones para la validación: 9	-1,346	0,958	0,626	0,958	0,68
Condiciones de paro: Número fijado 30 Validación cruzada: Jackknife(LOO)	-6,964	0,952	0,796	0,952	0,64
Condiciones de paro: Número fijado 30 Validación cruzada: Jackknife(LOO) Número de observaciones para la validación: 9	-9,564	0,949	0,798	0,949	0,69

Se observa que conforme aumentan el número de componentes del modelo disminuye el estadístico Q^2_{acum} debido a la menor influencia de los primeros componentes en el modelo. El valor de R^2_{Yacum} y R^2_{Xacum} va aumentando de forma indefinida conforme aumenta el número de componentes. Este hecho significa que el modelo explica estadísticamente mejor la variación de la componente Y y X conforme incrementamos el número de componentes. Finalmente se ha optado por un modelo de regresión en el que fijan 20 componentes y donde se emplean el 10% de los datos para una validación externa aleatoria, ya que conseguimos un valor R^2 elevado y una mayor diferencia en entre valores de toxicidad para pirrolidinio y para imidazolio.

A continuación, se muestran los parámetros de regresión para el modelo QSAR que ajusta los datos de toxicidad de *Daphnia magna*.

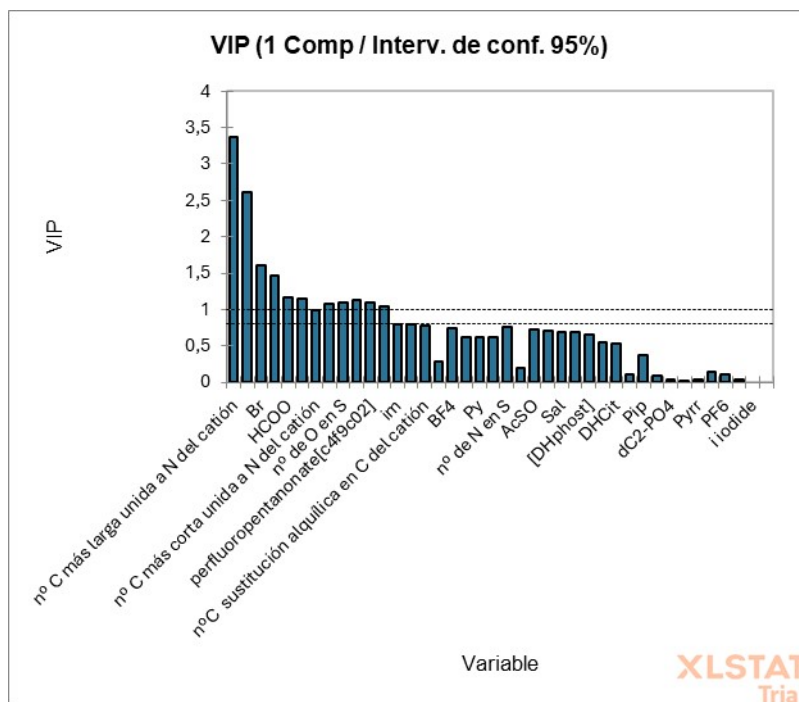


Figura 5.3.4. Estadístico VIP de diferentes variables para el primer componente.

Como se ha comentado anteriormente, el estadístico VIP puede ser muy interesante a la hora de discernir que descriptores tienen más peso en el modelo y con ello se puede simplificar el mismo. En nuestro caso el principal interés conocer la influencia de las distintas estructuras químicas en la toxicidad.

En la Figura 5.3.5 se representa gráficamente la relación de los valores observados para la *ecotoxicidad adimensional* (Y^*) de los líquidos iónicos y los datos predichos por el nuevo modelo de estimación.

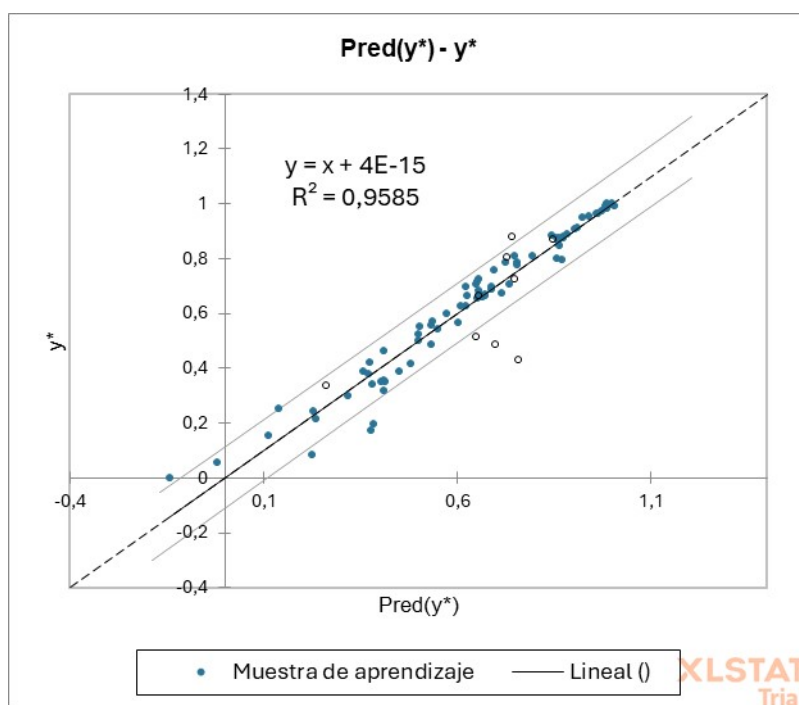


Figura 5.3.5. Representación de valores de toxicidad aparente experimentales de los líquidos iónicos en estudio vs estimados para los mismos por el modelo QSAR para *Daphnia magna*.

La pendiente de la resta de regresión obtenida es la unidad y el coeficiente de correlación obtenido (R^2) es de 0,9585 lo que corrobora la bondad de la correlación entre los datos observados y estimados mediante el modelo propuesto.

En la Figura 5.3.6 se muestra el histograma de los residuos frente a su frecuencia para el modelo de toxicidad hacia *Daphnia magna*.

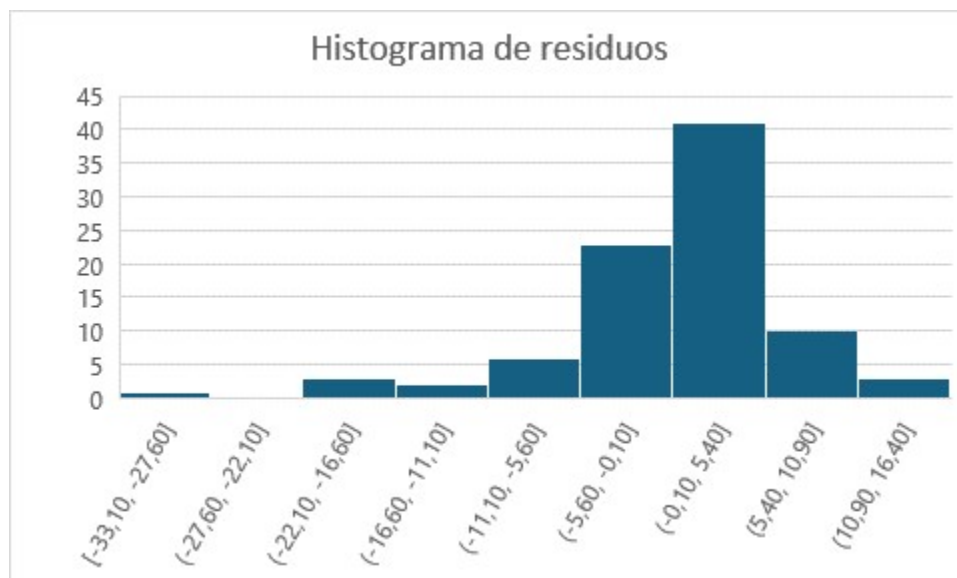


Figura 5.3.6. Histograma de los residuos frente a su frecuencia.

Según el histograma de residuos el 70% de los datos tiene un error menor del $\pm 6\%$ y cerca del 90% tiene un error de $\pm 12\%$. El histograma también tiene forma de campana de Gauss gracias a la bondad del ajuste.

En la Tabla 5.3.4 vamos a presentar los coeficientes de los descriptores del modelo y mediante su análisis podemos conocer la influencia de la estructura química de lo molécula de líquido iónicos en su toxicidad.

Tabla 5.3.4. Parámetros del modelo.

Variable	y*
Intercepción	0,889
Br-	-0,038
Cl-	0,051
NTf ₂ -	0,001
BF ₄ -	0,008
N(CN) ₂ -	-0,010
PF ₆ -	0,025
dC ₂ -PO ₄ -	0,042
C ₁ OSO ₃ -	-0,008
CF ₃ OSO ₃ ⁻	-0,290
Sach ⁻	0,051
C ₁₋₃ COO ⁻	-0,012
HCOO ⁻	0,066

AcSO ⁻	0,069
Bic ⁻	0,064
Bit ⁻	-0,021
DHCit ⁻	-0,026
Sal ⁻	0,055
perfluorobutanesulfonate[C ₄ F ₉ SO ₃] ⁻	0,074
perfluoropentanonate[C ₄ F ₉ CO ₂] ⁻	0,056
[DHphost] ⁻	0,033
I ⁻	0,000
NO ₃ ⁻	-0,062
Im ⁺	0,020
Py ⁺	0,054
N ⁺	-0,295
Pirr ⁺	0,088
Pip ⁺⁺	0,047
P	-0,356
Chol ⁺	0,043
n° C más larga unida a N del catión	-0,061
n° C más corta unida a N del catión	0,002
n°C sustitución alquímica en C del catión	-0,004
n° de O en cualquier sustitución alquímica (S*)	0,131
n° de Si en S*	0,063
n° de N en S*	-0,151
n° de OH en S*	0,079
n° de Bencenos en S*	0,000
SP/N/S/G	0,003
SP/N/S/G con 20 o más átomos de carbono	-0,011
n° de COO en cadenas unidas a N	0,167

A continuación, vamos a comentar los resultados más importantes que se derivan del análisis de los valores de los coeficientes de los descriptores. En relación a la toxicidad de los aniones encontramos como resultado interesante que los iones presentaban baja toxicidad para *Vibrio fisheri* tales como Br⁻ y NO₃⁻, no son los de menor toxicidad en el universo de iones estudiados para *Daphnia magna*. Al igual que observamos para *Vibrio fisheri*, para *Daphnia magna* un incremento en la longitud de la cadena de carbono del anión se traduce en un aumento de toxicidad, tal y como nos muestra el descriptor C₁₋₃COO⁻ (número de carbonos de la cadena alquímica de un alquil carboxilato, -0,012). En relación a la toxicidad de los cationes cabe destacar que al igual que pasaba para *Vibrio fisheri*, los cationes pirrolidinio son menos tóxicos que los imidazolio y piridinio y los catión amonio y fosfonio son de los más tóxicos. También se cumple de forma general que un incremento en el número átomos de carbono incrementa la toxicidad y que la inclusión de heteroátomos electronegativos como el oxígeno en la cadena

carbonada disminuye la toxicidad de los líquidos iónicos. De nuevo encontramos una relación entre la hidrofobicidad de la cadena carbonada y la toxicidad de los líquidos iónico.

5.3.3. Modelo QSAR para la predicción de la ecotoxicidad de líquidos iónicos para *Pseudokirchneriella subcapitata*

Para el alga verde *Pseudokirchneriella subcapitata* se han encontrado en la bibliografía un total de 173 datos que han sido curados para reducir su variabilidad y ajustados a un modelo QSAR mediante un algoritmo PLS usando mediante el paquete XLSTAT de Microsoft Excel. De forma similar a los casos anteriores se han analizado la influencia de algunas variables del algoritmo PLS en el ajuste del modelo con el fin de fijar las mejores condiciones de ajuste del modelo. Específicamente se han analizado la influencia del número de componentes de la modelización (10, 20, 30) para fijar el número de componentes de la modelización. También se ha variado el número de datos para validaciones externas del modelo, se ha considerado o ninguna validación externa o un 10% de datos respecto al total para la validación externa. En la tabla 5.3.5 se muestra los resultados estadísticos obtenidos para cada uno de los datos de ajuste empleados.

Tabla 5.3.5. Resultados estadísticos obtenidos para diferentes datos de ajuste empleados.

	Q ² acum	R ² Yacum	R ² Xacum	R ²	Diferencia Pyrr-Im
Condiciones de paro: Número fijado 10 Validación cruzada: Jackknife(LOO)	-0,110	0,927	0,463	0,927	0,154
Condiciones de paro: Número fijado 10 Validación cruzada: Jackknife(LOO) Número de observaciones para la validación: 9	-0,258	0,930	0,455	0,930	-0,037
Condiciones de paro: Número fijado 20 Validación cruzada: Jackknife(LOO)	-13,044	0,934	0,643	0,934	0,145
Condiciones de paro: Número fijado 20 Validación cruzada: Jackknife(LOO) Número de observaciones para la validación: 9	-5,230	0,930	0,644	0,930	0,135
Condiciones de paro: Número fijado 30 Validación cruzada: Jackknife(LOO)	-25,865	0,935	0,802	0,935	0,115
Condiciones de paro: Número fijado 30 Validación cruzada: Jackknife(LOO) Número de observaciones para la validación: 9	-27,648	0,948	0,803	0,948	0,176

Considerando los valores de los estadísticos obtenidos se ha optado por un modelo de regresión en el que fijan 30 componentes y donde se emplean 9 datos para una validación externa aleatoria.

A continuación, se muestran los parámetros de regresión para el modelo QSAR que ajusta los datos de toxicidad para *Pseudokirchneriella subcapitata*.

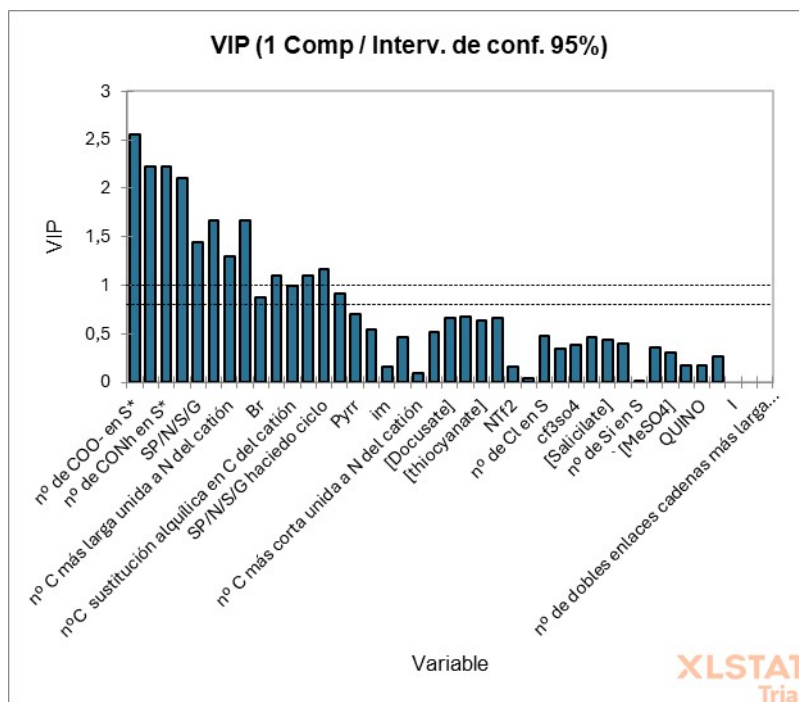


Figura 5.3.7. Estadístico VIP de diferentes variables para el primer componente.

En la Figura 5.3.7 se muestra el estadístico VIP puede ser muy interesante a la hora de discernir los descriptores por su peso en el modelo estadístico.

En la Figura 5.3.8 se representa los valores observados para la *ecotoxicidad adimensional* (Y^*) frente a los datos predichos por el modelo estadístico.

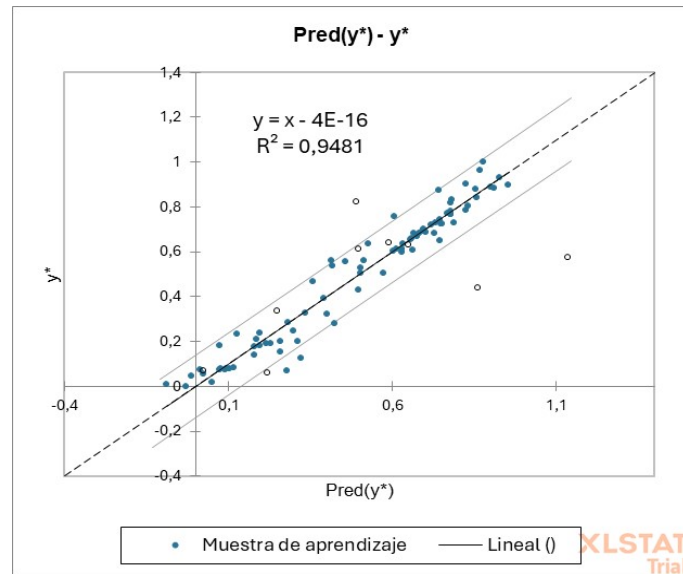


Figura 5.3.8 Representación de valores de toxicidad aparente experimentales de los líquidos iónicos en estudio vs estimados para los mismos por el modelo QSAR para *Pseudokirchneriella subcapitata*.

La pendiente de la recta de regresión obtenida es la unidad y el coeficiente de correlación obtenido (R^2) es de 0,9481 lo que demuestra que el modelo obtenido ajusta de manera adecuada los datos experimentales.

En la Figura 5.3.9 se muestra el histograma de los residuos frente a su frecuencia para el modelo de toxicidad hacia *Pseudokirchneriella subcapitata*.

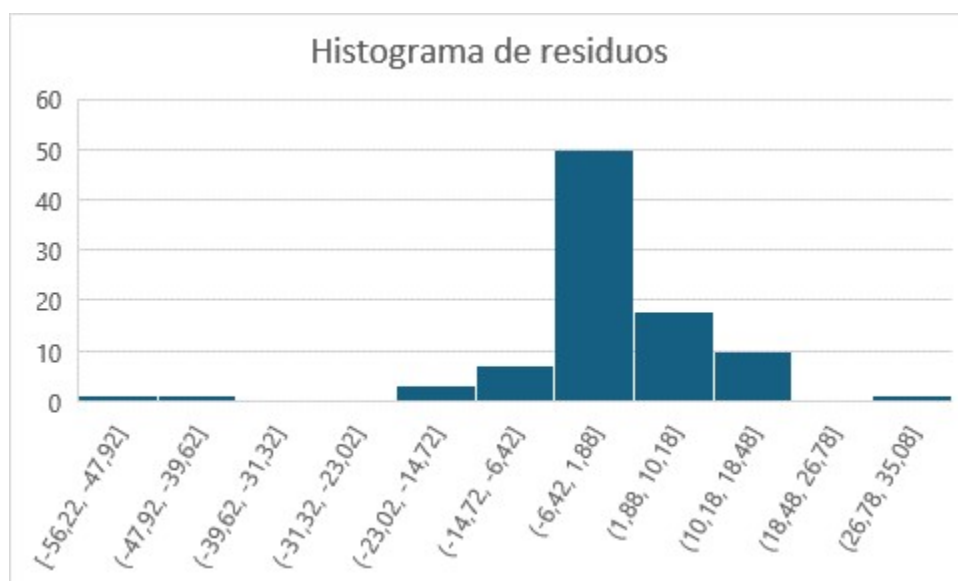


Figura 5.3.6. Histograma de los residuos frente a su frecuencia.

Según el histograma de residuos el 55% de los datos tiene un error menor del $\pm 4,5\%$ y cerca del 85% tiene un error de $\pm 15\%$. El histograma también tiene forma de campana de Gauss.

Mediante el uso de los datos representado en la Tabla 5.3.6 vamos a estudiar el efecto de la estructura química del líquido iónico en su toxicidad hacia *Pseudokirchneriella subcapitata*.

Tabla 5.3.6 Parámetros del modelo.

Variable	y^*
Intercepción	1,107
Br^-	-0,119
Cl^-	-0,443
I^-	0,000
NTf_2^-	-0,480
PF_6^-	-0,251
CF_3SO_4^-	-0,452
$[\text{HCO}_2\text{H}]^-$	-0,306
$[\text{C1-C4CO}_2\text{H}]^-$	-0,043
$[\text{HCO}_3]^-$	-0,358
[Bitartrato] ⁻	0,000
[DHcitrato] ⁻	-0,482
[DHfosfato] ⁻	-0,419

[Salicilato] ⁻	-0,367
[Docusato]	-0,511
[Saccharinato] ⁻	-0,351
[thiocianato] ⁻	-0,498
[3-hydroxy-2-naphthoato] ⁻	-0,465
[2-(hexyltio) acetato] ⁻	-0,781
[MeSO ₄] ⁻	-0,218
Im ⁺	0,023
Py ⁺	0,077
N ⁺	0,001
Pirr ⁺	0,153
P ⁺	-0,077
S ⁺	-0,261
QUINO ⁺	-0,251
n° C más larga unida a N del catión	-0,051
n° C más larga unida a N del catión 18	-0,039
n° C más corta unida a N del catión	-0,024
n°C sustitución alquílica en C del catión	-0,005
n° de Cl en cualquier sustitución (S*)	0,108
n° de Si en S*	-0,275
n° de OH en S*	0,107
n° de Bencil en S*	0,035
SP/N/S/G	-0,015
n° de dobles enlaces cadenas más larga unida a N	0,000
SP/N/S/G ciclo	-0,039
SP/N/S/G ciclo número de carbonos más de 23	-0,033
n° de COO ⁻ en S*	-0,135
n° de fenil a C del catión	-0,059
n° de CONH en S*	-0,059

Según se desprende de la tabla anterior, entre los aniones más tóxicos se encuentra el anión bistriflimida, al igual que ocurría para *Vibrio fisheri*. También al igual que en los casos anteriores un incremento en la longitud de la cadena de carbonada del anión se traduce en un aumento de toxicidad. En relación a los cationes cabe destacar, al igual que pasaba para los microorganismos anteriores, los cationes pirrolidinio son menos tóxicos que los imidazolio y piridinio. También se cumple de forma general que un incremento en el número átomos de carbono de la sustitución alquílica aumenta la toxicidad y que la inclusión de heteroátomos electronegativos como el oxígeno en la cadena alquílica disminuye la toxicidad de los líquidos iónicos. La relación entre la longitud de la cadena carbonada, inclusión de heteroátomos en la misma y la toxicidad la encontramos en los tres microorganismos analizados.

5.4 EVALUACIÓN DE LA INFLUENCIA DE LA ESTRUCTURA MOLECULAR DE LOS LÍQUIDOS IÓNICOS y MECANISMO TOXICOLÓGICO DE LÍQUIDOS IÓNICOS EN ORGANISMOS

Del análisis de los valores de los descriptores moleculares realizado en el apartado anterior, se observa que hay algunas coincidencias entre microorganismos en la tendencia de la toxicidad de los aniones tales como la alta toxicidad de bistriflimida para *Vibrio fisheri* y *Pseudokirchneriella subcapitata* o la influencia negativa en la toxicidad con el incremento en la cadena carbonada de los aniones observada también para todos los microorganismos. Sin embargo, para otros descriptores no se observan tales coincidencias de comportamiento. Si debemos considerar que no todos los descriptores aparecen en todos los microorganismos y universo de líquidos iónicos con los que se ajustan los modelos no es el mismo para los diferentes microorganismos lo que podrían también ser causa de falta de coincidencia en el comportamiento de algunos de los descriptores aniónicos. También debemos considerar que son microorganismos diferentes con biología diferente.

En cambio, para el caso de los cationes si que se observa un comportamiento muy general de ciertos descriptores para todos los microorganismos analizados tales como:

- 1) Los aniones pirrolidinio son más tóxicos que los imidazolio o piridinio.
- 2) El aumento en la longitud de la cadena carbona, hasta cierto número de átomos de carbono aumenta la toxicidad de los líquidos iónicos.
- 3) La inclusión de heteroátomos electronegativos en la cadena carbonada reduce la toxicidad de los líquidos iónicos.

Es decir, el caso de los aniones factores que aumentan la hidrofobicidad de las moléculas aumentan la toxicidad de los líquidos iónicos y esto se cumple para todos los microorganismos. Esto nos puede hacer pensar que la toxicidad hacia de los microorganismos va a depender en gran parte de la composición catiónica de los líquidos iónicos y esta toxicidad puede estar relacionada con la capacidad de los líquidos iónicos para interaccionar con la membrana lipofílicas de las células de estos microorganismos.

El grupo de investigación liderado por la Prof. Gill Stephens de la Universidad de Nottingham (Reino Unido) estudió la acumulación de líquidos iónicos en células de *Escherichia coli* (Cornmell *et al.*, 2008). Estos autores demostraron que los líquidos iónicos que presentaban una mayor toxicidad se acumulaban más rápidamente que los líquidos iónicos menos tóxicos. Además, esta acumulación se producía específicamente en la membrana y no en el citoplasma. Es decir, la toxicidad de los líquidos iónicos está relacionada con la acumulación de estos en la membrana celular. Los resultados encontrados en el presente trabajo concuerdan con la hipótesis presentada por la Prof. Gill Stephens, ya que según hemos visto:

- 1) Un incremento en la longitud carbonada de la cadena alquílica de los sustituyentes catiónicos implica un incremento de la toxicidad. Considerando la naturaleza lipofílica de la membrana celular, un incremento en la longitud de la cadena carbonada supone un incremento de su lipofilidad y como consecuencia de su afinidad con la membrana y su posibilidad de acumulación en la misma.

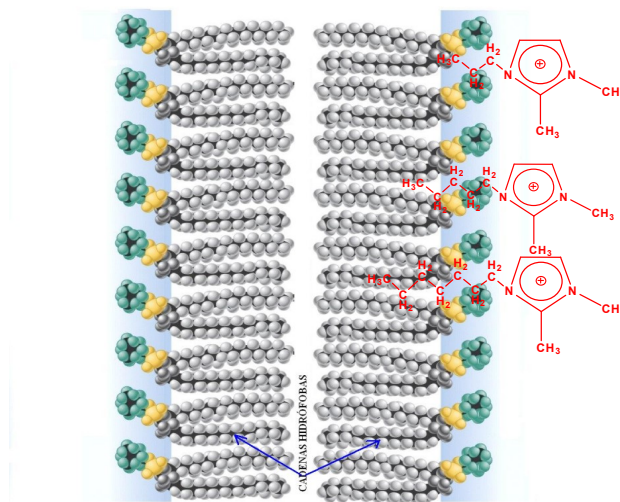


Figura 5.4.1. Representación gráfica de la interacción de la cadena alquílica de los sustituyentes de los líquidos iónicos con la membrana celular.

- 2) La sustitución de un átomo de carbono en la cadena carbonada por un átomo de mayor electronegatividad, tal como oxígeno disminuye la toxicidad. La introducción de un átomo más electronegativo implica el aumento de la polaridad de la cadena y como consecuencia la posible disminución de las interacciones hidrófobas con la membrana lipídica, dificultando de esta forma la acumulación en la membrana celular.

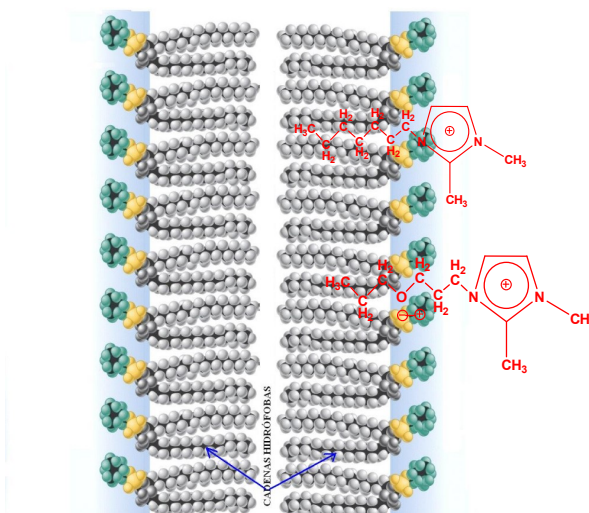


Figura 5.4.2. Representación gráfica de la interacción de la cadena alquílica con heteroátomos de los sustituyentes de los lípidos iónicos con la membrana celular.

- 3) Los cationes imidazolium y piridinium, aromáticos y por tanto de geometría plana, suelen ser más tóxicos que otros similares no aromáticos y de geometría tridimensional, tales como pirrolidonio o morfolinio, debido a que en los primeros por su hidrofobicidad o menores impedimentos estéricos pueden favorecer las interacciones con los lípidos presentes en la membrana en mayor medida que los segundos, los cuales son menos hidrófobos y presentan más impedimentos estéricos.

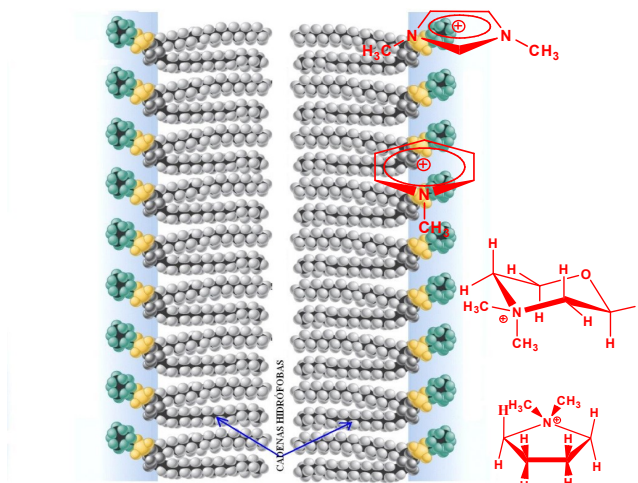


Figura 5.4.3. Representación gráfica de la interacción de diferentes cationes (imidazolio, piridinio, morfolinio y pirrolidinio) de líquidos iónicos con la membrana celular.

Considerando los argumentos extraídos de la interpretación del modelo de toxicidad propuesto, se puede apoyar la hipótesis de la importancia en la toxicidad que tiene la acumulación de líquido iónico en membrana celular. A pesar de esto, no deben descartarse otros mecanismos de toxicidad que se pueden superponer al anteriormente comentado. Podemos también concluir que el mecanismo de toxicidad debe ser similar en los tres organismos estudiados ya que la importación relativa de cada subestructura, especialmente catiónica, que forma el líquido iónico es similar para estos tres organismos con pequeñas diferencias.

5.5. DISEÑO DE LÍQUIDOS IÓNICOS MENOS TÓXICOS PARA APLICACIONES BIOTECNOLÓGICAS

Otra de las utilidades más importante del desarrollo de modelos de contribución de grupos es el diseño de líquidos iónicos menos tóxicos. De este modo se puede dirigir la síntesis de nuevos líquidos iónicos hacia estructuras con más posibilidad de éxito en cuanto a sus propiedades toxicológicas y, por tanto, se reducen los costes de desarrollo de nuevos productos. En este contexto, el modelo desarrollado en la presente memoria

puede ser utilizado para el diseño de líquidos iónicos que presenten una menor toxicidad.

Si consideramos los coeficientes de contribución para *Vibrio fischeri*, podríamos sintetizar un líquido iónico de baja toxicidad compuesto por el anión *dietilfosfato*, el catión *morfolinio*, una sustitución alquílica de cadena corta unida a nitrógeno, *metilo* ($S_1=1$) y una sustitución de cadena larga unida a nitrógeno del tipo *hidroximetilo* ($S=1$ y $S_8=1$). Como ha puesto de manifiesto el modelo para *Vibrio fischeri*, conforme se disminuye la longitud de la cadena carbonada de las sustituciones del nitrógeno cuaternario disminuye la toxicidad del líquido iónico. No obstante, debemos de considerar que la sustitución del nitrógeno por al menos dos metilos es imprescindible para la formación del líquido iónico (mediante reacción de cuartenización de la amina). La estructura de líquido iónico de “*diseño*” de baja toxicidad sería la mostrada en la Figura 5.15.

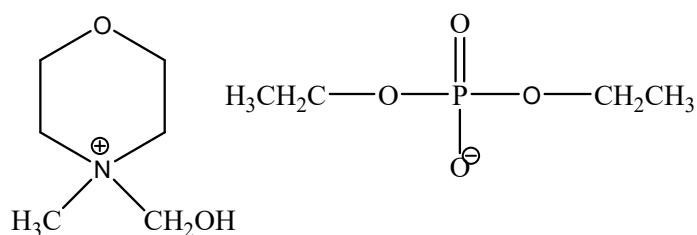


Figura 5.15. Fórmula desarrollada del líquido iónico de diseño dietil fosfato de *N,N'*-metilhidroximetil morfolinio.

Considerando la estructura del líquido iónico la ecuación del modelo sería la siguiente:

$$Y^* = 0,206(\text{Et}_2\text{P}^-) + 0,270 (\text{mor}^+) - 0,056 \text{ S} - 0,016 \text{ S1} + 0,034 \text{ S8 (OH)}$$

Como hay un elemento de cada uno de los descriptores, el valor de Y^* sería:

$$Y^* = 0,206 + 0,270 - 0,056 - 0,016 + 0,034 = 1,188$$

Atendiendo por tanto al modelo para *Vibrio fischeri*, el **líquido iónico de diseño dietil fosfato de N,N'-metilhidroximetil morfolinio** tendría una toxicidad adimensional estimada por el modelo desarrollado de 1,188. Aplicando la ecuación 5.1 se obtiene el valor de $\log EC_{50} (\mu M) = 6,64$. Por lo tanto, este líquido iónico de diseño tendría una toxicidad para *Vibrio fischeri* mucho menor que disolventes orgánicos convencionales tales como acetona, acetonitrilo y tolueno, con valores de $\log EC_{50} (\mu M)$ de 5,47, 5,77 y 1,96, respectivamente.

6. CONCLUSIONES

Del análisis de la información recogida en la presente memoria se desprenden las siguientes conclusiones:

1. Se ha realizado la revisión bibliográfica más extensa hasta la fecha relativa a la toxicidad de líquidos iónicos a *V. fisheri*, *D. magna* y *P. subcapitata*.
2. Se han desarrollado nuevos modelos de contribución de grupos, QSAR, para la estimación de la toxicidad líquidos iónicos sobre la bacteria *Vibrio fisheri*, la pulga de agua *Daphnia magna* y la microalga *Pseudokirchneriella subcapitata*,
3. En relación con la toxicidad de los distintos aniones, cationes y sustituciones en el catión que conforman los líquidos iónicos, se puede concluir de forma general que:
 - El anión bis [trifluorometil]sulfonil]imida (NTf_2^-) se presenta como uno de los más tóxicos en dos de los microorganismos.
 - El incremento de la longitud de cadena carbonada de los aniones aumenta la toxicidad de los líquidos iónicos.
 - Los cationes pirrolidonio son menos tóxicos que los piridinio y imidazolio.
 - El incremento en la longitud de la cadena de las sustituciones alquímica incrementa la toxicidad del líquido iónico.
 - La inclusión de heteroátomos electronegativos en la cadena alquímica disminuye la toxicidad de los líquidos iónicos.
 - Conforme aumenta la electronegatividad de los átomos que forman parte de la cadena sustituyente en los cationes disminuye la toxicidad de estos átomos, con la excepción del cloro. Así, los átomos del grupo VIA (oxígeno y azufre) son menos tóxicos que los del grupo VA (nitrógeno y fósforo) y estos a su vez menos tóxicos que los del grupo IVA (carbono y silicio).

4. La relación de la toxicidad de los líquidos iónicos con su acumulación en la membrana celular queda refrendada por los siguientes hechos encontrados en el análisis de los modelos:
 - El incremento en la longitud carbonada de la cadena alquílica de los cationes, y como consecuencia el incremento de su lipofilicidad, implica un incremento de la toxicidad del líquido iónico.
 - La sustitución de un átomo de carbono en la cadena alquílica de los cationes por un átomo de mayor electronegatividad, tal como oxígeno o azufre, disminuye la toxicidad del líquido iónico.
 - Los cationes imidazolio y piridinio, aromáticos, y por tanto, de geometría plana, muestran una mayor toxicidad que otros similares no aromáticos y de geometría tridimensional, tales como pirrolidonio o morfolinio.
5. Los mecanismos toxicológicos de los líquidos iónicos están relacionados con su capacidad de interacción con las membranas biológicas y dependen de forma más directa del catión del líquido iónico.
6. Los modelos QSAR desarrollados permiten el diseño de líquidos iónicos menos tóxicos. En este contexto, el líquido iónico de diseño **dietil fosfato de N,N'-metilhidroximetil morfolinio** tendría una toxicidad mucho menor que otros disolventes orgánicos convencionales tales como acetona, acetonitrilo y tolueno.

Como se ha demostrado en la presente memoria de Tesis Doctoral, el desarrollo de modelos tipo QSAR aplicados al análisis de toxicidad de sustancias es de gran utilidad no sólo para la modelización, predicción y diseño de líquidos iónicos, sino también en el análisis de los mecanismos toxicológicos. Los resultados alcanzados permiten la selección de los líquidos iónicos más adecuados desde del punto de vista de su toxicidad para aplicaciones biotecnológicas.

7. BIBLIOGRAFÍA

Abramenko N., Kustov L., Metelystsia L., Kovalishyn V., Tetko I., Peijnenburg W. A review of recent advances towards the development of QSAR models for toxicity assessment of ionic liquids. *Journal of Hazardous Materials*. 348 (2020).

Adams C.J., Earle M.J., Roberts G., Seddon K.R. Friedel-Crafts reactions in room temperature ionic liquids. *Chemical Communications*. 19 (1998) 2097–2098.

Agrawal V.K., Khadikar P.V. QSAR study on narcotic mechanism of action and toxicity: A molecular connectivity approach to *Vibrio fischeri* toxicity testing. *Bioorganic & Medicinal Chemistry*. 10 (2002) 3517–3522.

Aki S.N.V.K., Brennecke J.F., Samanta A. How polar are room-temperature ionic liquids. *Chemical Communications*. (2001) 413–414.

Allen D.T., Shonnard D.R. Green Engineering: Environmentally Conscious Design of Chemical Processes. (2002) Prentice-Hall, Upper Saddle River, NJ ISBN 0-13-061908-6.

Álvarez-Guerra M., Irabien A. Design of ionic liquids: An ecotoxicity (*Vibrio fischeri*) discrimination approach. *Green Chemistry*. 13 (2011) 1507–1516.

Arksey H., O'Malley L. Scoping studies: Towards a methodological framework. *International Journal of Social Research Methodology*. 8 (2005) 19–32.

Arning J., Stolte S., Bösch A., Stock F., Pitner W.R., Welz-Biermann U., Jastorff B., Ranke J. Qualitative and quantitative structure activity relationships for the inhibitory effects of cationic head groups, functionalised side chains and anions of ionic liquids on Acetylcholinesterase. *Green Chemistry*. 10 (2008) 47–58.

Arufe M.I., Arellano J., Moreno M.J., Sarasquete C. Toxicity of a comercial herbicide containing terbutryn and triasulfuron to seabream (*Sparus aurata L.*) larvae: a comparison with the Microtox® test. *Ecotoxicology and Environmental Safety*. 59 (2004) 209–216.

Baicha Z., Salar-García M.J, Ortiz-Martinez V., Hernández-Fernández F.J, de los Ríos A.P., Maqueda Marín D.P., Collado J.A., Tomás-Alonso F, El Mahi M. On the selective transport of nutrients through polymer inclusion membranes based on ionic liquids. *Processes*. 7 (2019) 544.

BASF. Recuperado el 25 de enero de www.basf.com.

Baker S.N., Baker G.A., Kane M.A., Bright F.V. The cybotactic region surrounding fluorescent probes dissolved in 1-n-butyl-3-methylimidazolium hexafluorophosphate: effects of temperatura. *The Journal of Physical Chemistry B*. 105 (2001) 9663–9668.

Bailey M.M., Townsend M.B., Jernigan P.L, Sturdivant J., Hough-Troutman W.L., Rasco J.F., Swatloski R.P., Rogers R.D., Hood R.D. Developmental toxicity assessment

of the ionic liquid 1-butyl-3-methylimidazolium chloride in CD-1 mice. *Green Chemistry*. 10 (2008) 1213–1217.

Bakshi K., Mitra S., Sharma V.K., Jayadev M.S.K., Sakai V.G., Mukhopadhyay R., Gupta A., Ghosh S.K. Imidazolium-based ionic liquids cause mammalian cell death due to modulated structures and dynamics of cellular membrane. *Biochimica et Biophysica Acta (BBA) – Biomembranes*. 1862 (2020).

Behar D., Gonzalez C., Neta P. Reaction kinetics in ionic liquids: pulse radiolysis studies of 1-butyl-3-methylimidazolium salts. *The Journal of Physical Chemistry A*. 105 (2001) 7607–7614.

Bernot R.J., Brueseke M.A., Evans-White M.A., Lamberty G.A. Acute and chronic toxicity of imidazolium-based ionic liquids on *Daphnia Magna*. *Environmental Toxicology and Chemistry*. 24 (2005) 87–92.

Bernot B.J., Kennedy E.E., Lamberty G.A. Effects of ionic liquids on the survival, movement, and feeding behavior of the freshwater snail, *Physa acuta*. *Environmental Toxicology and Chemistry*. 24 (2005) 1759–1765.

Blum D.J.W., Speece R.E. Determining chemical toxicity to aquatic species. *Environmental Science and Technology*. 24 (1990) 284–293.

Boluda R., Quintanilla J.F., Bonilla J.A., Sáez E., Gamón M. Application of the Microtox[®] test and pollution indices to the study of water toxicity in the Albufera Natural Park (Valencia, Spain). *Chemosphere*. 46 (2002) 355–369.

Bonhôte P., Dias A. P., Papageorgiou N., Kalyanasundaram K., Grätzel M. Hydrophobic, Highly Conductive Ambient-temperature Molten Salts. *Inorganic Chemistry*. 35 (1996) 1168–1178.

Buzzeo M.C., Evans R.G., Compton R.G. Non-Haloaluminate Room Temperature Ionic Liquids in Electrochemistry. *Chemistry Europe*. 5 (2004) 1106–1120.

Bruzzone S., Chiappe C., Focardi S.E., Pretti C., Renzi M. Theoretical descriptor for the correlation of aquatic toxicity of ionic liquids by quantitative structure-toxicity relationships. *Chemical Engineering Journal*. 175 (2011) 17 – 23.

Bystrzanowska, M., Pena-Pereira, F., Marcinkowski, L., Tobiszewski, M. How green are ionic liquids? – A multicriteria decision analysis approach. *Ecotoxicology and Environmental Safety*. 174 (2019) 455 – 458.

Carmichael A.J., Seddon K.R. Polarity study of some 1-alkyl-3-methylimidazolium ambient-temperature ionic liquids with the solvatochromic dye, Nile Red. *Journal of Physical Organic Chemistry*. 13 (2000) 591 –595.

Cao L., Zhu P., Zhao Y., Zhao J. Using machine learning and quantum chemistry descriptors to predict the toxicity of ionic liquids. *Journal of Hazardous Materials*. 15 (2018) 17 – 26.

Carreira A.R.F., Veloso T., Schaeffer N., Pereira J.L., Ventura S.P.M., Rizzi C., Plénet J.S., Passos H., Coutinho J.A.P. Synthesis of purine-based ionic liquids and their applications. *Molecules*. 26 (2021).

Carrera G.V.S.M., Branco L.C., Aires-de-Sousa J., Afonso C.A.M. Exploration of quantitative structure-property relationships (QSPR) for the design of new guanidinium ionic liquids. *Tetrahedron*. 64 (2008) 2216 – 2224.

Castillo M., Alonso M.C., Riu J., Reinke M., Klöter G., Dizer H., Fischer B., Hansen P.D., Barceló D. Identification of cytotoxic compounds in European wastewaters during a field experiment. *Analytica Chimica Acta*. 426 (2001) 265 – 277.

Chauvin Y., Musmann L., Olivier-Bourbigou H. A novel class of versatile solvents for two-phase catalysis: Hydrogenation isomerisation, and hydroformylation of alkenes catalyzed by rhodium complexes in liquid 1,3-dialkylimidazolium salts. *Angewandte Chemie International Edition in English*. 34 (1996) 2698– 2700.

Chen H.-F., Hee S.S.Q. Ketone EC50 values in the Microtox test. *Ecotoxicology and Environmental Safety*. 30 (1995) 120 – 123.

Chen C.Y., Wang Y.J., Yang C.F. Estimating low-toxic-effect concentrations in closed-system algal toxicity tests. *Ecotoxicology and Environmental Safety*. 72 (2009) 1514 – 1522.

Chirico N., Gramatica P. Real external predictivity of QSAR models: how to evaluate it? Comparison of different validation criteria and proposal of using the concordance correlation coefficient. *Journal of Chemical Information and Modeling*. 51 (2011) 2320–2335.

Chul-Woong Cho., Pham T.P.T., Jeon Y.-C., Vijayaraghavan K., Choe W.-S., Yun Y.-S. Toxicity of imidazolium salt with anion bromide to a phytoplankton *Selenastrum capricornutum*: Effect of alkyl-chain length. *Chemosphere*. 69 (2007) 1003–1007.

Cho C.-W., Jeon Y.-C., Phuong T., Phama T., Vijayaraghavanc K., Yuna Y.-S. The ecotoxicity of ionic liquids and traditional organic solvents on microalga *Selenastrum capricornutum*. *Ecotoxicology and Environmental Safety*. 71 (2008) 166–171.

Cho C.-W., Phuong T., Phama T., Jeon Y.-C., Yuna Y.-S. Influence of anions on the toxic effects of ionic liquids to a phytoplankton *Selenastrum capricornutum*. *Green Chemistry*. 10 (2008) 67–72.

Consonni V., Todeschini, R. Molecular descriptors Recent advances in QSAR studies. *Springer, New York*. 8 (2010) 29–102.

Coleman D., Gathergood N.. Biodegradation studies of ionic liquids. *Chemical Society Reviews*. 39 (2010) 600-637.

Costa S.P.F., Justina V.D., Bica K., Vasiliou M., Pinto P.C.A.G., Saraiva M.L.M.F.S. Automated evaluation of pharmaceutically active ionic liquids' (eco)toxicity through the inhibition of human carboxylesterase and *Vibrio fischeri*. *Journal of Hazardous Materials*. 30 (2014) 133-141.

Costa S.P.F., Pinto P.C.A.G., Lapa, R.A.S., Saraiva, M.L.M.F.S. Toxicity assessment of ionic liquids with *Vibrio fischeri*: An alternative fully automated methodology. *Journal of Hazardous Materials*. 2 (2015) 136 – 142.

Costa, S.P.F., Azevedo, A.M.O., Pinto, P.C.A.G., Saraiva, M.L.M.F.S. Environmental Impact of Ionic Liquids: Recent Advances in (Eco)toxicology and (Bio)degradability. *Chemistry Europe*. 10 (2017) 2321 – 2347.

Couling, D.J., Eike, D.M., Brennecke, J.F., Maginn, E.J. Quantitative structure–property modelling of ionic liquid aquatic toxicity: Insight into structural features that determine toxicity for *Daphnia magna* and *Vibrio fischeri*. Book of Abstracts, First International Congress on Ionic Liquids (COIL), Salzburg. (2005).

Couling, D.J., Bernot, R.J., Docherty, K.M., Dixon, J.K., Maginn, E.J. Assessing the factors responsible for ionic liquid toxicity to aquatic organisms via quantitative structure–property relationship modelling. *Green Chemistry*. 8 (2006) 82 – 90.

Cronin, M.T.D., Schultz, T.W. Validation of *Vibrio fischeri* acute toxicity data: Mechanism of action-based QSARS for non-polar narcotics and polar narcotic phenols. *Science Total Environment*. 19 (1997) 75–88.

Cronin, M.T.D., Schultz, T.W. Structure–toxicity relationships for three mechanisms of action of toxicity to *Vibrio fischeri*. *Ecotoxicology and Environmental Safety*. 39 (1998) 65–69.

Deneer, J.W., Van Leeuwen, C.J., Seinen, W., Maas-Diepeveen, J.L., Hermens, J.L.M. QSAR study of the toxicity of nitrobenzene derivatives towards *Daphnia magna*, *Chlorella pyrenoidosa* and *Photobacterium phosphoreum*. *Aquatic Toxicology*. 15 (1989) 83–98.

De, P., Kar, S., Ambure, P., Roy, K. Prediction reliability of QSAR models: an overview of various validation tools. *Archives of Toxicology*. 96 (2022) 1279–1295.

Delgado-Mellado, N., Ayuso, M., Villar-Chavero, M.M., García, J., Rodríguez, F. Ecotoxicity evaluation towards *Vibrio fischeri* of imidazolium- and pyridinium-based ionic liquids for their use in separation processes. *SN Applied Sciences*. 1 (2019).

de los Ríos, A.P., Hernández-Fernández, F. J., Martínez, F.A., Rubio, M., Villora G. The effect of ionic liquid media on activity, selectivity and stability of *Candida antarctica* lipase B in transesterification reactions. *Biocatalysis and Biotransformation*. 25 (2007) 151-156.

de los Ríos, A.P., Hernández-Fernández, F. J., Rubio, M., Demetrio Gómez, Vllora G. Stabilization of native penicillin *G acylase* by ionic liquids. *Journal of Chemical Technology & Biotechnology*. 82 (2007) 190-195.

de los Rios, A.P., Hernández-Fernández, F.J., Tomás-Alonso, F., Rubio, M., Gomez, D., Vllora, G. On the importance of the nature of the ionic liquids in the selective simultaneous separation of the substrates and products of a transesterification reaction through supported ionic liquid membranes. *Journal of membrane science*. 307 (2008) 233-238.

de los Ríos, A.P., Hernández-Fernández, F.J., Rubio, M., Tomás-Alonso, P., Gómez D., Vllora, G. Prediction of the selectivity in the recovery of transesterification reaction products using supported liquid membranes based on ionic liquids. *Journal of Membrane Science*. 307 (2008) 225-232.

de los Ríos, A.P., Hernández-Fernández, F. J., Zapata Henríquez, P.A., Missoun, F., Hernández-Fernández, J., Ortiz-Martínez, V., Salar-García, M. J., Lozano Blanco, L. J., Godínez, C. Keys for bioethanol production processes by fermentation and ionic liquid extraction. *ACS Sustainable Chemistry and Engineering*. 5 (2008) 6986-6993.

de los Rios, A.P., Hernández-Fernández, F.J., Tomás-Alonso, F., Gómez, D., Vllora, G. Synthesis of flavour esters using free *Candida antarctica* lipase B in ionic liquids. *Flavour and fragrance Journal*. 23 (2008) 319-322.

de los Ríos, A.P., Hernández-Fernández, F.J., Presa, H., Gómez, D. Vllora, G. Tailoring supported ionic liquid membranes for the selective separation of transesterification reaction compounds. *Journal of Membrane Science*. 328 (2009) 81-85.

de los Ríos, A. P., Hernandez-Fernandez, F.J., Lozano, L.J, Sanchez, S., Moreno, JI., Godínez, C. Removal of metal ions from aqueous solutions by extraction with ionic liquids. *Journal of Chemical & Engineering Data*. 55 (2010) 605-608.

de los Ríos, A. P., Hernandez-Fernandez, F.J., Alguacil, F.J., Lozano, L.J, Ginestá, A., García-Díaz, I., Sánchez-Segado, S., López, F.A., Godínez, C. On the use of imidazolium and ammonium-based ionic liquids as green solvents for the selective recovery of Zn (II), Cd (II), Cu (II) and Fe (III) from hydrochloride aqueous solution. *Separation and Purification Technology*. 97 (2012) 150-157.

de los Ríos, A. P., Hernandez-Fernandez, F.J., Lozano, L.J., Sánchez-Segado, S., Ginestá-Anzola, A., Godínez, C., Tomás-Alonso, F., Quesada-Medina, J. On the selective separation of metal ions from hydrochloride aqueous solution by pertraction through supported ionic liquid membranes. *Journal of membrane science*. 444 (2013) 469-481.

de los Rios, A.P., Hernández-Fernández, F.J., Zapata Henríquez, P.A., Missoun, F., Hernandez-Fernandez, J., Ortiz-Martínez, V., Salar-García, M.J., Lozano Blanco, L.J., Godínez, C. Keys for bioethanol production processes by fermentation and ionic liquid extraction. *ACS Sustainable Chemistry & Engineerin*. 5 (2017) 6986-6993.

Docherty, K.M., Kulpa, Jr. C.F. Toxicity and antimicrobial activity of imidazolium and pyridinium ionic liquids. *Green Chemistry*. 7 (2005).185 – 189.

Earle, M.J., McCormac, P.B, Seddon, K.R. The first high yield green route to a pharmaceutical in a room temperature ionic liquid. *Green Chemistry*. 2 (2000) 261-262.

ECOSAR (Ecological Structure Activity Relationships) Program, 2000, U.S. Environmental Protection Agency. Available at [/http://www.epa.gov/oppt/newchems/tools/21ecosar.htm](http://www.epa.gov/oppt/newchems/tools/21ecosar.htm)S.

Ellman, G.L., Courtney, D. K., Andres, V., Featherstone, R. M. A new and rapid colorimetric determination of acetylcholinesterase activity. *Biochemical Pharmacology*. 7 (1961) 88–95.

Escudero, A., de Los Ríos, A.P, Godínez, C., Tomás, F., Hernández-Fernández, F.J. Immobilization in Ionogel: A New Way to Improve the Activity and Stability of *Candida antarctica* Lipase B. *Molecules*. 25 (2020) 3233.

Errazquin, D., Mohamadou, A., Dupont, L., De Gaetano, Y., García, C.B., Lomba, L., Giner, B. Ecotoxicity interspecies study of ionic liquids based on phosphonium and ammonium cations. *Environmental Science and Pollution Research*. 28 (2021) 65374 – 65384.

Fan, H., Liu, H., Dong, Y., Chen, C., Wang, Z., Guo, J., Du, S. Growth inhibition and oxidative stress caused by four ionic liquids in *Scenedesmus obliquus*: Role of cations and anions. *Science of the Total Environment*. 651 (2019) 570 – 579.

Farré, M.L., García, M.-J., Tirapu, L., Ginebreda, A., Barceló, D. Wastewater toxicity screening of non-ionic surfactants by Toxalert® and Microtox® bioluminescence inhibition assays. *Analytica Chimica Acta*. 427 (2001) 181–189.

Fatemi, M.H., Izadiyan, P. Cytotoxicity estimation of ionic liquids based on their effective structural features. *Chemosphere*. 84 (2011) 553 – 563.

Fishers Scientific. Recuperado el 25 de enero de www.fishersci.es.

Frade, R.F.M., Rosatella, A.A., Marques, C.S., Branco, L.C., Kulkarni, P.S., Mateus, N.M.M., Afonso, C.A.M., Duarte, C.M.M. Toxicological evaluation on human colon carcinoma cell line (Caco-2) of ionic liquids based on imidazolium, guanidinium, ammonium, phosphonium, pyridinium and pyrrolidinium cations. *Green Chemistry*. 11 (2009) 1660-1665.

Fuller, J., Carlin, R.T., DeLong, H.C., Haworth, D. Structure of 1-ethyl-3-methylimidazolium hexafluorophosphate: Model or Room Temperature Molten Salts. *Journal of the Chemical Society, Chemical Communications*. (1994) 299-300.

- Galai, S., de los Ríos, A.P., Hernández-Fernández, F.J., Kacem, S. H., Tomas-Alonso F. Over-activity and stability of laccase using ionic liquids: screening and application in dye decolorization. *RSC Advances*. 5 (2015) 16173-16189.
- García, M.T., Ribosa, I., Guindulain, T., Sánchez-Leal, J., Vives-Rego, J. Fate and effect of monoalkyl quaternary ammonium surfactants in the aquatic environment. *Environmental Pollution*. 111 (2001) 169 – 175.
- García, M.T., Gathergood, N., Scammells, P.J. Biodegradable ionic liquids Part II. Effect of the anion and toxicology. *Green Chemistry*. 7 (2005) 9 – 14.
- García Lorenzo, M.L. Bioensayo de toxicidad por Microtox® en sedimentos mineros estabilizados con CaCO₃. Proyecto Fin de Carrera. Universidad de Murcia, 2004.
- García-Lorenzo, A., Tojo, E., Tojo, J., Teijeira, M., Rodríguez-Berrocal, F.J., González, M.P., Martínez-Zorzano, V.S. Cytotoxicity of selected imidazolium-derived ionic liquids in the human Caco-2 cell line. Sub-structural toxicological interpretation through a QSAR study. *Green Chemistry*. 10 (2008) 508 – 51.
- El-Harbawi, M., Uemura, Y., Gonfa, G., Bustama, M.A., Lévêque, J.-M. Thermophysical properties and acute toxicity towards green algae and *Vibrio fischeri* of amino acid-based ionic liquids. *Journal of Molecular Liquids*. 212 (2015) 352–359.
- Gathergood, N., Garcia, M.T., Scammells, P.J. Biodegradable ionic liquids. Part I. Concept, preliminary targets and evaluation. *Green Chemistry*. 6 (2004) 166-175.
- Gathergood, N., Scammells, P.J., Garcia, M.T. Biodegradable ionic liquids. Part III. The first readily biodegradable ionic liquids. *Green Chemistry*. 8 (2006) 156-160.
- Giner, B., Lafuente, C., Lapeña, D., Errazquin, D., Lomba, L. QSAR study for predicting the ecotoxicity of NADES towards *Aliivibrio fischeri*. Exploring the use of mixing rules. *Ecotoxicology and Environmental Safety*. 191 (2020).
- Geladi, P., Kowalski, B. Partial Least-Squares Regression: A Tutorial. *Analytica Chimica Acta*. 185 (1986) 1-17.
- Gonçalves, A.R.P., Paredes, X., Cristino, A.F., Santos, F.J.V., Queirós, C.S.G.P. Ionic liquids—a review of their toxicity to living organisms. *International Journal of Molecular Sciences*. 22 (2021).
- Gordon, C. M. New development in catalysis using ionic liquids. *Applied Catalysis A: General*. 222 (2001) 101-107.
- Gundolf, T., Weyhing-Zerrer, N., Sommer, J., Kalb, R., Schoder, D., Rossmannith, P., Mester, P. Biological Impact of Ionic Liquids Based on Sustainable Fatty Acid Anions Examined with a Tripartite Test System. *ACS Sustainable Chemistry and Engineering*. 7 (2019) 15865 – 15873.

Handy, S.T., Okello, M., Dickenson, G. Solvents from bio-renewable sources: ionic liquids based on fructose. *Organic Letters*. 5 (2003) 2513-2515.

Hermens, J., Busser, F., Leeuwangh, P., Musch, A. Quantitative structure–activity relationships and mixture toxicity of organic chemicals in *Photobacterium phosphoreum*: The Microtox test. *Ecotoxicology and Environmental Safety*. 9 (1985) 17–25.

Hernández-Fernández, F.J, de los Ríos, A.P., Rubio, M., Gómez, D., Villora, G. Enhancement of activity and selectivity in lipase-catalyzed transesterification in ionic liquids by the use of additives. *Journal of Chemical Technology and Biotechnology*. 82 (2007) 882-887.

Hernández, F.J., de los Ríos, A.P., Rubio, M., Tomás-Alonso, F., Gómez, D., Villora, G. A novel application of supported liquid membranes based on ionic liquids to the selective simultaneous separation of the substrates and products of a transesterification reaction. *Journal of Membrane Science*. 293 (2007) 73-80.

Hernández-Fernández, F.J., de los Ríos, A.P., Gómez, D., Rubio, M., Tomás-Alonso, F., Villora, G. Ternary liquid–liquid equilibria for mixtures of an ionic liquid+ n-hexane+ an organic compound involved in the kinetic resolution of rac-1-phenyl ethanol (rac-1-phenyl ethanol. *Fluid Phase Equilibria*. 263 (2008) 190-198.

Hernández-Fernández, F.J., de los Ríos, A.P., Tomás Alonso, F., Gómez, D., Rubio, M., Villora, G. On the development of an integrated membrane process with ionic liquids for the kinetic resolution of rac-2-pentanol. *Journal of Membrane Science*. 314 (2008) 238-246.

Hernández-Fernández, F.J., de los Ríos, A.P., Hernández-Fernández, J., Villora Cano, G. Los líquidos iónicos en la industria química (I): propiedades y aplicaciones. *Ingeniería Química*. 460 (2008) 194-197.

Hernández-Fernández, F.J., de los Ríos, A.P., Hernández-Fernández, J., Villora Cano, G. Los líquidos iónicos en la industria química (y II): ¿Pueden sustituir a los disolventes orgánicos convencionales?. *Ingeniería química*. 461 (2008) 132-135.

Hernández-Fernández, F.J., de los Ríos, A.P., Tomás-Alonso, F., Palacios, J.M., Villora, G. Preparation of supported ionic liquid membranes: Influence of the ionic liquid immobilization method on their operational stability. *Journal of Membrane Science*. 341 (2009) 172-177.

Hernández-Fernández, F.J., de los Ríos, A.P., Tomás Alonso, F., Gómez, D., Villora, G. Improvement in the separation efficiency of transesterification reaction compounds by the use of supported ionic liquid membranes based on the dicyanamide anion. *Desalination*. 244 (2009) 122-129.

Hernández-Fernández, F.J., de Los Ríos, A.P., Gómez, D., Rubio, M., Villora, G. Selective extraction of organic compounds from transesterification reaction mixtures by using ionic liquids. *AIChE journal*. 56 (2010) 1213-1217.

Hernández-Fernández, F.J., de los Ríos, A.P., Tomás Alonso, F., Palacios, J.M., Villora, G.

Understanding the influence of the ionic liquid composition and the surrounding phase nature on the stability of supported ionic liquid membranes. *AIChE journal*. 58 (2012) 583-590.

Hernández-Fernández, F.J., de los Ríos, A.P., Mateo-Ramírez, F., Godínez, C., Lozano-Blanco, L.J., Moreno, J.I., Tomás-Alonso, F. New application of supported ionic liquids membranes as proton exchange membranes in microbial fuel cell for waste water treatment. *Chemical Engineering Journal*. 279 (2015) 115-119.

Hernández-Fernández, F.J., Bayo, J., Pérez de los Ríos, A., Vicente, M.A., Bernal, F.J., Quesada-Medina, J. Discovering less toxic ionic liquids by using the Microtox® toxicity test. *Ecotoxicology and Environmental Safety*. 116 (2015) 29 – 33.

Hernández-Fernández, F.J., de los Ríos, A.P., Mateo-Ramírez, F., Juárez, M.D., Lozano-Blanco, L.J., Godínez, C. New application of polymer inclusion membrane based on ionic liquids as proton exchange membrane in microbial fuel cell. *Separation and Purification Technology*. 160 (2016) 51-58.

Hernández-Fernández, F.J., de Los Ríos, A.P., Licence, P., Stephens, G. Exploring ionic based on pyrrolidinium and imidazolium cations with low toxicity towards *Escherichia coli* for designing sustainable bioprocesses. *Journal of Biotechnology*. 360 (2022) 192-197.

Huang, C.-P., Wang, Y.-J., Chen, C.-Y. Toxicity and quantitative structure-activity relationships of nitriles based on *Pseudokirchneriella subcapitata*. *Ecotoxicology and Environmental Safety*. 67 (2007). 439 – 446.

Holbrey, J.D., Seddon, K.R. The phase behaviour of 1-alkyl-3-methylimidazolium tetrafluoroborates; ionic liquids and ionic liquid crystals. *Journal of the Chemical Society, Dalton Transactions*. (1999) 2133 -2139.

Holbrey, J. D., Seddon, K. R., Wareing, R. A simple colorimetric method for the quality control of 1-alkyl-3-methylimidazolium ionic liquid precursors. *Green Chemistry*. 3 (2001) 33–36.

Hoskuldsson, A. PLS Regression Methods. *Journal of Chemometrics*. 2 (1988) 211-228.

Hossain, M. I., Samir, B.B., El-Harbawi, M., Masri, A.N., Abdul Mutali, M.I., Hefter, G., Yin C.-Y. Development of a novel mathematical model using a group contribution method for prediction of ionic liquid toxicities. *Chemosphere*. 85 (2011) 990 – 994.

Huddleston, J. G., Visser, A. E., Reichert, W. M., Willauer, H. D., Broker, G. A., Rogers, R. D. *Green Chem.*, (2001) 156 -164.

Huddleston, J.G., Visser, A.E., Reichert, W.M., Willauer, H.D., Broker, G.A., Rogers, R.D. Characterization and Comparison of Hydrophilic and Hydrophobic Room Temperature Ionic Liquids Incorporating the Imidazolium Cation. *Green Chemistry*. 3 (2013) 156-164.

Iolitec. Recuperado el 25 de enero de www.iolitec.com.

Irabien, A., Garea, A., Luis, P. Hybrid Molecular QSAR Model for Toxicity Estimation: Application to Ionic Liquids. *Computer Aided Chemical Engineering*. 26 (2009) 63 – 67.

Alvarez-Guerra, M., Irabien, A. Design of ionic liquids: an ecotoxicity (*Vibrio fischeri*) discrimination. *Green Chemistry*. 13 (2011) 1507-1516.

Ishiyama, M., Tominaga, H., Shiga, M., Sasamoto, K., Ohkura, Y., Ueno, K., Watanabe, M. Novel cell proliferation and cytotoxicity assays using a tetrazolium salt that produces a water-soluble formazan dye, *In Vitro Toxicol.* 8 (1995) 187–190.

Ito, Y., Nohira, T. Non-conventional electrolytes for electrochemical applications. *Electrochimica acta*. 45 (2000) 2611–2622.

Jaitely, V., Karatas, A., Florence, A.T. Water-immiscible room temperature ionic liquids (RTILs) as drug reservoirs for controlled release. *International Journal of Pharmaceutics*. 354 (2008) 168-173.

Jafari, M., Keshavarz, M.H., Salek, H. A simple method for assessing chemical toxicity of ionic liquids on *Vibrio fischeri* through the structure of cations with specific anions. *Ecotoxicology and Environmental Safety*. 182 (2019).

Jeremias, G., Jesus, F., Ventura, S.P.M., Gonçalves, F.J.M., Asselman, J., Pereira, J.L. New insights on the effects of ionic liquid structural changes at the gene expression level: Molecular mechanisms of toxicity in *Daphnia magna*. *Journal of Hazardous Materials*. 409 (2021).

Jesus, F., Passos, H., Ferreira, A.M., Kuroda, K., Pereira, J.L., Gonçalves, F.J.M., Coutinho J.A.P., Ventura, S.P.M. Zwitterionic compounds are less ecotoxic than their analogous ionic liquids. *Green Chemistry*. 23 (2021) 3683 – 3692.

Jork, C., Seiler, M., Beste, Y.-A., Arlt, W. Purification of ethyl tert-butyl ether from its mixtures with ethanol by using an ionic liquid, *J. Chem. Eng. Data*, 49 (2004) 852–857.

Jork, C., Kristen, C., Pieraccini, D., Stark, A., Chiappe, C., Beste, Y.A., Arlt, W. Activity coefficients at infinite dilution measurements for organic solutes in the ionic liquid trihexyltetradecylphosphonium-bis-(2,4,4-trimethylpentyl)-phosphinate using g.l.c. at T = (303.15, 308.15, 313.15, and 318.15) K. *Journal of Chemical Thermodynamics*. 37 (2005) 537–558.

Kacem, S. H., Galai, S., Hernández-Fernández, F.J., de los Ríos, A.P., Smaali, S., Quesada, J. Bioreactor membranes for laccase immobilization optimized by ionic

- liquids and cross-linking agents. *Applied biochemistry and biotechnology*. 190 (2020) 1-17.
- Kaiser Klaus, L.E., Palabrica Virginia, S. Photobacterium phosphoreum toxicity data index. *Water pollution research journal of Canada*. 26 (1991) 361 – 431.
- Kang, X., Chen, Z., Zhao, Y. Assessing the ecotoxicity of ionic liquids on *Vibrio fischeri* using electrostatic potential descriptors. *Journal of Hazardous Materials*. 397 (2020).
- Khan, M.I., Mubashir, M., Zaini, D., Mahnashi, M.H., Alyami, B.A., Alqarni, A.O., Show, P.L. Cumulative impact assessment of hazardous ionic liquids towards aquatic species using risk assessment methods. *Journal of Hazardous Materials*. 415 (2021).
- Kebaili, H., Pérez de los Ríos, A., Salar García, M.J., Ortiz-Martínez, V.M., Kameche, M., Hernández-Fernández, J., Hernández-Fernández, F.J. Evaluating the Toxicity of Ionic Liquids on *Shewanella sp.* for Designing Sustainable Bioprocesses. *Frontiers of Materials*. 7 (2020).
- Koel, M. Physical and chemical properties of ionic liquids based on the dialkylimidazolium cation. *Proceedings of Estonian Academy of Sciences Chemistry*. 49 (2000) 145-155.
- Koutinas, M., Vasquez, M.I., Nicolaou, E., Pashali, P., Kyriakou, E., Loizou, E., Papadaki, A., Koutinas, A.A., Vyrides, I. Biodegradation and toxicity of emerging contaminants: Isolation of an exopolysaccharide-producing *Sphingomonas sp.* for ionic liquids bioremediation. *Journal of Hazardous Materials*. 365 (2019) 88 – 96.
- Kowalska, D., Maculewicz, J., Stepnowski, P., Dołzonek, J. Ionic liquids as environmental hazards – Crucial data in view of future PBT and PMT assessment. *Journal of Hazardous Materials*. 403 (2021).
- Kusumahastuti, D.K.A., Sihtmäe, M., Kapitanov, I.V., Karpichev, Y., Gathergood, N., Kahru, A. Toxicity profiling of 24 L-phenylalanine derived ionic liquids based on pyridinium, imidazolium and cholinium cations and varying alkyl chains using rapid screening *Vibrio fischeri* bioassay. *Ecotoxicology and Environmental Safety*. 172 (2019) 556 – 565.
- Kusumahastuti, D.K.A., Sihtmäe, M., Aruoja, V., Gathergood, N., Kahru, A. Ecotoxicity profiling of a library of 24 L-phenylalanine derived surface-active ionic liquids (SAILs). *Sustainable Chemistry and Pharmacy*. 19 (2021).
- Lan, T., Yan, X., Yan, F., Xia, S., Jia, Q., Wang, Q. Norm index in QSTR work for predicting toxicity of ionic liquids on *Vibrio fischeri*. *Ecotoxicology and Environmental Safety*. 205 (2020).
- Lapeña, D., Errazquin, D., Lomba, L., Lafuente, C., Giner, B. Ecotoxicity and biodegradability of pure and aqueous mixtures of deep eutectic solvents: glyceline, ethaline, and reline. *Environmental Science and Pollution Research*. 28 (2021). 8812 – 8821.

Lee, S.Y. Vicente, F.A., Silva, F.A., Sintra, T. E., Taha, M., Khoiroh, I., Coutinho, J.A.P. Show, P.L., Ventura, S.P.M. Evaluating Self-buffering Ionic Liquids for Biotechnological Applications. *ACS Sustainable Chemistry and Engineering*. 3 (2015) 3420–3428.

Levac, D., Colquhoun, H., O'Brien, K.K. Scoping studies: advancing the methodology. *Implementation Science*. 5 (2010).

D.A. Lide, CRC Handbook of Chemistry and Physics, 85th edn. CRC Press, Cleveland, OH, 2004.

Lin J.W., Chao Y.F., Weng S.F. Nucleotide sequence of the luxC gene encoding fatty acid reductase of the lux operon from *Photobacterium leiognathi*. *Biochemical and biophysical research communications*. 26 (1993) 314-318.

Liu, W., Ye, C., Gong, Q., Wang, H., Wang, P. Tribological performance of room-temperature ionic liquids as lubricant. *Tribology Letters*. 13 (2002) 81–85.

Liu, X., Wang, B., Huang, Z., Han, S., Wang, L. Acute toxicity and quantitative structure–activity relationships of a-branched phenylsulfonyl acetates to *Daphnia magna*. *Chemosphere*. 50 (2003) 403–408.

Liu, S., Gonzalez, M., Kong, C., Weir, S., Socha, A.M. Synthesis, antibiotic structure–activity relationships, and cellulose dissolution studies of new room-temperature ionic liquids derived from lignin. *Biotechnology for Biofuels*. 14 (2021).

Lorber, A., Wangen, L., Kowalski, B. A Theoretical Foundation for the PLS Algorithm. *Journal of Chemometrics*. 1 (1987) 19-31.

Lomba, L., Ribate, M.P., Zaragoza, E., Concha, J., Garralaga, M.P., Errazquin, D., García, C.B., Giner, B. (2021). Deep eutectic solvents: Are they safe?. *Applied Sciences*. 11 (2021).

Lotfi, S., Ahmadi, S., Zohrabi, P. QSAR modeling of toxicities of ionic liquids toward *Staphylococcus aureus* using SMILES and graph invariants. *Structural Chemistry*. 31 (2020) 2257 – 2270.

Lu, Q., Wang, H., Ye, C., Liu, W., Xue, Q. Room temperature ionic liquid 1-ethyl-3-hexylimidazolium-bis(trifluoromethylsulfonyl)-imide as lubricant for steel–steel contact. *Tribology International*. 37 (2004) 547–552.

Luo, Y.-R., Li, X.-Y., Chen, X.-X., Zhang, B.-J., Sun, Z.-J., Wang, J.-J. The developmental toxicity of 1-methyl-3-octylimidazolium bromide on *Daphnia magna*. *Environmental Toxicology*, 23 (2008) 736 – 744.

Luis, P., Ortiz, I., Aldaco, R., Irabien, A. A novel group contribution method in the development of a QSAR for predicting the toxicity (*Vibrio fischeri* EC50) of ionic liquids. *Ecotoxicology and Environmental Safety*. 67 (2007) 423 – 429.

- Luis, P., Garea, A., Irabien, A. Quantitative structure-activity relationships (QSARs) to estimate ionic liquids ecotoxicity EC50 (*Vibrio fischeri*). *Journal of Molecular Liquids*. 152 (2010) 28 – 33.
- Mano, B., Jesus, F., Gonçalves, F.J.M., Ventura, S.P.M., Pereira, J.L. Applicability of heuristic rules defining structure-ecotoxicity relationships of ionic liquids: An integrative assessment using species sensitivity distributions (SSD). *Green Chemistry*. 22 (2020) 6176 – 6186.
- Matzke, M., Stolte, S., Thiele, K., Juffernholz, T., Arning, J., Ranke, J., Welz-Biermann, U., Jastorff, B. The influence of anion species on the toxicity of 1-alkyl-3-methylimidazolium ionic liquids observed in an (Eco)toxicological test battery. *Green Chemistry*. 9 (2007) 1198 – 1207.
- Minitab 16 para Windows® (2018). ISBN 978-0925636-54-6, 146 pp. Available at https://www.academia.edu/7860085/Manual_MINITAB_15.
- Mena, I.F., Diaz, E., Palomar, J., Rodriguez, J.J., Mohedano, A.F. Cation and anion effect on the biodegradability and toxicity of imidazolium- and choline-based ionic liquids. *Chemosphere*. 240 (2020).
- Merck. Recuperado el 25 de enero de 2023 de www.merck.com.
- Missoun, F., de los Ríos, A.P., Ortiz-Martínez, V., Salar-García, M.J., Hernández-Fernández, J., Hernández-Fernández, F.J. Discovering Low Toxicity Ionic Liquids for *Saccharomyces cerevisiae* by Using the Agar Well Diffusion Test. *Processes*. 8 (2020).
- Montalbán, M.G., Hidalgo, J.M., Collado-González, M., Díaz Baños, F.G., Villora, G. Assessing chemical toxicity of ionic liquids on *Vibrio fischeri*: Correlation with structure and composition. *Chemosphere*. 155 (2016) 405 – 414.
- Montalbán, M.G., Villora, G., Licence, P. Ecotoxicity assessment of dicationic versus monocationic ionic liquids as a more environmentally friendly alternative. *Ecotoxicology and Environmental Safety*. 150 (2018) 129 – 135.
- Muldoon, M. J., Gordon, C. M., Dunkin, I. R. Investigations of solvent-solute interactions in room temperature ionic liquids using solvatochromic dyes, *Journal of the Chemical Society Perkin Transactions 2*. 2 (2001) 433 –435.
- Muratov, E.N., Bajorath, J., Sheridan, R.P., Tetko, I.V., Filimonov, D., Poroikov, V., Oprea, T.I., Baskin, I. I., Varnek, A., Roitberg, A., Isayev, O., Curtalolo, S., Fourches, D., Cohen, Y., Aspuru-Guzik, A., Winkler, D.A., Agrafiotis, D., Cherkasov, A., Tropsha, A. QSAR without borders. *Chemical Society Reviews*. 49 (2020) 3525-3564.
- Mossman, T. Rapid colorimetric assay for cellular growth and survival: application to proliferation and cytotoxicity assays. *Journal of Immunological Methods*. 65 (1983) 55-63.
- Nałęcz-Jawecki, G., Grabińska-Sota, E., Narkiewicz, P. (2003). The toxicity of cationic surfactants in four bioassays. *Ecotoxicology and Environmental Safety*. 54 (2003) 87 – 91.

Ngo, H. L., LeCompte, K., Hargens, L., McEwan, A. B. Properties of imidazolium ionic liquids. *Thermochim. Acta.* 97 (2000) 357-358.

Nockemann, P., Thijs, B., Driesen, K., Janssen, C.R., Van Hecke, K., Van Meervelt, L., Kossmann, S., Kirchner, B., Binnemans, K. Choline saccharinate and choline acesulfamate: Ionic liquids with low toxicities. *Journal of Physical Chemistry B.* 111 (2007) 5254 – 5263.

Onorati F., Mecozzi M. Effects of two diluents in the Microtox® toxicity bioassay with marine sediments. *Chemosphere.* 54 (2004) 679-687.

Oulego, P., Faes, J., González, R., Viesca, J.L., Blanco, D., Battez, A.H. Relationships between the physical properties and biodegradability and bacteria toxicity of fatty acid-based ionic liquids. *Journal of Molecular Liquids.* 292 (2019).

Ortiz-Martínez, V.M., Salar-García, M.J., Hernández-Fernández, F.J., de los Ríos, A.P. Development and characterization of a new embedded ionic liquid based membrane-cathode assembly for its application in single chamber microbial fuel cells. *Proceedings of the ICE-Energy.* 93 (2015) 1748-1757.

OCDE. <https://www.oecd.org/chemicalsafety/riskassessment/validationofqsarmodels.htm>. revisado en enero de 2023.

Papaiconomou, N., Estager, J., Traore, Y., Bauduin, P., Bas, C., Legeai, S., Viboud, S., Draye, M. Synthesis, physicochemical properties, and toxicity data of new hydrophobic ionic liquids containing dimethylpyridinium and trimethylpyridinium cations. *Journal of Chemical and Engineering Data.* 55 (2010) 1971 – 1979.

Parajó, J.J., Macário, I.P.E., De Gaetano, Y., Dupont, L., Salgado, J., Pereira, J.L., Gonçalves, F.J.M., Mohamadou, A., Ventura, S.P.M. Glycine-betaine-derived ionic liquids: Synthesis, characterization and ecotoxicological evaluation. *Ecotoxicology and Environmental Safety.* 184 (2019).

Parvez, S., Venkataraman, C., Mukherji, S. Toxicity assessment of organic pollutants: Reliability of bioluminescence inhibition assay and univariate QSAR models using freshly prepared *Vibrio fischeri*. *Toxicology in Vitro.* 22 (2008) 1806 – 1813.

Peng, D., Picchioni, F. Prediction of toxicity of Ionic Liquids based on GC-COSMO method. *Journal of Hazardous Materials.* 398 (2020).

Perales, E., García, C.B., Lomba, L., Aldea, L., García, J. I., Giner, B. Comparative ecotoxicology study of two neoteric solvents: Imidazolium ionic liquid vs. glycerol derivative. *Ecotoxicology and Environmental Safety.* 132 (2016) 429–434.

Pérez, S.A., Montalbán, M.G., Carissimi, G., Licence, P., Villora, G. In vitro cytotoxicity assessment of monocationic and dicationic pyridinium-based ionic liquids on HeLa, MCF-7, BGM and EA.hy926 cell lines. *Journal of Hazardous Materials.* 385 (2020).

- Peric, B., Sierra, J., Martí, E., Cruañas, R., Garau, M.A., Arning, J., Bottin-Weber, U., Stolte, S. (Eco)toxicity and biodegradability of selected protic and aprotic ionic liquids. *Journal of Hazardous Materials*. 261 (2013) 99 – 105.
- Pértega, S., Pita, S. Técnicas de regresión: Regresión Lineal Múltiple. *Cadernos de atención primaria*. 7 (2000) 173 – 176.
- Pham, T.P.T., Cho, C.-W., Min, J., Yun, Y.-S. Alkyl-chain length effects of imidazolium and pyridinium ionic liquids on photosynthetic response of *Pseudokirchneriella subcapitata*. *Journal of Bioscience and Bioengineering*. 105 (2008) 425 – 428.
- Pham, T.P.T., Cho, C.-W., Yun, Y.-S. Environmental fate and toxicity of ionic liquids: A review. *Water research*. 44 (2010) 352 – 372.
- Phillips, B.S., Zabinski, J.S. Ionic Liquid Lubrication Effects on Ceramics in a Water Environment. *Tribology Letters*. 17 (2004) 533–541.
- Pirkwieser, P., López-López, J.A., Schagerl, M., Kandioller, W., Keppler, B.K., Moreno, C., Jirsa, F. Heavy Metal Extraction under Environmentally Relevant Conditions Using 3-Hydroxy-2-Naphthoate- Based Ionic Liquids: Extraction Capabilities vs. Acute Algal Toxicity. *Applied Sciences*. 10 (2020).
- Platzer, S., Leyma, R., Wolske, S., Kandioller, W., Heid, E., Schröder, C., Schagerl, M., Krachler, R., Jirsa, Franz., Keppler, B. K. Thioglycolate-based task-specific ionic liquids: Metal extractionabilities vs acute algal toxicity. *Journal of Hazardous Materials*. 340 (2017) 113–119.
- Pretti, C., Chiappe, C., Pieraccini, D., Gregori, M., Abramo, F., Monni, G., Intorre, L. Acute toxicity of ionic liquids to the zebrafish (*Danio rerio*). *Green Chemistry*. 8 (2006) 238–240.
- Pretti, C., Chiappe, C., Baldetti, I., Brunini, S., Monni, G., Intorre, L. Acute toxicity of ionic liquids for three freshwater organisms: *Pseudokirchneriella subcapitata*, *Daphnia magna* and *Danio rerio*. *Ecotoxicology and Environmental Safety*. 72 (2009) 1170 – 1176.
- Pretti, C., Renzi, M., Ettore Focardi, S., Giovani, A., Monni, G., Melai, B., Rajamani, S., Chiappe, C. Acute toxicity and biodegradability of N-alkyl-N-methylmorpholinium and N-alkyl-DABCO based ionic liquids. *Ecotoxicology and Environmental Safety*. 74 (2011) 748 – 753.
- Qu, R., Liu, S.-S., Li, T., Liu, H.-L. Using an interpolation-based method (IDVeq) to predict the combined toxicities of hormetic ionic liquids. *Chemosphere*. 217 (2019) 669 – 679.
- Ranke, J., Mölter, K., Stock, F., Bottin-Weber, U., Poczobutt, J., Hoffmann, J., Ondruschka, B., Filser, J., Jastorff, B. Biological effects of imidazolium ionic liquids with varying chain lengths in acute *Vibrio fischeri* and WST-1 cell viability assays. *Ecotoxicology and Environmental Safety*. 58 (2004) 396 – 404.

Rantamäki, A.H., Chen, W., Hyväri, P., Helminen, J., Partl, G., King, A.W.T., Wiedmer, S.K. Interactions of Ionic Liquids and Spirocyclic Compounds with Liposome Model Membranes. A Steady-State Fluorescence Anisotropy Study. *Scientific Reports*. 9 (2019).

Rantamäki, A.H., Ruokonen, S.-K., Sklavounos, E., Kyllönen, L., King, A.W. T., Wiedmer, S.K. Impact of Surface-Active Guanidinium-, Tetramethylguanidinium-, and Cholinium-Based Ionic Liquids on *Vibrio Fischeri* Cells and Dipalmitoylphosphatidylcholine Liposomes. *Scientific Reports*. 7 (2017).

REACH, 2006. Regulation (EC) No 1907/2006 of the European Parliament and of the Council of 18 December 2006 Concerning the Registration, Evaluation, Authorisation and Restriction of Chemicals, Establishing a European Chemicals Agency, Amending Directive 1999/45/EC and Repealing Council Regulation (EEC) No 793/93 and Commission Regulation (EC) No 1488/94 as Well as Council Directive 76/769/EEC and Commission Directives 91/155/EEC, 93/67/EEC, 93/105/EC and 2000/21/EC. Volume 396. 2006. Recuperado: <http://data.europa.eu/eli/reg/2006/1907/2014-04-10> (accessed on 12 February 2021).

Rehman, A.U., Zaini, D.B., Lal, B. Predictive ecotoxicological modeling of ionic liquids using QSAR techniques: A mini review. *Process Safety Progress*. 41 (2022) 141-146.

Ribo, J.M., Kaiser, K.L.E. Effects of selected chemicals to photo-luminescent bacteria and their correlations with acute and sublethal effects on other organisms. *Chemosphere*. 12 (1983) 1421–1442.

Romero, A., Santos, A., Tojo, J., Rodríguez, A. Toxicity and biodegradability of imidazolium ionic liquids. *Journal of Hazardous Materials*. 151 (2008) 268 – 273.

Ropel, L., Belvèze, L.S., Aki, S.N.V.K., Stadtherr, M.A., Brennecke, J.F. Octanol–water partition coefficients of imidazolium-based ionic liquids. *Green Chemistry*. 7 (2005) 83-90.

Roy, K., Kar, S., Das, R.N., 2015a. Chapter 3 - Classical QSAR, in: Roy, K., Kar, S., Das, R.N. (Eds.), *Understanding the Basics of QSAR for Applications in Pharmaceutical Sciences and Risk Assessment*. Academic Press, Boston, pp. 81-102.

Roy, K., Kar, S., Das, R.N., 2015b. Chapter 7 - Validation of QSAR Models, in: Roy, K., Kar, S., Das, R.N. (Eds.), *Understanding the Basics of QSAR for Applications in Pharmaceutical Sciences and Risk Assessment*. Academic Press, Boston, pp. 231-289.

Ruiz, M.J., López-Jaramillo, L., Redondo, M.J., Font, G. Toxicity assessment of pesticides using the Microtox test: Application to environmental simples. *Bulletin of Environmental Contamination and Toxicology*. 59 (1997) 619 – 625.

Rücker, C., Rücker, G., Meringer, M. y-Randomization and its variants in QSPR/QSAR. *Journal of Chemical Information and Modeling*. 47 (2007) 2345–2357.

Sache. Recuperado el 25 de enero de www.sacheminc.com

Salar-García, M.J., Ortiz-Martínez, V.M., Baicha, Z., Hernández-Fernández, F.J., de los Ríos, A.P. Scaled-up continuous up-flow microbial fuel cell based on novel embedded ionic liquid-type membrane-cathode assembly. *Proceedings of the ICE -Energy*. 101 (2016) 113-120.

Samori, C., Pasteris, A., Galletti, P., Tagliavini, E. Acute toxicity of oxygenated and nonoxygenated imidazolium-based ionic liquids to *Daphnia magna* and *Vibrio fischeri*. *Environmental Toxicology and Chemistry*. 26 (2007) 2379 – 2382.

Samori, C., Malferrari, D., Valbonesi, P., Montecavalli, A., Moretti, F., Galletti, P., Sartor, G., Tagliavini, E., Fabbri, E., Pasteris, A. Introduction of oxygenated side chain into imidazolium ionic liquids: Evaluation of the effects at different biological organization levels. *Ecotoxicology and Environmental Safety*. 73 (2010) 1456 – 1464.

Santos, J.I., Gonçalves, A.M.M., Pereira, J. L., Figueiredo B.F.H.T. Silva, F.A., Coutinho, J.A.P., Ventura, S.P.M., Gonçalves, F. Environmental safety of cholinium-based ionic liquids: assessing structure–ecotoxicity relationships. *Green Chemistry*. 17 (2015) 4657–4668.

Shao, Y., Wang, J., Wang, J., Du, Z., Li, B., Zhu, L., Juhasz, A., Liu, X., Xu, Y., Li, W. Oxidative stress and genotoxic effects in earthworms induced by five imidazolium bromide ionic liquids with different alkyl chains. *Chemosphere*. 227 (2019) 570 – 579.

Schultz, T.W., Cronin, M.T.D., Netzeva, T.I. The present status of QSAR in toxicology. *Journal of Molecular Structure: THEOCHEM*. 622 (2003) 23–38.

Seddon, K.R., Stark, A., Torres, M.-J. Expanding the polarity range of ionic liquids. *Pure and Applied Chemistry*. 72 (2000) 2275 -2287.

Seiler, M., Jork, C., Kavarnou, A., Arlt, W., Hirsch, R. Citrus essential oil terpenless by extraction using 1-ethyl-3-methylimidazolium ethylsulfate ionic liquid: Effect of the temperatura. *AIChE Journal*. 50 (2004) 2439–2454.

Sheldon, R. Catalytic reactions in ionic liquids. *Chemical Communications*. 23 (2001) 2399-2407.

Siciliano, A., Russo, D., Spasiano, D., Marotta, R., Race, M., Fabbicino, M., Galdiero, E., Guida, M. Chronic toxicity of treated and untreated aqueous solutions containing imidazole-based ionic liquids and their oxydized by-products. *Ecotoxicology and Environmental Safety*. 180 (2019) 466 – 472.

Silva, F.A., Coutinho, J.A.P., Ventura, S.P.M. Aquatic Toxicology of Ionic Liquids (ILs). In: Zhang, S. (ed.), *Encyclopedia of Ionic Liquids*. (2019) 1-18.

Sintra, T.E., Luís, A., Rocha, S.N., Lobo Ferreira, A.I.M.C., Gonçalves, F., Santos, L.M.N.B.F., Neves, B.M., Freire, M.G., Ventura, S.P.M., Coutinho J.A.P. Enhancing the Antioxidant Characteristics of Phenolic Acids by Their Conversion into Cholinium Salts. *ACS Sustainable Chemistry and Engeering*. 3 (2015) 2558–2565.

Sintra, T.E., Nasirpour, M., Siopa, F., Rosatella, A.A., Gonçalves, F., Coutinho, J.A.P., Afonso, C.A.M., Ventura, S.P.M. Ecotoxicological evaluation of magnetic ionic liquids. *Ecotoxicology and Environmental Safety*. 143 (2017) 315–321.

Solvent Innovation. Recuperado el 25 de enero de www.solventlnnovati.guidechem.com.

Sprague, J.B. Measurement of pollutant toxicity to fish. I. Bioassay methods for acute toxicity. *Water Research*. 3 (1969) 793–821.

Schüürmann, G., Ebert, R-U., Chen, J., Wang, B., Kühne, R. External validation and prediction employing the predictive squared correlation coefficient—test set activity mean vs training set activity mean. *Journal of Chemical Information and Modeling*. 48 (2008) 2140–2145.

Stasiewicz, M., Mulkiwicz, E., Tomczak-Wandzel, R., Kumirska, J., Siedlecka, E.M., Goebowski, M., Gajdus, J., Czerwicka, M., Stepnowski, P. Assessing toxicity and biodegradation of novel, environmentally benign ionic liquids (1-alkoxymethyl-3-hydroxypyridinium chloride, saccharinate and acesulfamates) on cellular and molecular level. *Ecotoxicology and Environmental Safety*. 71 (2008) 157-165.

Stolte, S., Matzke, M., Arning, J., Bösch, A., Pitner, W.-R., Welz-Biermann, U., Jastorff, B., Ranke, J. Effects of different head groups and functionalised side chains on the aquatic toxicity of ionic liquids. *Green Chemistry*. 9 (2007) 1170 – 1179.

Suarez, P.A.Z., Dullius, J.E.L., Einloft, S., de Souza, R.F., Dupont, J. The use of new ionic liquids in two-phase catalytic hydrogenation reaction by rhodium complexes. *Polyhedron* 15 (1996) 1217–1219.

Taha, M., Silva, F.A., Quental, M.V., Ventura, S.P.M., Freire M.G., Coutinho J.A.P. Good's buffers as a basis for developing selfbuffering and biocompatible ionic liquids for biological research. *Green Chemistry*. 16 (2014) 3149–3159.

Taha, M., Almeida, M.R., Silva, F.A., Domingues, P., Ventura, S.P.M., Coutinho J.A.P., Freire, M.G. Novel biocompatible and self-buffering ionic liquids for biopharmaceutical applications. *Chemistry – A European Journal*. 21 (2015) 4781–4788.

Takahashi, S., Koura, N., Kohara, S., Saboungi, M.-L., Curtiss, L.A. Technological and scientific issues of room-temperature molten salts. *Plasmas & Ions*. 2 (1999) 91-105.

Tinkl M. (1999). *Chem. Rundschau* 2, 59.

Toral, A., de los Ríos, A.P., Hernández, F.J., Janssen, M.H.A., Schoevaart, R., van Rantwijk, F., Sheldon, R.A. Cross-linked *Candida antarctica* lipase B is active in denaturing ionic liquids. *Enzyme and Microbial Technology*. 40 (2007) 1095-1099.

Tropsha, A. Best Practices for QSAR Model Development, Validation, and Exploitation. *Molecular Informatics*. 29 (2010) 476-488.

- Trulove, P.C., Mantz, R.A. In: *Ionic Liquids in Synthesis*, eds. P. Wasserscheid and T. Welton, 103–126, Wiley-VCH Verlag, Weinheim (2003).
- Trush, M.M., Semenyuta, I.V., Hodyna, D., Ocheretniuk, A.D., Vdovenko, S.I., Rogalsky, S.P., Kalashnikova, L.E., Blagodatnyi, V., Kobzar, O.L., Metelytsia, L.O. Functionalized imidazolium-based ionic liquids: biological activity evaluation, toxicity screening, spectroscopic, and molecular docking studies. *Medicinal Chemistry Research*. 29 (2020) 2181 – 2191.
- U.S. Environmental Protection Agency. 1993. Methods for measuring the acute toxicity of effluents and receiving waters to freshwater and marine organisms. EPA 600/4-90/027F. Cincinnati, OH.
- Ventura, S.P.M., Gonçalves, A.M.M., Gonçalves, F., Coutinho, J.A.P. Assessing the toxicity on [C3mim][Tf2N] to aquatic organisms of different trophic levels. *Aquatic Toxicology*. 96 (2010) 290 – 297.
- Ventura, S.P.M., Gardas, R.L., Gonçalves, F., Coutinho, J.A. Ecotoxicological risk profile of ionic liquids: Octanol-water distribution coefficients and toxicological data. *Journal of Chemical Technology and Biotechnology*. 86 (2011) 957 – 963.
- Ventura, S.P.M., Marques, C.S., Rosatella, A.A., Afonso, C.A.M., Gonçalves, F., Coutinho, J.A.P. Toxicity assessment of various ionic liquid families towards *Vibrio fischeri* marine bacteria. *Ecotoxicology and Environmental Safety*. 76 (2012) 162 – 168.
- Ventura, S.P.M., Gonçalves, A.M.M., Sintra, T., Pereira, J.L., Gonçalves, F., Coutinho, J.A.P. Designing ionic liquids: The chemical structure role in the toxicity. *Ecotoxicology*. 22 (2013) 1 – 12.
- Ventura, S.P.M., Silva F., Gonçalves, A.M.M., Pereira J.L. Gonçalves, F., Coutinho, J.A.P. Ecotoxicity analysis of cholinium-based ionic liquids to *Vibrio fischeri* marine bacteria. *Ecotoxicology and Environmental Safety*. 102 (2014) 48–54.
- Verhaar, H.J.M., Mulder, W., Hermens, J.L.M., Rorije, E., Langenberg, J.H., Peijnenburg, W.J.G.M., Sabljic, A., Güsten, H. Overview of structure–activity relationships for environmental endpoints. Part 2: Description of selected models. Report of the EU-DG-XII. (1995).
- Viboud, S., Papaiconomou, N., Cortesi, A., Chatel, G., Draye, M., Fontvieille, D. Correlating the structure and composition of ionic liquids with their toxicity on *Vibrio fischeri*: A systematic study. *Journal of Hazardous Materials*. 215-216 (2012) 40 – 48.
- Vieira, N.S.M., Bastos, J.C., Rebelo, L.P.N., Matias, A., Araújo, J.M.M., Pereiro, A.B. Human cytotoxicity and octanol/water partition coefficients of fluorinated ionic liquids. *Chemosphere*. 216 (2019) 576 – 586.

Vieira, N.S.M., Stolte, S., Araújo, J.M.M., Rebelo, L.P.N., Pereira, A.B., Markiewicz, M. Acute Aquatic Toxicity and Biodegradability of Fluorinated Ionic Liquids. *ACS Sustainable Chemistry and Engineering*. 7 (2019) 3733 – 3741.

Viesca, J.L., Oulego, P., González, R., Guo, H., Battez, A.H., Iglesias P. Miscibility, corrosion and environmental properties of six hexanoate- and sulfonate-based protic ionic liquids. *Journal of Molecular Liquids*. 322 (2021).

Waffenschmidt H. (2000). Dissertation, RWTH Aachen, Germany

Walker, J.D., Jaworska, J., Comber, M.H.I., Schultz, T.W., Dearden, J.C. Guidelines for developing and using quantitative structure-activity relationships. *Environmental toxicology and chemistry*. 22 (2003) 1653-1665.

Wang, C., Wei, Z., Wang, L., Sun, P., Wang Z. Assessment of bromide based ionic liquid toxicity toward aquatic organisms and QSAR análisis. *Ecotoxicology and Environmental Safety*. 115 (2015) 112–118.

Warne, M.A., Osbor, D., Lindon, J.C., Nicholson, J.K. Quantitative structure–toxicity relationships for halogenated substituted- benzenes to *Vibrio fischeri*, using atom-based semi-empirical molecular-orbital descriptors. *Chemosphere*. 38 (1999) 3357–3382.

Wei, P., Pan, X., Chen, C.-Y., Li, H.-Y., Yan, X., Li, C., Chu, Y.-H., Yan, B. Emerging impacts of ionic liquids on eco-environmental safety and human health. *Chemical Society Reviews*. 50 (2021) 13609 – 13627.

Web of science. Recuperado el 27 de enero de 2023 de <https://webofscience.com>.

Wells, A.S., Coombe, V.T. On the freshwater ecotoxicity and biodegradation properties of some common ionic liquids. *Organic Process Research and Development*. 10 (2006) 794 – 798.

Welton T. Ionic liquids: a brief history. *Biophysical Reviews*. 10 (2018) 691–706.

Wilkes, J.S., Zaworotko, M.J. Air and water stable. 1-ethyl-3- methylimidazolium based ionic liquids. *Journal of The Chemical Society, Chemical Communications*. (1992) 965-967.

Wilkes, J.S. Properties of ionic liquid solvents for catalysis. *Journal of Molecular Catalysis A: Chemical*. 214 (2004) 11–17.

Wu Z., Zhu M., Kang Y., Lai-Han Leung E., Lei T., Shen C., Jiang D., Wang Z., Cao, D., Do T. H. We need different machine learning algorithms for QSAR modeling? A comprehensive assessment of 16 machine learning algorithms on 14 QSAR data sets. *Briefings in Bioinformatics*. 22 (2021) 1–17.

Yan F., Lan, T., Yan, X., Jia, Q., Wang Q. Norm index-based QSTR model to predict the eco-toxicity of ionic liquids towards Leukemia rat cell line. *Chemosphere*. 234 (2019) 116 -122.

- Ye, C., Liu, W., Chen, Y., Yu, L. Room-temperature ionic liquids: a novel versatile lubricant, *Chemical Communications*. 21 (2001) 2244–2245.
- Yu, M., Wang, S.-H., Luo, Y.-R., Han, Y.-W., Li, X.-Y., Zhang, B.-J., Wang, J.-J. Effects of the 1-alkyl-3-methylimidazolium bromide ionic liquids on the antioxidant defense system of *Daphnia magna*. *Ecotoxicology and Environmental Safety*. 72 (2009) 1798 – 1804.
- Yu, R.L., Hu, G.R., Zhao, Y.H. Comparative study of four QSAR models of aromatic compounds to aquatic organisms. *Journal of Environmental Sciences*. 14 (2002) 552–557.
- Yu, M., Liu, Wang, S.-H., Luo, Y.-R., Han Y.-W., Li X.-Y., Zhang, B.-J., Wang, J.-J. Effects Of the 1-Alkyl-3-Methylimidazolium bromide ionic liquids on the Antioxidant defense system of *Daphnia magna*. *Ecotoxicology And Environmental Safety*. 72 (2009) 1798–1804.
- Yu, M., Liu, C., Zhao, H., Yang, Y., Sun, J. The effects of 1-hexyl-3-methylimidazolium bromide on embryonic development and reproduction in *Daphnia magna*. *Ecotoxicology and Environmental Safety*. 190 (2020)
- Yuan, X., Lu, G., Zhao, Y. QSAR study for the toxicity of anilines and phenols to aquatic organisms. *Chemical Journal on Internet*. 3 (2001) 10–14.
- Zhao, Y.H., He, Y.B. Wang, L.S. Predicting toxicities of substituted aromatic hydrocarbons to fish by *Daphnia magna* or *Photobacterium phosphoreum*. *Toxicological and Environmental Chemistry*. 51 (1995) 191–195.
- Zhang, C., Zhang, S., Zhu, L., Wang, J., Wang J., Zhou, T. The acute toxic effects of 1-alkyl-3-methylimidazolium nitrate ionic liquids on *Chlorella vulgaris* and *Daphnia magna*. *Environmental Pollution*. 229 (2017) 887-895.
- Zawodzinski T.A., Osteryoung R.A. *Inorg. Chem.* 29 (1990) 2842-2847.
- Zawodzinski T.A., Osteryoung R.A. Oxide and hydroxide species formed on addition of water in ambient-temperature chloroaluminate melts: an oxygen-17 NMR study. *Inorganic Chemistry*. 29 (1990) 2842-2847.
- Wold, H. Soft Modeling by Latent Variables; the Nonlinear Iterative Partial Least Squares Approach. *Perspectives in Probability and Statistics, Papers in Honour of M.S. Bartlett*, ed. J. Gani, Academic Press. (1975).

ANEXO I. DATOS DE TOXICIDAD PARA V. FISHERI Y DESCRIPTORES DE LÍQUIDOS IÓNICOS

Abrev.	LC50 (µM)	Br	Cl	NTf ₂	BF ₄	CF ₃ SO ₃	N(CN) ₂	CH ₃ COO	CF ₃ COO	(C ₂ F ₅) ₃ P F ₃	Cap	I	SCN	FeCl ₄	PF ₆	HC OO	2OSO ₃	(2-OPhO) ₂ B	(2-SO ₂ PhCO) N	8OSO ₃	Al ₂ Cl ₇	B(CN) ₄	(C ₂ F ₅) ₂ PO ₂	(CF ₃) ₂ N	Ref.
[im][CH ₃ COO]	4,07	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Luis P, 2010, 15
[im][CH ₃ COO]	3,61	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Luis P, 2010, 15
[im][CF ₃ SO ₃]	3,81	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Luis, P, 2010,15
[im][cap]	2,29	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Luis, P, 2010, 15
[C ₁ im][CF ₃ COO]	3,57	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Luis, P, 2010, 15
[C ₁ im][CF ₃ COO]	4,07	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Luis, P, 2010, 15
[C ₁ im][CF ₃ SO ₃]	4,35	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Luis, P, 2010, 15
[C ₁ im][Cap]	2,13	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Luis, P, 2010, 15
[C ₁ im][HCOO]	2,83	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Luis, P, 2010, 15
[C ₁ im][Cl]	3,94	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Montalban, 2016,15
[C ₁ Cim][Cl]	4,31	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Montalban, 2016,15
[MOxa][1OSO ₃]	3,00	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Hernández 2015, 10
[C ₁ mim][1OSO ₃]	4,76	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Luis, 2007, 15
[C ₁ mim][NTf ₂]	3,80	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Sonia, 2012,15
[C ₁ mim][NTf ₂]	3,61	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Delgado, 2019
[C ₂ im][NTf ₂]	3,54	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Delgado, 2019
[C ₂ im][Cl]	4,16	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Montalban, 2016, 15
[C ₂ mim][2OSO ₃]	4,02	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	Romero, 2008, 15
[C ₂ mim][2OSO ₃]	4,10	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	Montalban, 2016, 15

ANEXO I. DATOS DE TOXICIDAD PARA V. FISHERI Y DESCRIPTORES DE LÍQUIDOS IÓNICOS

Abrev.	LC50 (µM)	Br	Cl	NTf ₂	BF ₄	CF ₃ SO ₃	N(CN) ₂	CH ₃ COO	CF ₃ COO	(C ₂ F ₅) ₃ PF ₃	Cap	I	SCN	FeCl ₄	PF ₆	HC OO	2OSO ₃	(2-OPhO) ₂ B	(2-SO ₂ PhCO)N	8OSO ₃	Al ₂ Cl ₇	B(CN) ₄	(C ₂ F ₅) ₂ PO ₂	(CF ₃) ₂ N	Ref.
[C ₂ mim][ClOSO ₃]	4,91	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Costa, 2015, 15
[C ₂ mim][Br]	4,27	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Wang, 2015, 15 min
[C ₂ mim][Cl]	4,55	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Luis P, 2007, 15
[C ₂ mim][Cl]	4,80	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Montalban, 2015, 15
[C ₂ mim][(2-OPhO) ₂ B]	2,98	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	Merck, 2010
[C ₂ mim][(C ₂ F ₅) ₂ PO ₂]	3,05	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	Merck, 2010
[C ₂ mim][B(CN) ₄]	3,59	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	Merck, 2010
[C ₂ mim][B(CN) ₄]	3,62	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	Viboud, 2012
[C ₂ mim][SCN]	4,57	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Delgado, 2019, 15
[C ₂ mim][SCN]	4,15	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Merck, 2010
[C ₂ mim][CF ₃ COO]	4,28	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Merck, 2010
[C ₂ mim][FeCl ₄]	1,51	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Irabien, 2011,15
[C ₂ mim][PF ₆]	3,92	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Costa, 2017
[C ₂ mim][PF ₆]	4,22	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Montalban, 2016
[C ₂ mim][(C ₂ F ₅) ₃ PF ₃]	1,36	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Viboud, 2012
[C ₂ mim][1COO]	4,23	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Costa, 2017
[C ₂ mim][1COO]	3,89	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Montalban, 2016, 15
[C ₂ mim][1COO]	4,17	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Costa, 2015, 15 VF
[C ₂ mim][BF ₄]	3,44	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Costa, 2017

ANEXO I. DATOS DE TOXICIDAD PARA V. FISHERI Y DESCRIPTORES DE LÍQUIDOS IÓNICOS

Abrev.	LC50 (μM)	Br	Cl	NTf ₂	BF ₄	CF ₃ SO ₃	N(CN) ₂	CH ₃ COO	CF ₃ COO	(C ₂ F ₅) ₃ PF ₃	Cap	I	SCN	FeCl ₄	PF ₆	HC OO	2OSO ₃	(2-OPhO) ₂ B	(2-SO ₂ PhCO)N	8OSO ₃	Al ₂ Cl ₇	B(CN) ₄	(C ₂ F ₅) ₂ PO ₂	(CF ₃) ₂ N	Ref.	
[C ₂ mim][CF ₃ SO ₃]	3,74	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Montalban, 2016, 15
[C ₂ mim][NTf ₂]	2,93	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Sonia, 2012, 15
[C ₂ mim][NTf ₂]	2,76	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Sonia, 2012, 15
[C ₂ mim][NTf ₂]	3,30	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Costa, 2017
[C ₂ mim][NTf ₂]	2,57	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Ventura, 2011, 15
[C ₂ mim][NTf ₂]	3,17	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Delgado, 2019, 15
[C ₂ mim][NTf ₂]	3,62	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Montalban, 2016, 15
[C ₂ mim][NTf ₂]	3,41	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Costa, 2015, 15
[C ₂ mim][N(CN) ₂]	4,49	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Delgado, 2019
[C ₂ mim][SO ₃ (CF ₂) ₃ CF ₃]	3,76	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Stolte, 2019, 30
[C ₂ mim][CO ₂ (CF ₂) ₃ CF ₃]	4,15	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Stolte, 2019, 30
[C ₂ -23mim][NTf ₂]	3,09	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Delgado, 2019, 15
[C ₂ -C ₃ mim][NTf ₂]	2,32	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Sonia, 2012, 15
[C ₂ mim][TCM]	4,24	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Delgado, 2019
[OHC ₂ mim][Gly]	4,76	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Ghanem 2015, 15 min.
[OHC ₂ mim][ala]	4,58	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Ghanem 2015, 15 min.
[OHC ₂ mim][ser]	4,66	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Ghanem 2015, 15 min.
[OHC ₂ mim][pro]	4,78	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Ghanem 2015, 15 min.

ANEXO I. DATOS DE TOXICIDAD PARA V. FISHERI Y DESCRIPTORES DE LÍQUIDOS IÓNICOS

Abrev.	LC50 (µM)	Br	Cl	NTf ₂	BF ₄	CF ₃ SO ₃	N(CN) ₂	CH ₃ COO	CF ₃ COO	(C ₂ F ₅) ₃ P F ₃	Cap	I	SCN	FeCl ₄	PF ₆	HC OO	2OSO ₃	(2-OPhO) ₂ B	(2-SO ₂ PhCO) N	8OSO ₃	Al ₂ Cl ₇	B(CN) ₄	(C ₂ F ₅) ₂ PO ₂	(CF ₃) ₂ N	Ref.	
[C ₃ mim][PF ₆]	3,55	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Sonia, 2012, 15
[C ₃ mim][BF ₄]	3,94	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Ranke, 2004, 30
[HOC ₃ mim][Cl]	3,52	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Hernández, 2015, 10
[HOC ₃ mim][dca]	3,48	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Hernández, 2015, 10
[C ₃ mim][NTf ₂]	2,77	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Ventura, 2010, 15
[C ₃ mim][NTf ₂]	3,00	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Delgado, 2019,15
[C ₃ -23mim][NTf ₂]	2,67	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Delgado, 2019
[C ₃ -C ₃ mim][NTf ₂]	1,92	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Sonia, 2012,15
[C ₄ mim][CH ₃ COO]	3,32	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Luis P, 2010,15
[C ₄ mim][Cap]	2,00	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Luis P, 2010,15
[C ₄ mim][CF ₃ SO ₃]	2,77	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Luis P, 2010,15
[C ₄ mim][HCOO]	3,19	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Luis P, 2010,15
[C ₄ mim][CF ₃ COO]	3,28	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Luis P, 2010,15
[C ₄ mim][PF ₆]	3,07	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Venture 2011, 15
[C ₄ mim][PF ₆]	3,07	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Garcia, 2005, 30
[C ₄ mim][PF ₆]	3,29	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Montalban, 2016,15
[C ₄ mim][Cl]	3,46	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Montalban, 2016, 15
[C ₄ mim][Cl]	3,47	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	stolte, 2007, 30
[C ₄ mim][Cl]	3,34	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	García, 2005, 30

ANEXO I. DATOS DE TOXICIDAD PARA V. FISHERI Y DESCRIPTORES DE LÍQUIDOS IÓNICOS

Abrev.	LC50 (µM)	Br	Cl	NTf ₂	BF ₄	CF ₃ SO ₃	N(CN) ₂	CH ₃ COO	CF ₃ COO	(C ₂ F ₅) ₃ P F ₃	Cap	I	SCN	FeCl ₄	PF ₆	HC OO	2OSO ₃	(2-OPhO) ₂ B	(2-SO ₂ PhCO) N	8OSO ₃	Al ₂ Cl ₇	B(CN) ₄	(C ₂ F ₅) ₂ PO ₂	(CF ₃) ₂ N	Ref.
[C ₄ mim][Cl]	3,71	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Docherty, 2005
[C ₄ mim][Cl]	3,39	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Romero,2008
[C ₄ mim][Cl]	3,21	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Petric, 2013, 15
[C ₄ mim][Cl]	3,49	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Mena, 2019, 15
[C ₄ mim][oac]	3,47	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Mena, 2019, 15
[C ₄ mim][BF ₄]	3,10	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Garcia, 2005,30
[C ₄ mim][BF ₄]	3,55	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Ranke, 2004
[C ₄ mim][BF ₄]	3,20	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Samori, 2010,15
[C ₄ mim][BF ₄]	3,12	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Samori 2007,15
[C ₄ mim][BF ₄]	3,46	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Montalban, 2016, 15
[C ₄ mim][Br]	3,44	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Wang, 2015, 15 min
[C ₄ mmim][Br]	3,25	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Wang, 2015, 15 min
[C ₄ mim][Br]	3,27	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Garcia, 2005,30
[C ₄ mim][Br]	4,01	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Docherty, 2005
[C ₄ mim][Br]	3,66	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Vivoud 2012
[C ₄ mim][Br]	3,07	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Ranke 2004
[C ₄ mim][Br]	3,53	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Venture, 2012, 15
[C ₄ mim][Br]	3,27	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Koutias, 2019, 5
[C ₄ mim][Br]	3,11	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Koutias, 2019, 15

ANEXO I. DATOS DE TOXICIDAD PARA V. FISHERI Y DESCRIPTORES DE LÍQUIDOS IÓNICOS

Abrev.	LC50 (µM)	Br	Cl	NTf ₂	BF ₄	CF ₃ SO ₃	N(CN) ₂	CH ₃ COO	CF ₃ COO	(C ₂ F ₅) ₃ PF ₃	Cap	I	SCN	FeCl ₄	PF ₆	HC OO	2OSO ₃	(2-OPhO) ₂ B	(2-SO ₂ PhCO)N	8OSO ₃	Al ₂ Cl ₇	B(CN) ₄	(C ₂ F ₅) ₂ PO ₂	(CF ₃) ₂ N	Ref.	
[C ₄ mim][NTf ₂]	2,53	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Venture, 2011, 15	
[C ₄ mim][NTf ₂]	3,39	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Couling, 2005, 15
[C ₄ mim][NTf ₂]	2,46	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Stolte, 2007,30
[C ₄ mim][NTf ₂]	2,60	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Delgado, 2019,15
[C ₄ mim][NTf ₂]	2,51	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Montalban, 2016,15
[C ₄ mim][NTf ₂]	2,95	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Mena, 2019,15
[iC ₄ mim][NTf ₂]	2,83	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Sonia, 2012,15
[C ₄ mim][N(CN) ₂]	3,44	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Delgado, 2019,15
[C ₄ mim][N(CN) ₂]	3,67	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Docherty, 2005
[C ₄ mim][N(CN) ₂]	3,11	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Samori, 2010,15
[C ₄ mim][SCN]	3,41	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Delgado, 2019,15
[C ₄ mim][SCN]	3,42	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Costa, 2017
[C ₄ mim][SCN]	2,37	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Francisco 2015, 10
[C ₄ mim][I]	3,59	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Luis P, 2010
[C ₄ mim][pTS]	3,52	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Ranke, 2004
[C ₄ mim][pTS]	3,32	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Venture, 2012, 15
[C ₄ mim][8OSO ₃]	1,85	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	Matzke 2007, 30
[C ₄ mim][HOSO ₃]	2,12	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Costa, 2017
[C ₄ mim][HOSO ₃]	2,12	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Hernandez, 2015,10

ANEXO I. DATOS DE TOXICIDAD PARA V. FISHERI Y DESCRIPTORES DE LÍQUIDOS IÓNICOS

Abrev.	LC50 (µM)	Br	Cl	NTf ₂	BF ₄	CF ₃ SO ₃	N(CN) ₂	CH ₃ COO	CF ₃ COO	(C ₂ F ₅) ₃ PF ₃	Cap	I	SCN	FeCl ₄	PF ₆	HC OO	2OSO ₃	(2-OPhO) ₂ B	(2-SO ₂ PhCO)N	8OSO ₃	Al ₂ Cl ₇	B(CN) ₄	(C ₂ F ₅) ₂ PO ₂	(CF ₃) ₂ N	Ref.	
[C ₄ mim][1OSO ₃]	3,57	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Costa, 2017
[C ₄ mim][1OSO ₃]	3,59	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Venture, 2012, 15
[C ₄ mim][1OSO ₃]	3,57	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Montalban, 2016, 15
[C ₄ mim][1OSO ₃]	3,16	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Koutia, 2019,5
[C ₄ mim][1OSO ₃]	3,04	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Koutia, 2019, 15
[C ₄ mim][C ₂ OSO ₃]	3,20	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	Hernández, 2015, 10
[C ₄ Femim][1OSO ₃]	1,76	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Francisco, 2015, 10
[C ₄ mim][(CF ₃) ₂ N]	3,48	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	Matzke, 2007. 30
[C ₄ mim][CF ₃ SO ₃]	3,60	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Cho
[C ₄ mim][FeCl ₄]	1,51	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Irabien,2011 ,15
[C ₄ eim][BF ₄]	2,80	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Ranke, 2004
[C ₄ mim][TCM]	3,35	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Delgado, 2019
[C ₄ mim][C ₅ SO ₃]	3,48	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Costa, 2017
[C ₄ mim][C ₅ SO ₃]	3,48	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Montalban, 2016, 15
[C ₄ -23mim][NTf ₂]	2,36	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Delgado, 2019
[C ₄ -23mim][NTf ₂]	2,30	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Sonia, 2012, 15
[C ₄ -23mim][NTf ₂]	2,87	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Montalban 2016, 15
[C ₄ -C ₄ mim][NTf ₂]	2,11	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Sonia, 2012,15
[C ₅ mim][BF ₄]	3,14	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Ranke, 2004

ANEXO I. DATOS DE TOXICIDAD PARA V. FISHERI Y DESCRIPTORES DE LÍQUIDOS IÓNICOS

Abrev.	LC50 (μM)	Br	Cl	NTf ₂	BF ₄	CF ₃ SO ₃	N(CN) ₂	CH ₃ COO	CF ₃ COO	(C ₂ F ₅) ₃ P F ₃	Cap	I	SCN	FeCl ₄	PF ₆	HC OO	2OSO ₃	(2-OPhO) ₂ B	(2-SO ₂ PhCO) N	8OSO ₃	Al ₂ Cl ₇	B(CN) ₄	(C ₂ F ₅) ₂ PO ₂	(CF ₃) ₂ N	Ref.
[C ₅ mim][NTf ₂]	2,03	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Sonia, 2012,15
[C ₆ C ₆ mim][NTf ₂]	1,79	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Sonia, 2012,15
[C ₅ mim][Cl]	3,78	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Moltalban, 2019,15
[C ₆ mim][PF ₆]	2,17	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	García, 2005, 30
[C ₆ mim][PF ₆]	2,11	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Romero, 2008
[C ₆ mim][PF ₆]	2,36	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Montalban, 2016,15
[C ₆ mim][Cl]	2,18	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Romero, 2008
[C ₆ mim][Cl]	2,32	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	García et al., 2005,30
[C ₆ mim][Cl]	2,37	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Montalban, 2016,15
[C ₆ mim][BF ₄]	3,18	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Ranke, 2004, 30
[C ₆ mim][Br]	2,82	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Wang, 2015, 15 min
[C ₆ mim][Br]	3,06	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Wang, 2015, 15 min
[C ₆ mim][Br]	3,13	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Viboud, 2012
[C ₆ mim][Br]	1,42	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Docherty, 2005
[C ₆ mim][NTf ₂]	1,71	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Sonia, 2012, 15
[C ₆ mim][NTf ₂]	1,80	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Delgado, 2019, 15
[C ₆ mim][NTf ₂]	2,11	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Ventura, 2011, 15
[C ₆ mim][NTf ₂]	2,05	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Merck, 2010
[C ₆ C ₆ mim][NTf ₂]	1,95	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	VF
[C ₆ C ₆ mim][NTf ₂]	1,95	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Sonia, 2012, 15

ANEXO I. DATOS DE TOXICIDAD PARA V. FISHERI Y DESCRIPTORES DE LÍQUIDOS IÓNICOS

Abrev.	LC50 (µM)	Br	Cl	NTf ₂	BF ₄	CF ₃ SO ₃	N(CN) ₂	CH ₃ COO	CF ₃ COO	(C ₂ F ₅) ₃ P F ₃	Cap	I	SCN	FeCl ₄	PF ₆	HC OO	2OSO ₃	(2-OPhO) ₂ B	(2-SO ₂ PhCO) N	8OSO ₃	Al ₂ Cl ₇	B(CN) ₄	(C ₂ F ₅) ₂ PO ₂	(CF ₃) ₂ N	Ref.	
[C ₆ CaIm][NTf ₂]	1,82	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Montalban, 2016, 15
[C ₆ mim] [(C ₂ F ₅) ₃ PF ₃]	2,65	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Merck, 2010
[C ₆ mim] [(2-SO ₂ PhCO)N]	2,67	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	Merck, 2010
[C ₆ -23mim][Cl]	1,74	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Luis 2007,15
[C ₆ eim][BF ₄]	2,15	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Ranke, 2004
[C ₇ -mim][NTf ₂]	1,62	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Sonia, 2012,15
[C ₇ -mim][BF ₄]	2,44	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Ranke, 2004
[C ₈ mim][Br]	2,15	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	wang, 2015, 15 min
[C ₈ mim][Br]	2,27	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Viboud,2012
[C ₈ mim][Br]	0,63	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Docherty,2005
[C ₈ mim][Br]	0,71	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Motalban,2018,15
[C ₈ mim][Br]	1,76	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Wang, 2015, 15 min
[C ₈ mmim][Br]	1,41	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Ranke, 2004
[C ₈ mim][BF ₄]	0,91	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Montalban, 2016, 15
[C ₈ mim][Cl]	0,69	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Montalban, 2016, 15
[C ₈ mim][Cl]	1,01	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Stolten, 2007, 30
[C ₈ mim][Cl]	1,19	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Garcia, 2005, 30
[C ₈ mim][Cl]	0,94	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Romero, 2008
[C ₈ mim][Cl]	0,30	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Petric, 2013, 15

ANEXO I. DATOS DE TOXICIDAD PARA V. FISHERI Y DESCRIPTORES DE LÍQUIDOS IÓNICOS

Abrev.	LC50 (µM)	Br	Cl	NTf ₂	BF ₄	CF ₃ SO ₃	N(CN) ₂	CH ₃ COO	CF ₃ COO	(C ₂ F ₅) ₃ P F ₃	Cap	I	SCN	FeCl ₄	PF ₆	HC OO	2OSO ₃	(2-OPhO) ₂ B	(2-SO ₂ PhCO) N	8OSO ₃	Al ₂ Cl ₇	B(CN) ₄	(C ₂ F ₅) ₂ PO ₂	(CF ₃) ₂ N	Ref.
[C ₈ mim][PF ₆]	0,70	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Romero, 2008
[C ₈ mim][PF ₆]	0,70	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Ventura, 2011, 15
[C ₈ mim][PF ₆]	0,95	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	García, 2005, 30
[C ₈ mim][PF ₆]	1,25	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Montalban, 2016, 15
[C ₈ mim][NTf ₂]	1,13	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Sonia 2012, 15
[C ₈ mim][NTf ₂]	0,83	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Merck, 2010
[C ₈ mim][NTf ₂]	0,99	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Montalban 2016, 15
[C ₈ mim][NTf ₂]	0,95	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Montalban 2018, 15
[C ₈ mim][SbF ₆]	0,85	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Montalbán, 2018,15
[C ₉ mim][BF ₄]	0,72	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Ranke, 2004
[C ₉ mim][Cl]	1,40	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Jafari, 2019
[C ₁₀ mim][BF ₄]	-0,18	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Ranke, 2004
[C ₁₀ mim][Cl]	0,50	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Ranke, 2004
[C ₁₀ mim][Cl]	-0,23	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Stolten, 2007,30
[C ₂ OCOC ₁₀ mim][Br]	1,08	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Ventura ,2012,15
[C ₁₀ mim][FeCl ₄]	-0,43	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Irabien, 2011,15
[C ₁₄ mim][Cl]	-0,15	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Stolte, 2007,30
[C ₁₆ mim][Cl]	0,23	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Stolte, 2007,30
[C ₁₈ mim][Cl]	1,35	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Merck, 2010

ANEXO I. DATOS DE TOXICIDAD PARA V. FISHERI Y DESCRIPTORES DE LÍQUIDOS IÓNICOS

Abrev.	LC50 (µM)	Br	Cl	NTf ₂	BF ₄	CF ₃ SO ₃	N(CN) ₂	CH ₃ COO	CF ₃ COO	(C ₂ F ₅) ₃ P F ₃	Cap	I	SCN	FeCl ₄	PF ₆	HC OO	2OSO ₃	(2-OPhO) ₂ B	(2-SO ₂ PhCO) N	8OSO ₃	Al ₂ Cl ₇	B(CN) ₄	(C ₂ F ₅) ₂ PO ₂	(CF ₃) ₂ N	Ref.	
[MOC ₂ mim][BF ₄]	4,15	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Samori, 2007, 15
[MOC ₂ mim][BF ₄]	3,90	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Samori, 2010,15
[MOC ₂ mim][N(CN) ₂]	4,06	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Samori, 2007,15
[MOC ₂ mim][N(CN) ₂]	3,99	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Samori, 2010,15
[MOC ₂ OC ₂ mim][BF ₄]	3,79	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Samori, 2010, 15
[MOC ₂ OC ₂ mim][Cl]	2,26	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Venture, 2015, 15
[MOC ₂ OC ₂ mim][N(CN) ₂]	3,88	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Samori, 2010,15
[MOC ₂ OC ₂ OC ₂ mim][BF ₄]	3,45	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Samori, 2010,15
[MOC ₂ OC ₂ OC ₂ mim][N(CN) ₂]	3,69	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Samori, 2010,15
[MOC ₂ OC ₂ OC ₂ mim][N(CN) ₂]	2,65	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Samori, 2010,15
[MOC ₂ mim][Cl]	4,18	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Stolte, 2007,30
[MOC ₂ mim][NTf ₂]	2,83	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Stolte, 2007,30
[MOC ₃ mim][NTf ₂]	3,20	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Stolte, 2007,30
[EOC ₁ mim][Cl]	4,08	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Stolte, 2007,30
[EOC ₁ mim][NTf ₂]	3,00	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Stolte, 2007,30
[EOC ₂ mim][Br]	4,28	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Stolte, 2007,30
[EOC ₂ mim][NTf ₂]	2,95	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Stolte, 2007,30
[CIC ₂ mim][Cl]	2,25	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Stolte 2007
[OHC ₂ mim][I]	3,89	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Stolte, 2007,30

ANEXO I. DATOS DE TOXICIDAD PARA V. FISHERI Y DESCRIPTORES DE LÍQUIDOS IÓNICOS

Abrev.	LC50 (µM)	Br	Cl	NTf ₂	BF ₄	CF ₃ SO ₃	N(CN) ₂	CH ₃ COO	CF ₃ COO	(C ₂ F ₅) ₃ P F ₃	Cap	I	SCN	FeCl ₄	PF ₆	HC OO	2OSO ₃	(2-OPhO) ₂ B	(2-SO ₂ PhCO) N	8OSO ₃	Al ₂ Cl ₇	B(CN) ₄	(C ₂ F ₅) ₂ PO ₂	(CF ₃) ₂ N	Ref.	
[OHC ₂ mim][Cl]	5,34	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Montalban, 2016,15
[OHC ₂ mim][NTf ₂]	4,05	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Stolte, 2007,30
[OHC ₃ mim][NTf ₂]	3,81	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Stolte, 2007,30
[OHC ₃ mim][SO ₃ (CF ₂) ₃ CF ₃]	4,06	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Stolte, 2019,30
[OHC ₃ mim][CO ₂ (CF ₂) ₃ CF ₃]	4,57	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Stolte, 2019,30
[CNC ₁ mim][NTf ₂]	3,81	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Stolte, 2007,30
[Phmim][N(CN) ₂]	2,84	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Delgado, 2019
[ImidC ₂ Phe][Br]	3,49	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Kusuma, 2019,30
[ImidC ₄ Phe][Br]	2,33	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Kusuma, 2019,30
[ImidC ₆ Phe][Br]	1,38	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Kusuma, 2019,30
[ImidC ₈ Phe][Br]	1,29	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Kusuma, 2019,30
[Imid10Phe][Br]	0,95	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Kusuma, 2019,30
[ImidC ₁₂ Phe][Br]	0,92	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Kusuma, 2019,30
[ImidC ₁₄ Phe][Br]	0,92	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Kusuma, 2019,30
[ImidC ₁₆ Phe][Br]	>1,80	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Kusuma, 2019,30
[C ₁₀ C ₆ Omim][Cl]	-0,85	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Nalecz-Jawecki, 2003, 15
[C ₁₀ cC ₆ Omim][Cl]	-0,85	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Nalecz-Jawecki, 2003, 15
[C ₁₀ C ₆ Smim][Cl]	-0,66	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Nalecz-Jawecki, 2003, 15
[13mim][NTf ₂]	3,61	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Delgado, 2019

ANEXO I. DATOS DE TOXICIDAD PARA V. FISHERI Y DESCRIPTORES DE LÍQUIDOS IÓNICOS

Abrev.	LC50 (µM)	Br	Cl	NTf ₂	BF ₄	CF ₃ SO ₃	N(CN) ₂	CH ₃ COO	CF ₃ COO	(C ₂ F ₅) ₃ P F ₃	Cap	I	SCN	FeCl ₄	PF ₆	HC OO	2OSO ₃	(2-OPhO) ₂ B	(2-SO ₂ PhCO) N	8OSO ₃	Al ₂ Cl ₇	B(CN) ₄	(C ₂ F ₅) ₂ PO ₂	(CF ₃) ₂ N	Ref.	
[Amim][NTf ₂]	2,94	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Delgado, 2019
[Amim][N(CN) ₂]	4,31	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Delgado, 2019
[Amim][Cl]	4,36	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Montalban, 2016, 15
[C ₂ -4mPy][NTf ₂]	2,73	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Delgado, 2019
[C ₂ -4mPy][2OSO ₃]	3,83	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	Montalban, 2016, 15
[OHC ₃ Py][NTf ₂]	4,01	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Merck, 2010
[C ₂ -4mPy][CO ₂ (CF ₂) ₃ CF ₃]	3,68	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Stote, 2019,30
[C ₂ -4mPy][NTf ₂]	2,73	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Delgado, 2019
[C ₃ -3mPy][NTf ₂]	1,90	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Sonia, 2012,15
[C ₃ -3mPy][PF ₆]	2,79	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Sonia, 2012,15
[pyC ₂ Phe][Br]	3,34	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Kusuma, 2019,30
[pyC ₄ Phe][Br]	2,28	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Kusuma, 2019,30
[pyC ₆ Phe][Br]	1,40	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Kusuma, 2019,30
[pyC ₈ Phe][Br]	1,29	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Kusuma, 2019,30
[pyC ₁₀ Phe][Br]	0,94	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Kusuma, 2019,30
[pyC ₁₂ Phe][Br]	0,89	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Kusuma, 2019,30
[pyC ₁₄ Phe][Br]	0,96	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Kusuma, 2019,30
[pyC ₁₆ Phe][Br]	>1,80	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Kusuma, 2019,30
[Py][CF ₃ SO ₃]	2,52	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Koutinas, 2020, 5

ANEXO I. DATOS DE TOXICIDAD PARA V. FISHERI Y DESCRIPTORES DE LÍQUIDOS IÓNICOS

Abrev.	LC50 (µM)	Br	Cl	NTf ₂	BF ₄	CF ₃ SO ₃	N(CN) ₂	CH ₃ COO	CF ₃ COO	(C ₂ F ₅) ₃ PF ₃	Cap	I	SCN	FeCl ₄	PF ₆	HC OO	2OSO ₃	(2-OPhO) ₂ B	(2-SO ₂ PhCO)N	8OSO ₃	Al ₂ Cl ₇	B(CN) ₄	(C ₂ F ₅) ₂ PO ₂	(CF ₃) ₂ N	Ref.	
[Py][CF ₃ SO ₃]	2,52	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Koutinas, 2020, 15	
[C ₄ Py][N(CN) ₂]	3,30	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Docherty, 2005
[C ₄ Py][Br]	3,38	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Wang, 2015, 15 min
[C ₄ Py][Br]	3,72	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Vivoud 2012
[C ₄ Py][Br]	3,39	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Docherty, 2005
[C ₄ Py][Cl]	3,30	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Docherty, 2005
[C ₄ Py][Cl]	3,18	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Stolte, 2007,30
[C ₄ Py][Cl]	3,24	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Petric, 2013, 15
[C ₄ Py][Al ₂ Cl ₇]	3,01	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	Merck, 2010
[C ₄ Py][NTf ₂]	2,44	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Delgado, 2019,15
[C ₄ -3mPy][Br]	3,14	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Wang, 2015, 15 min
[C ₄ -3mPy][Br]	2,75	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Docherty, 2005
[C ₄ -3mPy][N(CN) ₂]	2,66	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Docherty, 2005
[C ₄ -3mPy][BF ₄]	3,30	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Costa, 2017
[C ₄ -4mPy][BF ₄]	2,44	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Montalban, 2016, 15
[C ₄ -4mPy][BF ₄]	1,51	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Hernández, 2015, 10
[C ₄ -4mPy][BF ₄]	3,02	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Merck, 2010
[C ₄ -4mPy][BF ₄]	2,38	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Costa, 2015, 15
[C ₄ -4mPy][Cl]	3,32	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Costa, 2017

ANEXO I. DATOS DE TOXICIDAD PARA V. FISHERI Y DESCRIPTORES DE LÍQUIDOS IÓNICOS

Abrev.	LC50 (µM)	Br	Cl	NTf ₂	BF ₄	CF ₃ SO ₃	N(CN) ₂	CH ₃ COO	CF ₃ COO	(C ₂ F ₅) ₃ PF ₃	Cap	I	SCN	FeCl ₄	PF ₆	HC OO	2OSO ₃	(2-OPhO) ₂ B	(2-SO ₂ PhCO)N	8OSO ₃	Al ₂ Cl ₇	B(CN) ₄	(C ₂ F ₅) ₂ PO ₂	(CF ₃) ₂ N	Ref.
[C ₄ -4mPy][Cl]	3,04	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Costa, 2015 ,15
[C ₄ -4mPy][TCM]	2,68	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Delgado, 2019
[C ₄ -4mPy][NTf ₂]	2,04	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Delgado, 2019
[C ₄ -23mPy][Br]	2,24	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Wang, 2015, 15 min
[C ₄ -23mPy][Br]	2,93	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Viboud, 2012
[C ₄ -23mPy][CF ₃ SO ₃]	2,84	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Viboud, 2012
[C ₄ -35mPy][N(CN) ₂]	2,38	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Docherty, 2005
[C ₄ -35mPy][Br]	2,69	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Docherty, 2005
[C ₄ -35mPy][Br]	2,49	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Viboud, 2012(31)
[C ₄ -35mPy][SCN]	2,25	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Viboud, 2012(31)
[C ₄ -35mPy][NTf ₂]	1,86	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Viboud, 2012(31)
[C ₄ -235mPy][Br]	2,37	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Wang, 2015, 15 min
[C ₄ -235mPy][Br]	2,48	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Viboud, 2012(31)
[C ₄ -235mPy][NTf ₂]	1,56	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Viboud, 2012(31)
[C ₄ -4C1NPy][Br]	2,52	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Stolte, 2007,30
[C ₄ -4C1NPy][Br]	2,32	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Couling, 2005, 15
[C ₄ -4C1NPy][Cl]	2,52	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Stolte, 2007, 30
[C ₄ -4C1NPy][NTf ₂]	1,85	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Stolte, 2007, 30
[C ₆ Py][Br]	2,69	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Wang, 2015, 15 min

ANEXO I. DATOS DE TOXICIDAD PARA V. FISHERI Y DESCRIPTORES DE LÍQUIDOS IÓNICOS

Abrev.	LC50 (μM)	Br	Cl	NTf ₂	BF ₄	CF ₃ SO ₃	N(CN) ₂	CH ₃ COO	CF ₃ COO	(C ₂ F ₅) ₃ P F ₃	Cap	I	SCN	FeCl ₄	PF ₆	HC OO	2OSO ₃	(2-OPhO) ₂ B	(2-SO ₂ PhCO) N	8OSO ₃	Al ₂ Cl ₇	B(CN) ₄	(C ₂ F ₅) ₂ PO ₂	(CF ₃) ₂ N	Ref.
[C ₆ Py][Br]	2,85	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Viboud, 2012
[C ₆ -3mPy][Cl]	2,40	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Cao, 2018
[C ₆ -4mPy][Br]	2,11	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Wang, 2015, 15 min
[C ₆ -4mPy][Br]	2,07	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Docherty, 2005
[C ₆ -4mPy][Cl]	1,44	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Luis, 2007,15
[C ₆ -4C ₁ NPY][NTf ₂]	1,38	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Merck, 2010
[C ₆ Py][Cl]	1,69	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Merck, 2010
[C ₆ Py][SbF ₆]	1,13	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Montalbán, 2018
[C ₆ Py][Br]	1,69	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Wang, 2015, 15 min
[C ₆ Py][Br]	1,89	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Viboud, 2012
[C ₆ Py][Br]	1,27	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Montalban, 2018,15
[C ₆ Py][NTf ₂]	1,51	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Montalban, 2018,15
[C ₆ -3mPy][Br]	1,36	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Wang, 2015, 15 min
[C ₆ -3mPy][Br]	0,79	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Docherty, 2005
[C ₆ -23mPy][Br]	1,08	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Viboud, 2012(31)
[C ₆ -35mPy][Br]	1,12	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Viboud, 2012
[C ₆ -35mPy][NTf ₂]	0,36	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Papaiconomou, 2010
[C ₆ -35mPy][BF ₄]	0,97	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Viboud, 2012
[C ₆ -2m5ePy][Br]	0,59	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Viboud, 2012

ANEXO I. DATOS DE TOXICIDAD PARA V. FISHERI Y DESCRIPTORES DE LÍQUIDOS IÓNICOS

Abrev.	LC50 (μM)	Br	Cl	NTf ₂	BF ₄	CF ₃ SO ₃	N(CN) ₂	CH ₃ COO	CF ₃ COO	(C ₂ F ₅) ₃ PF ₃	Cap	I	SCN	FeCl ₄	PF ₆	HC OO	2OSO ₃	(2-OPhO) ₂ B	(2-SO ₂ PhCO)N	8OSO ₃	Al ₂ Cl ₇	B(CN) ₄	(C ₂ F ₅) ₂ PO ₂	(CF ₃) ₂ N	Ref.	
[C ₈ -235mPy][Br]	0,61	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Wang, 2015, 15 min
[C ₈ -235mPy][Br]	0,62	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Viboud, 2012(31)
[C ₈ -235mPy][NTf ₂]	0,62	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Viboud, 2012(31)
[C12SmPy][Cl]	-0,54	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Nalecz-Jawecki, 2003
[3C1-C12SmPy][Cl]	-0,77	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Nalecz-Jawecki, 2003
[35C1-C12SmPy][Cl]	-0,89	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Nalecz-Jawecki, 2003
[N00-2MO-2MO][N00SO ₃]	4,03	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Cho
[N000-2OH][Ehexato]	2,62	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Viesca, 2020, 15 min
[N001-2OH][Ehexato]	2,35	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Viesca, 2020, 15 min
[N011-2OH][Ehexato]	2,31	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Viesca, 2020, 15 min
[N000-2OH][DBS]	2,08	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Viesca, 2020, 15 min
[N001-2OH][DBS]	2,00	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Viesca, 2020, 15 min
[N011-2OH][DBS]	1,95	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Viesca, 2020, 15 min
[N _{111-2OH}][1COO]	4,34	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Costa, 2015,15
[N _{111-2OH}][1COO]	3,67	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Mena, 2019,15
[N _{111-2OH}][H ₂ PO ₄]	3,76	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Hernández, 2015,10
[N _{111-2OH}][NTf ₂]	4,15	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Couling, 2005, 15

ANEXO I. DATOS DE TOXICIDAD PARA V. FISHERI Y DESCRIPTORES DE LÍQUIDOS IÓNICOS

Abrev.	LC50 (µM)	Br	Cl	NTf ₂	BF ₄	CF ₃ SO ₃	N(CN) ₂	CH ₃ COO	CF ₃ COO	(C ₂ F ₅) ₃ P F ₃	Cap	I	SCN	FeCl ₄	PF ₆	HC OO	2OSO ₃	(2-OPhO) ₂ B	(2-SO ₂ PhCO) N	8OSO ₃	Al ₂ Cl ₇	B(CN) ₄	(C ₂ F ₅) ₂ PO ₂	(CF ₃) ₂ N	Ref.
[N _{111-20H}][NTf ₂]	3,08	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Mena, 2019,15
[N _{111-20H}][Cl]	6,17	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Viboud, 2012
[N _{111-20H}][Cl]	3,64	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Mena, 2019,15
[N _{111-20H}][SO ₃ (CF ₂) ₃ CF ₃]	4,19	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Stolen, 2019, 30
[N _{111-20H}][CO ₂ (CF ₂) ₃ CF ₃]	4,52	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Stolen, 2019, 30
[coliC ₂ Phe][Br]	3,46	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Kusuma, 2019,30
[coliC ₄ Phe][Br]	2,34	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Kusuma, 2019,30
[coliC ₆ Phe][Br]	1,51	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Kusuma, 2019,30
[coliC ₈ Phe][Br]	1,62	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Kusuma, 2019,30
[coliC ₁₀ Phe][Br]	1,04	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Kusuma, 2019,30
[coliC ₁₂ Phe][Br]	0,90	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Kusuma, 2019,30
[coliC ₁₄ Phe][Br]	0,90	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Kusuma, 2019,30
[coliC ₁₆ Phe][Br]	>1,80	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Kusuma, 2019,30
[Chol][DHCit]	1,99	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Ventura, 2014, 5min
[Chol][DHCit]	2,08	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Ventura, 2014, 15min
[Chol][DHCit]	2,10	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Ventura, 2014, 30min
[Chol][Cl]	2,77	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Ventura, 2014, 5min
[Chol][Cl]	2,77	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Ventura, 2014, 15min
[Chol][Cl]	2,73	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Ventura, 2014, 30min

ANEXO I. DATOS DE TOXICIDAD PARA V. FISHERI Y DESCRIPTORES DE LÍQUIDOS IÓNICOS

Abrev.	LC50 (µM)	Br	Cl	NTf ₂	BF ₄	CF ₃ SO ₃	N(CN) ₂	CH ₃ COO	CF ₃ COO	(C ₂ F ₅) ₃ PF ₃	Cap	I	SCN	FeCl ₄	PF ₆	HC OO	2OSO ₃	(2-OPhO) ₂ B	(2-SO ₂ PhCO)N	8OSO ₃	Al ₂ Cl ₇	B(CN) ₄	(C ₂ F ₅) ₂ PO ₂	(CF ₃) ₂ N	Ref.
[Bzchol][Cl]	3,44	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Ventura, 2014, 5min
[Bzchol][Cl]	3,23	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Ventura, 2014, 15min
[Bzchol][Cl]	3,22	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Ventura, 2014, 30min
[Chol][Bit]	1,91	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Ventura, 2014, 5min
[Chol][Bit]	2,00	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Ventura, 2014, 15min
[Chol][Bit]	1,98	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Ventura, 2014, 30min
[Chol][But]	3,64	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Ventura, 2014, 5min
[Chol][But]	3,65	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Ventura, 2014, 15min
[Chol][But]	3,66	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Ventura, 2014, 30min
[Chol][Prop]	3,58	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Ventura, 2014, 5min
[Chol][Prop]	3,47	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Ventura, 2014, 15min
[Chol][Prop]	3,44	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Ventura, 2014, 30min
[Chol][Ac]	3,87	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Ventura, 2014, 5min
[Chol][Ac]	3,72	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Ventura, 2014, 15min
[Chol][Ac]	3,62	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Ventura, 2014, 30min
[Chol][Sal]	3,26	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Ventura, 2014, 5min
[Chol][Sal]	3,14	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Ventura, 2014, 15min
[Chol][Sal]	2,99	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Ventura, 2014, 30min
[Chol][Sal]	2,95	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Sitra 2015, 5 min

ANEXO I. DATOS DE TOXICIDAD PARA V. FISHERI Y DESCRIPTORES DE LÍQUIDOS IÓNICOS

Abrev.	LC50 (µM)	Br	Cl	NTf ₂	BF ₄	CF ₃ SO ₃	N(CN) ₂	CH ₃ COO	CF ₃ COO	(C ₂ F ₅) ₃ P F ₃	Cap	I	SCN	FeCl ₄	PF ₆	HC OO	2OSO ₃	(2-OPhO) ₂ B	(2-SO ₂ PhCO) N	8OSO ₃	Al ₂ Cl ₇	B(CN) ₄	(C ₂ F ₅) ₂ PO ₂	(CF ₃) ₂ N	Ref.	
[Chol][Sal]	2,80	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Sitra 2015, 15 min	
[Chol][Sal]	2,65	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Sitra 2015, 30 min
[Chol][gal]	4,13	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Sitra 2015, 5 min
[Chol][gal]	3,85	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Sitra 2015, 15 min
[Chol][gal]	3,78	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Sitra 2015, 30 min
[Chol][caf]	3,49	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Sitra 2015, 5 min
[Chol][caf]	3,46	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Sitra 2015, 15 min
[Chol][caf]	3,41	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Sitra 2015, 30 min
[Chol][val]	3,46	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Sitra 2015, 5 min
[Chol][val]	3,58	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Sitra 2015, 15 min
[Chol][val]	3,52	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Sitra 2015, 30 min
[Chol][sig]	3,18	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Sitra 2015, 5 min
[Chol][sig]	3,18	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Sitra 2015, 15 min
[Chol][sig]	3,16	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Sitra 2015, 30 min
[Chol][neod]	2,75	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Ratamaki 2017, 5 min
[Chol][neod]	2,72	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Ratamaki 2017, 15 min
[Chol][dec]	2,00	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Ratamaki 2017, 5 min
[Chol][dec]	2,00	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Ratamaki 2017, 15 min
[Chol][isost]	2,11	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Ratamaki 2017, 5 min

ANEXO I. DATOS DE TOXICIDAD PARA V. FISHERI Y DESCRIPTORES DE LÍQUIDOS IÓNICOS

Abrev.	LC50 (µM)	Br	Cl	NTf ₂	BF ₄	CF ₃ SO ₃	N(CN) ₂	CH ₃ COO	CF ₃ COO	(C ₂ F ₅) ₃ P F ₃	Cap	I	SCN	FeCl ₄	PF ₆	HC OO	2OSO ₃	(2-OPhO) ₂ B	(2-SO ₂ PhCO) N	8OSO ₃	Al ₂ Cl ₇	B(CN) ₄	(C ₂ F ₅) ₂ PO ₂	(CF ₃) ₂ N	Ref.		
[Chol][Isost]	1,87	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Ratamaki 2017, 15 min	
[N _{000-2OH}][HCO ₂]	3,82	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Petric, 2013, 15
[N _{002OH-2OH}][HCO ₂]	3,72	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Petric, 2013, 15
[N _{002OH-2OH}][CCO ₂]	4,03	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Petric, 2013, 15
[N _{002OH-2OH}][C ₂ CO ₂]	3,56	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Petric, 2013, 15
[N _{002OH-2OH}][C ₃ CO ₂]	3,62	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Petric, 2013, 15
[N _{002OH-2OH}][C ₃ CO ₂]	3,64	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Petric, 2013, 15
[N _{002OH-2OH}][C ₄ CO ₂]	3,23	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Petric, 2013, 15
[N _{02OH2OH-2OH}][C ₃ CO ₂]	3,32	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Petric, 2013, 15
[N _{02OH2OH-2OH}][C ₄ CO ₂]	3,26	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Petric, 2013, 15
[N _{000-2OH}][C ₃ CO ₂]	4,18	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Petric, 2013, 15
[N _{000-2c}][NO ₃]	4,32	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Motalban, 2016, 15
[N _{4,4,4,4}][Cl]	3,39	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Costa, 2015, 15
[N _{4,4,4,4}][I]	3,27	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Koutias, 2019,5
[N _{4,4,4,4}][I]	2,93	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Koutias, 2019, 15
[N _{4,4,4,4}][PF ₆]	2,45	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Koutias, 2019, 15
[N _{4,4,4,4}][PF ₆]		0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Koutias, 2019, 15
[N ₈₈₈₋₁][c6:0]	2,14	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Oulego, 2019, 15
[N ₈₈₈₋₁][c8:0]	2,06	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Oulego, 2019, 15

ANEXO I. DATOS DE TOXICIDAD PARA V. FISHERI Y DESCRIPTORES DE LÍQUIDOS IÓNICOS

Abrev.	LC50 (µM)	Br	Cl	NTf ₂	BF ₄	CF ₃ SO ₃	N(CN) ₂	CH ₃ COO	CF ₃ COO	(C ₂ F ₅) ₃ PF ₃	Cap	I	SCN	FeCl ₄	PF ₆	HC OO	2OSO ₃	(2-OPhO) ₂ B	(2-SO ₂ PhCO)N	8OSO ₃	Al ₂ Cl ₇	B(CN) ₄	(C ₂ F ₅) ₂ PO ₂	(CF ₃) ₂ N	Ref.
[N ₈₈₈₋₁][C12:0]	1,98	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Oulego, 2019, 15
[N ₈₈₈₋₁][C16:0]	1,86	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Oulego, 2019, 15
[N ₈₈₈₋₁][C18:0]	1,80	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Oulego, 2019, 15
[N ₈₈₈₋₁][C18:1]	1,25	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Oulego, 2019, 15
[N ₁₁₁₋₁₂][Br]	-0,11	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Garcia, 2001, 30
[N ₁₁₁₋₁₄][Br]	-0,08	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Garcia, 2001, 30
[N ₁₁₁₋₁₆][Br]	0,24	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Garcia, 2001, 30
[N ₁₁₁₋₁₆][Cl]	0,40	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Merck, 2010
[N _{112-1EOCO}][NTf ₂]	3,32	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Merck, 2010
[N _{112-2MO}][NTf ₂]	3,35	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Merck, 2010
[N ₁₁₂₄][NTf ₂]	3,21	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Stolte, 2007,30
[N _{118-1C100x}][Cl]	-0,09	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Nalecz-Jawecki, 2003,15
[N _{11-12-1Ph}][Br]	-0,33	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Garcia, 2001,30
[N _{11-12-1Ph}][Cl]	-0,23	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Merck, 2010
[N _{11-12-1C80}][Cl]	0,39	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Nalecz-Jawecki, 2003,15
[N _{11-12-1C90}][Cl]	0,38	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Nalecz-Jawecki, 2003,15
[N _{11-12-1C100}][Cl]	0,60	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Nalecz-Jawecki, 2003,15
[N _{11-14-1Ph}][Br]	-0,39	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Garcia, 2001, 30

ANEXO I. DATOS DE TOXICIDAD PARA V. FISHERI Y DESCRIPTORES DE LÍQUIDOS IÓNICOS

Abrev.	LC50 (µM)	Br	Cl	NTf ₂	BF ₄	CF ₃ SO ₃	N(CN) ₂	CH ₃ COO	CF ₃ COO	(C ₂ F ₅) ₃ P F ₃	Cap	I	SCN	FeCl ₄	PF ₆	HC OO	2OSO ₃	(2-OPhO) ₂ B	(2-SO ₂ PhCO) N	8OSO ₃	Al ₂ Cl ₇	B(CN) ₄	(C ₂ F ₅) ₂ PO ₂	(CF ₃) ₂ N	Ref.
[N _{11-16-1Ph}][Br]	0,11	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Garcia, 2001, 30
[N _{11-16-1Ph}][Cl]	-0,31	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Merck, 2010
[N _{11-Ph-1C80}][Cl]	-0,70	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Nalecz-Jawecki, 2003, 15
[N _{11-Ph-1C100}][Cl]	-0,62	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Nalecz-Jawecki, 2003, 15
[N _{11-Ph-1C120}][Cl]	-0,38	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Nalecz-Jawecki, 2003, 15
[N ₂₂₀][CH ₃ SO ₄]	5,41	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Ratamaki, 2019, 15
[N ₂₂₀][Br]	2,46	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Couling, 2005
[N ₄₄₄][Br]	3,27	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Couling, 2005
[C ₈ mPyrr][SbF ₆]	1,69	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Montalbán, 2018
[C ₃ mPyrr][PF ₆]	4,01	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Sonia, 2012, 15
[C ₃ mPyrr][NTf ₂]	3,29	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Sonia, 2012, 15
[C ₄ mPyrr][NTf ₂]	2,54	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Stolten, 2007, 30
[C ₄ mPyrr][NTf ₂]	2,72	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Viboud, 2012
[C ₄ mPyrr][[(C ₂ F ₅) ₃ PF ₃]	1,70	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Merck, 2010
[C ₄ mPyrr][Br]	4,40	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Viboud, 2012
[C ₄ mPyrr][Br]	4,00	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Wang, 2015, 15 min
[C ₄ mPyrr][N(CN) ₂]	4,26	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Viboud, 2012
[C ₄ mPyrr][N(CN) ₂]	4,34	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Hernández, 2015, 10

ANEXO I. DATOS DE TOXICIDAD PARA V. FISHERI Y DESCRIPTORES DE LÍQUIDOS IÓNICOS

Abrev.	LC50 (µM)	Br	Cl	NTf ₂	BF ₄	CF ₃ SO ₃	N(CN) ₂	CH ₃ COO	CF ₃ COO	(C ₂ F ₅) ₃ P F ₃	Cap	I	SCN	FeCl ₄	PF ₆	HC OO	2OSO ₃	(2-OPhO) ₂ B	(2-SO ₂ PhCO) N	8OSO ₃	Al ₂ Cl ₇	B(CN) ₄	(C ₂ F ₅) ₂ PO ₂	(CF ₃) ₂ N	Ref.
[C ₄ mPyrr][CF ₃ SO ₃]	3,98	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Viboud, 2012
[C ₆ mPyrr][Cl]	2,99	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Luis, 2007, 15
[C ₆ mPyrr][NTf ₂]	2,40	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Merck, 2010
[C ₆ mPyrr][Br]	3,19	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Viboud, 2012
[C ₆ mPyrr][Br]	2,95	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Wang, 2015, 15 min
[C ₆ mPyrr][Cl]	2,17	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Viboud, 2012
[C ₈ mPyrr][NTf ₂]	1,58	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Viboud, 2012
[C ₈ mPyrr][NTf ₂]	1,53	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Montalban, 2018,15
[C ₈ mPyrr][SbF ₆]	1,69	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Montalban, 2018,15
[C ₈ mPyrr][Br]	2,26	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Viboud, 2012
[C ₈ mPyrr][Br]	2,15	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Wang, 2015, 15 min
[C ₈ -3mPyrr][Br]	1,66	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Montalban, 2018,15
[EO-OC ₂ mPyrr][NTf ₂]	3,23	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Merck, 2010
[EOC ₂ mPyrr][NTf ₂]	2,97	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Merck, 2010
[OHC ₃ mPyrr][NTf ₂]	3,91	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Merck, 2010
[C ₄ -C ₃ CNPyr][Br]	5,33	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Viboud, 2012
[C ₂ mMorp][Br]	5,21	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Pretti, 2011,30
[C ₄ mMorp][Br]	4,87	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Pretti, 2011,30
[C ₄ mMorp][NTf ₂]	2,49	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Stolte, 2007,30

ANEXO I. DATOS DE TOXICIDAD PARA V. FISHERI Y DESCRIPTORES DE LÍQUIDOS IÓNICOS

Abrev.	LC50 (µM)	Br	Cl	NTf ₂	BF ₄	CF ₃ SO ₃	N(CN) ₂	CH ₃ COO	CF ₃ COO	(C ₂ F ₅) ₃ P F ₃	Cap	I	SCN	FeCl ₄	PF ₆	HC OO	2OSO ₃	(2-OPhO) ₂ B	(2-SO ₂ PhCO) N	8OSO ₃	Al ₂ Cl ₇	B(CN) ₄	(C ₂ F ₅) ₂ PO ₂	(CF ₃) ₂ N	Ref.
[C ₄ mMorp][Br]	5,45	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Viboud, 2012
[C ₄ mMorp][N(CN) ₂]	4,89	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Viboud, 2012
[C ₄ mMorp][CF ₃ SO ₃]	4,40	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Viboud, 2012
[C ₆ mMorp][Br]	3,94	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Pretti, 2011,30
[C ₆ mMorp][Br]	2,56	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Viboud, 2012
[C ₆ mMorp][Br]	2,38	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Pretti, 2011,30
[C ₁₀ mMorp][Br]	1,30	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Pretti, 2011,30
[EOC ₁ mMorp][NTf ₂]	3,38	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Cho
[4,5][oac]	4,64	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Ramataki, 2019,15
[5,5][oac]	4,08	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Ramataki, 2019,15
[5,6][oac]	4,02	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Ramataki, 2019,15
[C ₃ mPip][PF ₆]	3,59	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Sonia, 2012,15
[C ₃ mPip][NTf ₂]	3,01	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Sonia, 2012,15
[C ₄ mPip][Br]	3,84	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Wang, 2015, 15 min
[C ₄ mPip][Br]	4,22	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Viboud, 2012
[C ₄ mPip][Br]	4,27	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Stolte, 2007,30
[C ₄ mPip][NTf ₂]	2,56	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Stolte, 2007,30
[C ₆ mPip][Br]	2,76	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Wang, 2015, 15 min
[C ₆ mPip][Br]	2,94	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Viboud, 2012

ANEXO I. DATOS DE TOXICIDAD PARA V. FISHERI Y DESCRIPTORES DE LÍQUIDOS IÓNICOS

Abrev.	LC50 (μM)	Br	Cl	NTf ₂	BF ₄	CF ₃ SO ₃	N(CN) ₂	CH ₃ COO	CF ₃ COO	(C ₂ F ₅) ₃ P F ₃	Cap	I	SCN	FeCl ₄	PF ₆	HC OO	2OSO ₃	(2-OPhO) ₂ B	(2-SO ₂ PhCO) N	8OSO ₃	Al ₂ Cl ₇	B(CN) ₄	(C ₂ F ₅) ₂ PO ₂	(CF ₃) ₂ N	Ref.	
[C ₈ mPip][Br]	1,91	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Wang, 2015, 15 min
[C ₈ mPip][Br]	2,00	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Viboud, 2012
[C ₄ ePip][Br]	3,66	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Wang, 2015, 15 min
[C ₄ ePip][Br]	3,96	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Viboud, 2012
[C ₈ ePip][Br]	1,79	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Wang, 2015, 15 min
[C ₈ ePip][Br]	1,80	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Viboud, 2012
[C ₈ ePip][I]	2,20	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Viboud, 2012
[C ₈ ePip][SCN]	1,50	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Viboud, 2012
[C ₄ TROP][Br]	5,36	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Viboud, 2012
[C ₄ TROP][I]	4,74	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Viboud, 2012
[C ₄ TROP][NTf ₂]	2,61	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Viboud, 2012
[C ₄ TROP][SCN]	4,07	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Viboud, 2012
[C ₈ TROP][NTf ₂]	2,17	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Jafari, 2019
[C ₈ TROP][N(CN) ₂]	2,52	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Viboud, 2012
[C ₈ TROP][BF ₄]	2,77	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Viboud, 2012
[Bu ₃ NC ₄][Sac]	3,11	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Parajo, 2019,15
[Bu ₃ NC ₄][Sac]	2,92	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Parajo, 2019,30
[Bu ₃ NC ₂][Sac]	2,36	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Parajo, 2019,15
[Bu ₃ NC ₂][Sac]	2,18	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Parajo, 2019,30

ANEXO I. DATOS DE TOXICIDAD PARA V. FISHERI Y DESCRIPTORES DE LÍQUIDOS IÓNICOS

Abrev.	LC50 (µM)	Br	Cl	NTf ₂	BF ₄	CF ₃ SO ₃	N(CN) ₂	CH ₃ COO	CF ₃ COO	(C ₂ F ₅) ₃ PF ₃	Cap	I	SCN	FeCl ₄	PF ₆	HC OO	2OSO ₃	(2-OPhO) ₂ B	(2-SO ₂ PhCO)N	8OSO ₃	Al ₂ Cl ₇	B(CN) ₄	(C ₂ F ₅) ₂ PO ₂	(CF ₃) ₂ N	Ref.	
[Me ₃ NC ₂ OC ₁₂][doc]	0,69	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Parajo, 2019,15
[Me ₃ NC ₂ OC ₁₂][doc]	0,65	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Parajo, 2019,30
[Me ₃ NC ₂ OC ₁₂][SCN]	0,35	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Parajo, 2019,15
[Me ₃ NC ₂ OC ₁₂][SCN]	0,25	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Parajo, 2019,30
[Me ₃ NC ₂ OC ₁₄][doc]	0,28	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Parajo, 2019,15
[Me ₃ NC ₂ OC ₁₄][doc]	0,27	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Parajo, 2019,30
[Me ₃ NC ₂ OC ₁₄][SCN]	0,47	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Parajo, 2019,15
[Me ₃ NC ₂ OC ₁₄][SCN]	0,38	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Parajo, 2019,30
[Bu ₃ pC ₂][Sac]	1,54	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Parajo, 2019,15
[Bu ₃ pC ₂][Sac]	1,47	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Parajo, 2019,30
[Bu ₃ pC ₄][Sac]	2,12	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Parajo, 2019,15
[Bu ₃ pC ₄][Sac]	1,82	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Parajo, 2019,30
[P ₂₄₄₄][dC ₂ -PO ₄]	3,07	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Couling, 2005,15
[P ₂₄₄₄][dC ₃ -PO ₄]	3,07	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Couling, 2005
[P ₄₄₄₄][Br]	2,71	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Couling, 2005,15
[P ₄₄₄₄][Br]	2,71	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Venture, 2012, 15
[P ₁₄₄₄₁][Tosilate]	2,64	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Venture, 2012, 15
[P ₁₄₄₄₁][Tosilate]	2,44	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Hernández, 2015, 10
[P ₄₄₄₁][CH ₃ SO ₃]	2,86	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Venture, 2012, 15

ANEXO I. DATOS DE TOXICIDAD PARA V. FISHERI Y DESCRIPTORES DE LÍQUIDOS IÓNICOS

Abrev.	LC50 (µM)	Br	Cl	NTf ₂	BF ₄	CF ₃ SO ₃	N(CN) ₂	CH ₃ COO	CF ₃ COO	(C ₂ F ₅) ₃ PF ₃	Cap	I	SCN	FeCl ₄	PF ₆	HC OO	2OSO ₃	(2-OPhO) ₂ B	(2-SO ₂ PhCO)N	8OSO ₃	Al ₂ Cl ₇	B(CN) ₄	(C ₂ F ₅) ₂ PO ₂	(CF ₃) ₂ N	Ref.	
[P ₄₄₄][CH ₃ SO ₃]	2,64	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Hernández, 2015, 10
[P ₆₆₆₋₁₄][Br]	3,41	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Couling, 2005,15
[P ₆₆₆₋₁₄][Br]	1,05	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Ventura, 2012, 15
[P ₆₆₆₋₁₄][Cl]	1,14	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Ventura, 2012, 15
[P ₆₆₆₋₁₄][CH ₃ SO ₃]	1,11	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Ventura, 2012, 15
[P ₆₆₆₋₁₄][(C ₂ F ₅) ₃ PF ₃]	1,70	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Merck, 2010
[P ₈₈₈₋₁][OAC]	0,28	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Rantamäki, 2019, 15
[C _{2m} DABCO][Br]	5,58	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Pretti, 2011,30
[C _{4m} DABCO][Br]	4,87	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Pretti, 2011,30
[C _{6m} DABCO][Br]	3,69	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Pretti, 2011,30
[C _{8m} DABCO][Br]	2,35	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Pretti, 2011,30
[C _{10m} DABCO][Br]	1,26	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Pretti, 2011,30
[G ₁₁₁₁][CH ₃ SO ₃]	3,96	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Ratamaki, 2019,15
[G ₁₁₁₁][CF ₃ COO]	0,47	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Luis P, 2010,15
[G ₁₁₁₁][1COO]	3,17	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Luis P, 2010,15
[G ₁₁₁₁][CF ₃ SO ₃]	3,52	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Luis P, 2010,15
[G ₁₁₁₁][Cap]	2,29	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Luis P, 2010,15
[G ₁₁₁₁][Isost]	1,97	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Ratamaki, 2017, 5 min
[G ₁₁₁₁][Isost]	1,79	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Ratamaki, 2017, 15min

ANEXO I. DATOS DE TOXICIDAD PARA V. FISHERI Y DESCRIPTORES DE LÍQUIDOS IÓNICOS

Abrev.	LC50 (µM)	Br	Cl	NTf ₂	BF ₄	CF ₃ SO ₃	N(CN) ₂	CH ₃ COO	CF ₃ COO	(C ₂ F ₅) ₃ PF ₃	Cap	I	SCN	FeCl ₄	PF ₆	HC OO	2OSO ₃	(2-OPhO) ₂ B	(2-SO ₂ PhCO)N	8OSO ₃	Al ₂ Cl ₇	B(CN) ₄	(C ₂ F ₅) ₂ PO ₂	(CF ₃) ₂ N	Ref.	
[G ₁₁₁₁][neod]	2,85	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Ratamaki, 2017, 5 min	
[G ₁₁₁₁][neod]	2,81	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Ratamaki, 2017, 15min	
[TMGC ₄][I]	1,94	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Venture et al., 2012,15
[TMGC ₇][I]	0,93	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Venture et al., 2012,15
[TMGC ₁₂][I]	1,43	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Venture et al., 2012,15
[(di-h) ₂ DMG][Cl]	0,92	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Venture et al., 2012,15
[(C ₃ O) ₄ DMG][Cl]	2,44	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Venture et al., 2012,15
[(C ₃ O) ₄ DMG][isos t]	1,99	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Ratamaki, 2017, 5 min
[(C ₃ O) ₄ DMG][isos t]	1,82	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Ratamaki, 2017, 15min
[(C ₃ O) ₄ DMG][neod]	2,86	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Ratamaki, 2017, 5 min
[(C ₃ O) ₄ DMG][neod]	2,84	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Ratamaki, 2017, 15min
[C ₄ QUINU][Br]	4,45	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Viboud, 2012
[C ₆ QUINU][Br]	2,32	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Viboud, 2012
[C ₈ QUINU][N(CN) ₂]	2,26	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Viboud, 2012
[Me][1COO]	2,39	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Luis P, 2010,15
[Me][CF ₃ COO]	2,24	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Luis P, 2010,15
[Me][CF ₃ SO ₃]	2,45	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Luis P, 2010,15
[S ₂₂₂][NTf ₂]	3,26	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Merck, 2010
[DBNH][OMs]	4,02	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Rantamäki, 2019, 15

ANEXO I. DATOS DE TOXICIDAD PARA V. FISHERI Y DESCRIPTORES DE LÍQUIDOS IÓNICOS

Abrev.	LC50 (μ M)	Br	Cl	NTf ₂	BF ₄	CF ₃ SO ₃	N(CN) ₂	CH ₃ C OO	CF ₃ CO O	(C ₂ F ₅) ₃ P F ₃	Cap	I	SCN	FeCl ₄	PF ₆	HC OO	2OSO ₃	(2-OPhO) ₂ B	(2- SO ₂ PhCO) N	8OSO ₃	Al ₂ Cl ₇	B(CN) ₄	(C ₂ F ₅) ₂ PO ₂	(CF ₃) ₂ N	Ref.	
[DBUH][OMs]	3,77	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Rantamäki, 2019, 15
5[MTBNH][OMs]	3,96	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Rantamäki, 2019, 15
7[MTBNH][OMs]	3,96	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Rantamäki, 2019, 15
[MTBDH][OMs]	3,86	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Rantamäki, 2019, 15

ANEXO I. DATOS DE TOXICIDAD PARA V. FISHERI Y DESCRIPTORES DE LÍQUIDOS IÓNICOS

Abrev.	LC50 (µM)	dC2-PO4	diC3-PO4	N00SO3	P T S	C5SO6	CSO3	SbF6	T C M	HOSO3	SO3(CF2)3CF3	CO2(CF2)3CF3	CH3(CH2)2COO y el iso	CH3(CH2)COO	NO3	H2PO4	S a c	D o c	[c6:0]	[c8:0]	[c12:0]	[c16:0]	[c18:0]	[c18:1]	Ref.
[im][CF ₃ COO]	4,07	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Luis P, 2010, 15
[im][CH ₃ COO]	3,61	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Luis P, 2010, 15
[im][CF ₃ SO ₃]	3,81	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Luis, P, 2010,15
[im][cap]	2,29	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Luis, P, 2010, 15
[C1im][CF ₃ COO]	3,57	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Luis, P, 2010, 15
[C1im][CF ₃ COO]	4,07	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Luis, P, 2010, 15
[C1im][CF ₃ SO ₃]	4,35	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Luis, P, 2010, 15
[C1im][Cap]	2,13	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Luis, P, 2010, 15
[C1im][HCOO]	2,83	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Luis, P, 2010, 15
[C1im][Cl]	3,94	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Montalban , 2016,15
[C1im][Cl]	4,31	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Montalban , 2016,15
[MOxa][1OSO ₃]	3,00	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Hernández 2015, 10
[C1mim][1OSO ₃]	4,76	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Luis, 2007, 15
[C1mim][NTf ₂]	3,80	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Sonia, 2012,15
[C1mim][NTf ₂]	3,61	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Delgado, 2019
[C2im][NTf ₂]	3,54	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Delgado, 2019
[C2im][Cl]	4,16	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Montalban , 2016, 15

ANEXO I. DATOS DE TOXICIDAD PARA V. FISHERI Y DESCRIPTORES DE LÍQUIDOS IÓNICOS

Abrev.	LC50 (µM)	dC2-PO4	diC3-PO4	N00SO3	P T S	C5SO6	CSO3	SbF6	T C M	HOSO3	SO3(CF2)3CF3	CO2(CF2)3CF3	CH3(CH2)2COO y el iso	CH3(CH2)COO	NO3	H2PO4	S a c	D o c	[c6:0]	[c8:0]	[c12:0]	[c16:0]	[c18:0]	[c18:1]	Ref.
[C ₂ mim][2OSO ₃]	4,02	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Romero, 2008, 15
[C ₂ mim][2OSO ₃]	4,10	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Montalban, 2016, 15
[C ₂ mim][C ₄ OSO ₃]	4,91	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Costa, 2015, 15
[C ₂ mim][Br]	4,27	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Wang, 2015, 15 min
[C ₂ mim][Cl]	4,55	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Luis P, 2007, 15
[C ₂ mim][Cl]	4,80	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Montalban, 2015, 15
[C ₂ mim][[(2-OPhO) ₂ B]	2,98	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	Merck, 2010
[C ₂ mim][[(C ₂ F ₅) ₂ PO ₂]	3,05	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	Merck, 2010
[C ₂ mim][B(CN) ₄]	3,59	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	Merck, 2010
[C ₂ mim][B(CN) ₄]	3,62	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	Viboud, 2012
[C ₂ mim][SCN]	4,57	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Delgado, 2019, 15
[C ₂ mim][SCN]	4,15	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Merck, 2010
[C ₂ mim][CF ₃ COO]	4,28	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Merck, 2010
[C ₂ mim][FeCl ₄]	1,51	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Irabien, 2011,15
[C ₂ mim][PF ₆]	3,92	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Costa, 2017
[C ₂ mim][PF ₆]	4,22	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Montalban, 2016
[C ₂ mim][[(C ₂ F ₅) ₃ PF ₃]	1,36	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Viboud, 2012

ANEXO I. DATOS DE TOXICIDAD PARA V. FISHERI Y DESCRIPTORES DE LÍQUIDOS IÓNICOS

Abrev.	LC50 (μM)	dC2-PO4	diC3-PO4	N00SO3	P T S	C5SO6	CSO3	SbF6	T C M	HOSO3	SO3(CF2)3CF3	CO2(CF2)3CF3	CH3(CH2)2 COO y el iso	CH3(CH2)C OO	NO3	H2PO4	S a c	D o c	[c6:0]	[c8:0]	[c12:0]	[c16:0]	[c18:0]	[c18:1]	Ref.	
[C ₂ mim][1COO]	4,23	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Costa, 2017	
[C ₂ mim][1COO]	3,89	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Montalban, 2016, 15	
[C ₂ mim][1COO]	4,17	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Costa, 2015, 15 VF	
[C ₂ mim][BF ₄]	3,44	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Costa, 2017	
[C ₂ mim][CF ₃ SO ₃]	3,74	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Montalban, 2016, 15	
[C ₂ mim][NTf ₂]	2,93	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Sonia, 2012, 15	
[C ₂ mim][NTf ₂]	2,76	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Sonia, 2012, 15	
[C ₂ mim][NTf ₂]	3,30	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Costa, 2017	
[C ₂ mim][NTf ₂]	2,57	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Ventura, 2011, 15	
[C ₂ mim][NTf ₂]	3,17	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Delgado, 2019, 15	
[C ₂ mim][NTf ₂]	3,62	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Montalban, 2016, 15	
[C ₂ mim][NTf ₂]	3,41	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Costa, 2015, 15	
[C ₂ mim][N(CN) ₂]	4,49	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Delgado, 2019	
[C ₂ mim][SO ₃ (CF ₂) ₃ CF ₃]	3,76	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Stolte, 2019, 30
[C ₂ mim][CO ₂ (CF ₂) ₃ CF ₃]	4,15	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Stolte, 2019, 30
[C ₂ -23mim][NTf ₂]	3,09	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Delgado, 2019, 15
[C ₂ -C ₃ mim][NTf ₂]	2,32	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Sonia, 2012, 15

ANEXO I. DATOS DE TOXICIDAD PARA V. FISHERI Y DESCRIPTORES DE LÍQUIDOS IÓNICOS

Abrev.	LC50 (µM)	dC2-PO4	diC3-PO4	N00SO3	P T S	C5SO6	CSO3	SbF6	T C M	HOSO3	SO3(CF2)3CF3	CO2(CF2)3CF3	CH3(CH2)2COO y el iso	CH3(CH2)COO	NO3	H2PO4	S a c	D o c	[c6:0]	[c8:0]	[c12:0]	[c16:0]	[c18:0]	[c18:1]	Ref.
[C ₂ mim][TCM]	4,24	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Delgado, 2019
[OHC ₂ mim][Gly]	4,76	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Ghanem 2015,15 min.
[OHC ₂ mim][ala]	4,58	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Ghanem 2015,15 min.
[OHC ₂ mim][ser]	4,66	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Ghanem 2015,15 min.
[OHC ₂ mim][pro]	4,78	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Ghanem 2015,15 min.
[C ₃ mim][PF ₆]	3,55	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Sonia, 2012, 15
[C ₃ mim][BF ₄]	3,94	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Ranke, 2004, 30
[HOC ₃ mim][Cl]	3,52	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Hernández, 2015, 10
[HOC ₃ mim][dca]	3,48	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Hernández, 2015, 10
[C ₃ mim][NTf ₂]	2,77	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Ventura, 2010, 15
[C ₃ mim][NTf ₂]	3,00	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Delgado, 2019,15
[C ₃ -23mim][NTf ₂]	2,67	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Delgado, 2019
[C ₃ -C ₃ im][NTf ₂]	1,92	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Sonia, 2012,15
[C ₄ im][CH ₃ COO]	3,32	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Luis P, 2010,15
[C ₄ im][Cap]	2,00	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Luis P, 2010,15
[C ₄ im][CF ₃ SO ₃]	2,77	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Luis P, 2010,15

ANEXO I. DATOS DE TOXICIDAD PARA V. FISHERI Y DESCRIPTORES DE LÍQUIDOS IÓNICOS

Abrev.	LC50 (µM)	dC2-PO4	diC3-PO4	N00SO3	P T S	C5SO6	CSO3	SbF6	T C M	HOSO3	SO3(CF2)3CF3	CO2(CF2)3CF3	CH3(CH2)2COO y el iso	CH3(CH2)COO	NO3	H2PO4	S a c	D o c	[c6:0]	[c8:0]	[c12:0]	[c16:0]	[c18:0]	[c18:1]	Ref.
[C ₄ im][HCOO]	3,19	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Luis P, 2010,15
[C ₄ im][CF ₃ COO]	3,28	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Luis P, 2010,15
[C ₄ mim][PF ₆]	3,07	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Venture 2011, 15
[C ₄ mim][PF ₆]	3,07	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Garcia, 2005, 30
[C ₄ mim][PF ₆]	3,29	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Montalban , 2016,15
[C ₄ mim][Cl]	3,46	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Montalban , 2016, 15
[C ₄ mim][Cl]	3,47	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	stolte, 2007, 30
[C ₄ mim][Cl]	3,34	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	García, 2005, 30
[C ₄ mim][Cl]	3,71	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Docherty, 2005
[C ₄ mim][Cl]	3,39	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Romero,2008
[C ₄ mim][Cl]	3,21	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Petric, 2013, 15
[C ₄ mim][Cl]	3,49	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Mena, 2019, 15
[C ₄ mim][OAC]	3,47	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Mena, 2019, 15
[C ₄ mim][BF ₄]	3,10	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Garcia, 2005,30
[C ₄ mim][BF ₄]	3,55	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Ranke, 2004
[C ₄ mim][BF ₄]	3,20	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Samori, 2010,15
[C ₄ mim][BF ₄]	3,12	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Samori 2007,15

ANEXO I. DATOS DE TOXICIDAD PARA V. FISHERI Y DESCRIPTORES DE LÍQUIDOS IÓNICOS

Abrev.	LC50 (µM)	dC2-PO4	diC3-PO4	N00SO3	P T S	C5SO6	CSO3	SbF6	T C M	HOSO3	SO3(CF2)3CF3	CO2(CF2)3CF3	CH3(CH2)2COO y el iso	CH3(CH2)COO	NO3	H2PO4	S a c	D o c	[c6:0]	[c8:0]	[c12:0]	[c16:0]	[c18:0]	[c18:1]	Ref.
[C4mim][BF4]	3,46	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Montalban, 2016, 15
[C4mim][Br]	3,44	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Wang, 2015, 15 min
[C4mmim][Br]	3,25	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Wang, 2015, 15 min
[C4mim][Br]	3,27	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Garcia, 2005,30
[C4mim][Br]	4,01	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Docherty, 2005
[C4mim][Br]	3,66	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Vivoud 2012
[C4mim][Br]	3,07	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Ranke 2004
[C4mim][Br]	3,53	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Venture, 2012, 15
[C4mim][Br]	3,27	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Koutias, 2019, 5
[C4mim][Br]	3,11	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Koutias, 2019, 15
[C4mim][NTf2]	2,53	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Venture, 2011, 15
[C4mim][NTf2]	3,39	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Couling, 2005, 15
[C4mim][NTf2]	2,46	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Stolte, 2007,30
[C4mim][NTf2]	2,60	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Delgado, 2019,15
[C4mim][NTf2]	2,51	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Montalban, 2016,15
[C4mim][NTf2]	2,95	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Mena, 2019,15
[IC4mim][NTf2]	2,83	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Sonia, 2012,15

ANEXO I. DATOS DE TOXICIDAD PARA V. FISHERI Y DESCRIPTORES DE LÍQUIDOS IÓNICOS

Abrev.	LC50 (µM)	dC2-PO4	diC3-PO4	N00SO3	P T S	C5SO6	CSO3	SbF6	T C M	HOSO3	SO3(CF2)3CF3	CO2(CF2)3CF3	CH3(CH2)2 COO y el iso	CH3(CH2)C OO	NO3	H2PO4	S a c	D o c	[c6:0]	[c8:0]	[c12:0]	[c16:0]	[c18:0]	[c18:1]	Ref.
[C4mim][N(CN)2]	3,44	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Delgado, 2019,15
[C4mim][N(CN)2]	3,67	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Docherty, 2005
[C4mim][N(CN)2]	3,11	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Samori, 2010,15
[C4mim][SCN]	3,41	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Delgado, 2019,15
[C4mim][SCN]	3,42	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Costa, 2017
[C4mim][SCN]	2,37	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Francisco 2015, 10
[C4mim][I]	3,59	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Luis P, 2010
[C4mim][pTS]	3,52	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Ranke, 2004
[C4mim][pTS]	3,32	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Venture, 2012, 15
[C4mim][8OSO3]	1,85	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Matzke 2007, 30
[C4mim][HOSO3]	2,12	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Costa, 2017
[C4mim][HOSO3]	2,12	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Hernandez, 2015,10
[C4mim][1OSO3]	3,57	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Costa, 2017
[C4mim][1OSO3]	3,59	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Venture, 2012, 15
[C4mim][1OSO3]	3,57	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Montalban, 2016, 15
[C4mim][1OSO3]	3,16	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Koutia, 2019,5
[C4mim][1OSO3]	3,04	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Koutia, 2019, 15

ANEXO I. DATOS DE TOXICIDAD PARA V. FISHERI Y DESCRIPTORES DE LÍQUIDOS IÓNICOS

Abrev.	LC50 (µM)	dC2-PO4	diC3-PO4	N00SO3	P T S	C5SO6	CSO3	SbF6	T C M	HOSO3	SO3(CF2)3CF3	CO2(CF2)3CF3	CH3(CH2)2COO y el iso	CH3(CH2)COO	NO3	H2PO4	S a c	D o c	[c6:0]	[c8:0]	[c12:0]	[c16:0]	[c18:0]	[c18:1]	Ref.	
[C4mim][C2OSO3]	3,20	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Hernández, 2015, 10	
[C4Femim][1OSO3]	1,76	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Francisco, 2015, 10
[C4mim][CF3)2N]	3,48	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Matzke, 2007. 30
[C4mim][CF3SO3]	3,60	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Cho
[C4mim][FeCl4]	1,51	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Irabien, 2011, 15
[C4eim][BF4]	2,80	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Ranke, 2004
[C4mim][TCM]	3,35	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Delgado, 2019
[C4mim][C5SO6]	3,48	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Costa, 2017
[C4mim][C5SO6]	3,48	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Montalban, 2016, 15
[C4-23mim][NTf2]	2,36	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Delgado, 2019
[C4-23mim][NTf2]	2,30	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Sonia, 2012, 15
[C4-23mim][NTf2]	2,87	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Montalban, 2016, 15
[C4-C4im][NTf2]	2,11	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Sonia, 2012, 15
[C5mim][BF4]	3,14	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Ranke, 2004
[C5mim][NTf2]	2,03	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Sonia, 2012, 15
[C5C5im][NTf2]	1,79	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Sonia, 2012, 15
[C5mim][Cl]	3,78	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Montalban, 2019, 15

ANEXO I. DATOS DE TOXICIDAD PARA V. FISHERI Y DESCRIPTORES DE LÍQUIDOS IÓNICOS

Abrev.	LC50 (µM)	dC2-PO4	diC3-PO4	N00SO3	P T S	C5SO6	CSO3	SbF6	T C M	HOSO3	SO3(CF2)3CF3	CO2(CF2)3CF3	CH3(CH2)2COO y el iso	CH3(CH2)COO	NO3	H2PO4	S a c	D o c	[c6:0]	[c8:0]	[c12:0]	[c16:0]	[c18:0]	[c18:1]	Ref.
[C6mim][PF6]	2,17	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	García, 2005, 30
[C6mim][PF6]	2,11	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Romero, 2008
[C6mim][PF6]	2,36	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Montalban, 2016,15
[C6mim][Cl]	2,18	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Romero, 2008
[C6mim][Cl]	2,32	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	García et al., 2005,30
[C6mim][Cl]	2,37	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Montalban, 2016,15
[C6mim][BF4]	3,18	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Ranke, 2004, 30
[C6mim][Br]	2,82	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Wang, 2015, 15 min
[C6mmim][Br]	3,06	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Wang, 2015, 15 min
[C6mim][Br]	3,13	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Viboud, 2012
[C6mim][Br]	1,42	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Docherty, 2005
[C6mim][NTf2]	1,71	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Sonia, 2012, 15
[C6mim][NTf2]	1,80	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Delgado, 2019, 15
[C6mim][NTf2]	2,11	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Ventura, 2011, 15
[C6mim][NTf2]	2,05	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Merck, 2010 VF
[C6C6im][NTf2]	1,95	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Sonia, 2012, 15

ANEXO I. DATOS DE TOXICIDAD PARA V. FISHERI Y DESCRIPTORES DE LÍQUIDOS IÓNICOS

Abrev.	LC50 (µM)	dC2-PO4	diC3-PO4	N00SO3	P T S	C5SO6	CSO3	SbF6	T C M	HOSO3	SO3(CF2)3CF3	CO2(CF2)3CF3	CH3(CH2)2 COO y el iso	CH3(CH2)C OO	NO3	H2PO4	S a c	D o c	[c6:0]	[c8:0]	[c12:0]	[c16:0]	[c18:0]	[c18:1]	Ref.
[C6C6im][NTf2]	1,82	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Montalban, 2016, 15
[C6mim][[(C2F5)3PF3]	2,65	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Merck, 2010
[C6mim][[(2-SO2PhCO)N]	2,67	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Merck, 2010
[C6-23mim][Cl]	1,74	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Luis 2007,15
[C6eim][BF4]	2,15	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Ranke, 2004
[C7mim][NTf2]	1,62	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Sonia, 2012,15
[C7mim][BF4]	2,44	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Ranke, 2004
[C8mim][Br]	2,15	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	wang, 2015, 15 min
[C8mim][Br]	2,27	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Viboud,2012
[C8mim][Br]	0,63	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Docherty,2005
[C8mim][Br]	0,71	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Montalban, 2018,15
[C8mim][Br]	1,76	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Wang, 2015, 15 min
[C8mmim][Br]	1,41	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Ranke, 2004
[C8mim][BF4]	0,91	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Montalban, 2016, 15
[C8mim][Cl]	0,69	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Montalban, 2016, 15
[C8mim][Cl]	1,01	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Stolten, 2007, 30
[C8mim][Cl]	1,19	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Garcia, 2005, 30

ANEXO I. DATOS DE TOXICIDAD PARA V. FISHERI Y DESCRIPTORES DE LÍQUIDOS IÓNICOS

Abrev.	LC50 (µM)	dC2-PO4	diC3-PO4	N00SO3	P T S	C5SO6	CSO3	SbF6	T C M	HOSO3	SO3(CF2)3CF3	CO2(CF2)3CF3	CH3(CH2)2 COO y el iso	CH3(CH2)C OO	NO3	H2PO4	S a c	D o c	[c6:0]	[c8:0]	[c12:0]	[c16:0]	[c18:0]	[c18:1]	Ref.
[C8mim][Cl]	0,94	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Romero, 2008
[C8mim][Cl]	0,30	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Petric, 2013, 15
[C8mim][PF6]	0,70	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Romero, 2008
[C8mim][PF6]	0,70	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Ventura, 2011, 15
[C8mim][PF6]	0,95	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	García, 2005, 30
[C8mim][PF6]	1,25	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Montalban, 2016, 15
[C8mim][NTf2]	1,13	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Sonia 2012, 15
[C8mim][NTf2]	0,83	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Merck, 2010
[C8mim][NTf2]	0,99	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Montalban 2016, 15
[C8mim][NTf2]	0,95	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Montalban 2018, 15
[C8mim][SbF6]	0,85	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Montalbán, 2018,15
[C9mim][BF4]	0,72	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Ranke, 2004
[C9mim][Cl]	1,40	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Jafari, 2019
[C10mim][BF4]	-0,18	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Ranke, 2004
[C10mim][Cl]	0,50	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Ranke, 2004
[C10mim][Cl]	-0,23	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Stolten, 2007,30
[C2OCOC10mim][Br]	1,08	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Ventura, 2012,15

ANEXO I. DATOS DE TOXICIDAD PARA V. FISHERI Y DESCRIPTORES DE LÍQUIDOS IÓNICOS

Abrev.	LC50 (µM)	dC2-PO4	diC3-PO4	N00SO3	P T S	C5SO6	CSO3	SbF6	T C M	HOSO3	SO3(CF2)3CF3	CO2(CF2)3CF3	CH3(CH2)2 COO y el iso	CH3(CH2)C OO	NO3	H2PO4	S a c	D o c	[c6:0]	[c8:0]	[c12:0]	[c16:0]	[c18:0]	[c18:1]	Ref.
[C10mim][FeCl4]	-0,43	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Irabien, 2011,15
[C14mim][Cl]	-0,15	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Stolte, 2007,30
[C16mim][Cl]	0,23	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Stolte, 2007,30
[C18mim][Cl]	1,35	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Merck, 2010
[MOC2mim][BF4]	4,15	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Samori, 2007, 15
[MOC2mim][BF4]	3,90	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Samori, 2010,15
[MOC2mim][N(CN)2]	4,06	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Samori, 2007,15
[MOC2mim][N(CN)2]	3,99	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Samori, 2010,15
[MOC2OC2mim][BF4]	3,79	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Samori, 2010, 15
[MOC2OC2mim][Cl]	2,26	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Venture, 2015, 15
[MOC2OC2mim][N(CN)2]	3,88	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Samori, 2010,15
[MOC2OC2OC2mim][BF4]	3,45	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Samori, 2010,15
[MOC2OC2OC2mim][N(CN)2]	3,69	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Samori, 2010,15
[MOC2OC2OC2mim][N(CN)2]	2,65	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Samori, 2010,15
[MOC2mim][Cl]	4,18	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Stolte, 2007,30
[MOC2mim][NTf2]	2,83	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Stolte, 2007,30
[MOC3mim][NTf2]	3,20	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Stolte, 2007,30

ANEXO I. DATOS DE TOXICIDAD PARA V. FISHERI Y DESCRIPTORES DE LÍQUIDOS IÓNICOS

Abrev.	LC50 (µM)	dC2-PO4	diC3-PO4	N00SO3	P T S	C5SO6	CSO3	SbF6	T C M	HOSO3	SO3(CF2)3CF3	CO2(CF2)3CF3	CH3(CH2)2 COO y el iso	CH3(CH2)C OO	NO3	H2PO4	S a c	D o c	[c6:0]	[c8:0]	[c12:0]	[c16:0]	[c18:0]	[c18:1]	Ref.
[EOC1mim][Cl]	4,08	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Stolte, 2007,30
[EOC1mim][NTf2]	3,00	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Stolte, 2007,30
[EOC2mim][Br]	4,28	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Stolte, 2007,30
[EOC2mim][NTf2]	2,95	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Stolte, 2007,30
[ClC2mim][Cl]	2,25	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Stolte 2007
[OHC2mim][I]	3,89	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Stolte, 2007,30
[OHC2mim][Cl]	5,34	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Montalban, 2016,15
[OHC2mim][NTf2]	4,05	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Stolte, 2007,30
[OHC3mim][NTf2]	3,81	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Stolte, 2007,30
[OHC3mim][SO3(CF2)3CF3]	4,06	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Stolte, 2019,30
[OHC3mim][CO2(CF2)3CF3]	4,57	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Stolte, 2019,30
[CNC1mim][NTf2]	3,81	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Stolte, 2007,30
[Phmim][N(CN)2]	2,84	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Delgado, 2019
[ImidC2Phe][Br]	3,49	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Kusuma, 2019,30
[ImidC4Phe][Br]	2,33	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Kusuma, 2019,30
[ImidC6Phe][Br]	1,38	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Kusuma, 2019,30
[ImidC8Phe][Br]	1,29	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Kusuma, 2019,30

ANEXO I. DATOS DE TOXICIDAD PARA V. FISHERI Y DESCRIPTORES DE LÍQUIDOS IÓNICOS

Abrev.	LC50 (µM)	dC2-PO4	diC3-PO4	N00SO3	P T S	C5SO6	CSO3	SbF6	T C M	HOSO3	SO3(CF2)3CF3	CO2(CF2)3CF3	CH3(CH2)2 COO y el iso	CH3(CH2)C OO	NO3	H2PO4	S a c	D o c	[c6:0]	[c8:0]	[c12:0]	[c16:0]	[c18:0]	[c18:1]	Ref.
[Imid10Phe][Br]	0,95	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Kusuma, 2019,30
[ImidC12Phe][Br]	0,92	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Kusuma, 2019,30
[ImidC14Phe][Br]	0,92	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Kusuma, 2019,30
[ImidC16Phe][Br]	>1,80	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Kusuma, 2019,30
[C10C6Omim][Cl]	-0,85	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Nalecz-Jawecki, 2003, 15
[C10cC6Omim][Cl]	-0,85	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Nalecz-Jawecki, 2003, 15
[C10C6Smim][Cl]	-0,66	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Nalecz-Jawecki, 2003, 15
[13mim][NTf2]	3,61	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Delgado, 2019
[Amim][NTf2]	2,94	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Delgado, 2019
[Amim][N(CN)2]	4,31	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Delgado, 2019
[Amim][Cl]	4,36	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Montalban, 2016, 15
[C2-4mPy][NTf2]	2,73	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Delgado, 2019
[C2-4mPy][2OSO3]	3,83	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Montalban, 2016, 15
[OHC3Py][NTf2]	4,01	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Merck, 2010
[C2-4mPy][CO2(CF2)3CF3]	3,68	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Stote, 2019,30
[C2-4mPy][NTf2]	2,73	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Delgado, 2019

ANEXO I. DATOS DE TOXICIDAD PARA V. FISHERI Y DESCRIPTORES DE LÍQUIDOS IÓNICOS

Abrev.	LC50 (µM)	dC2-PO4	diC3-PO4	N00SO3	P T S	C5SO6	CSO3	SbF6	T C M	HOSO3	SO3(CF2)3CF3	CO2(CF2)3CF3	CH3(CH2)2 COO y el iso	CH3(CH2)C OO	NO3	H2PO4	S a c	D o c	[c6:0]	[c8:0]	[c12:0]	[c16:0]	[c18:0]	[c18:1]	Ref.
[C3-3mPy][NTf2]	1,90	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Sonia, 2012,15
[C3-3mPy][PF6]	2,79	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Sonia, 2012,15
[pyC2Phe][Br]	3,34	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Kusuma, 2019,30
[pyC4Phe][Br]	2,28	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Kusuma, 2019,30
[pyC6Phe][Br]	1,40	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Kusuma, 2019,30
[pyC8Phe][Br]	1,29	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Kusuma, 2019,30
[pyC10Phe][Br]	0,94	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Kusuma, 2019,30
[pyC12Phe][Br]	0,89	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Kusuma, 2019,30
[pyC14Phe][Br]	0,96	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Kusuma, 2019,30
[pyC16Phe][Br]	>1,80	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Kusuma, 2019,30
[Py][CF3SO3]	2,52	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Koutinas, 2020, 5
[Py][CF3SO3]	2,52	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Koutinas, 2020, 15
[C4Py][N(CN)2]	3,30	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Docherty, 2005
[C4Py][Br]	3,38	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Wang, 2015, 15 min
[C4Py][Br]	3,72	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Vivoud 2012
[C4Py][Br]	3,39	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Docherty, 2005
[C4Py][Cl]	3,30	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Docherty, 2005

ANEXO I. DATOS DE TOXICIDAD PARA V. FISHERI Y DESCRIPTORES DE LÍQUIDOS IÓNICOS

Abrev.	LC50 (µM)	dC2-PO4	diC3-PO4	N00SO3	P T S	C5SO6	CSO3	SbF6	T C M	HOSO3	SO3(CF2)3CF3	CO2(CF2)3CF3	CH3(CH2)2 COO y el iso	CH3(CH2)C OO	NO3	H2PO4	S a c	D o c	[c6:0]	[c8:0]	[c12:0]	[c16:0]	[c18:0]	[c18:1]	Ref.
[C4Py][Cl]	3,18	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Stolte, 2007,30
[C4Py][Cl]	3,24	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Petric, 2013, 15
[C4Py][Al2Cl7]	3,01	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Merck, 2010
[C4Py][NTf2]	2,44	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Delgado, 2019,15
[C4-3mPy][Br]	3,14	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Wang, 2015, 15 min
[C4-3mPy][Br]	2,75	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Docherty, 2005
[C4-3mPy][N(CN)2]	2,66	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Docherty, 2005
[C4-3mPy][BF4]	3,30	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Costa, 2017
[C4-4mPy][BF4]	2,44	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Montalban, 2016, 15
[C4-4mPy][BF4]	1,51	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Hernández, 2015, 10
[C4-4mPy][BF4]	3,02	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Merck, 2010
[C4-4mPy][BF4]	2,38	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Costa, 2015, 15
[C4-4mPy][Cl]	3,32	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Costa, 2017
[C4-4mPy][Cl]	3,04	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Costa, 2015,15
[C4-4mPy][TCM]	2,68	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Delgado, 2019
[C4-4mPy][NTf2]	2,04	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Delgado, 2019
[C4-23mPy][Br]	2,24	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Wang, 2015, 15 min

ANEXO I. DATOS DE TOXICIDAD PARA V. FISHERI Y DESCRIPTORES DE LÍQUIDOS IÓNICOS

Abrev.	LC50 (µM)	dC2-PO4	diC3-PO4	N00SO3	P T S	C5SO6	CSO3	SbF6	T C M	HOSO3	SO3(CF2)3CF3	CO2(CF2)3CF3	CH3(CH2)2COO y el iso	CH3(CH2)COO	NO3	H2PO4	S a c	D o c	[c6:0]	[c8:0]	[c12:0]	[c16:0]	[c18:0]	[c18:1]	Ref.
[C4-23mPy][Br]	2,93	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Viboud, 2012
[C4-23mPy][CF3SO3]	2,84	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Viboud, 2012
[C4-35mPy][N(CN)2]	2,38	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Docherty, 2005
[C4-35mPy][Br]	2,69	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Docherty, 2005
[C4-35mPy][Br]	2,49	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Viboud, 2012(31)
[C4-35mPy][SCN]	2,25	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Viboud, 2012(31)
[C4-35mPy][NTf2]	1,86	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Viboud, 2012(31)
[C4-235mPy][Br]	2,37	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Wang, 2015, 15 min
[C4-235mPy][Br]	2,48	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Viboud, 2012(31)
[C4-235mPy][NTf2]	1,56	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Viboud, 2012(31)
[C4-4C1NPY][Br]	2,52	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Stolte, 2007,30
[C4-4C1NPY][Br]	2,32	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Couling, 2005, 15
[C4-4C1NPY][Cl]	2,52	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Stolte, 2007, 30
[C4-4C1NPY][NTf2]	1,85	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Stolte, 2007, 30
[C6Py][Br]	2,69	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Wang, 2015, 15 min
[C6Py][Br]	2,85	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Viboud, 2012
[C6-3mPy][Cl]	2,40	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Cao, 2018

ANEXO I. DATOS DE TOXICIDAD PARA V. FISHERI Y DESCRIPTORES DE LÍQUIDOS IÓNICOS

Abrev.	LC50 (µM)	dC2-PO4	diC3-PO4	N00SO3	P T S	C5SO6	CSO3	SbF6	T C M	HOSO3	SO3(CF2)3CF3	CO2(CF2)3CF3	CH3(CH2)2 COO y el iso	CH3(CH2)C OO	NO3	H2PO4	S a c	D o c	[c6:0]	[c8:0]	[c12:0]	[c16:0]	[c18:0]	[c18:1]	Ref.
[C6-4mPy][Br]	2,11	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Wang, 2015, 15 min
[C6-4mPy][Br]	2,07	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Docherty, 2005
[C6-4mPy][Cl]	1,44	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Luis, 2007,15
[C6-4C1NPY][NTf2]	1,38	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Merck, 2010
[C8Py][Cl]	1,69	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Merck, 2010
[C8Py][SbF6]	1,13	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Montalbán, 2018
[C8Py][Br]	1,69	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Wang, 2015, 15 min
[C8Py][Br]	1,89	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Viboud, 2012
[C8Py][Br]	1,27	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Montalban, 2018,15
[C8Py][NTf2]	1,51	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Montalban, 2018,15
[C8-3mPy][Br]	1,36	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Wang, 2015, 15 min
[C8-3mPy][Br]	0,79	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Docherty, 2005
[C8-23mPy][Br]	1,08	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Viboud, 2012(31)
[C8-35mPy][Br]	1,12	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Viboud, 2012
[C8-35mPy][NTf2]	0,36	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Papaiconomou, 2010
[C8-35mPy][BF4]	0,97	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Viboud, 2012
[C8-2m5ePy][Br]	0,59	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Viboud, 2012

ANEXO I. DATOS DE TOXICIDAD PARA V. FISHERI Y DESCRIPTORES DE LÍQUIDOS IÓNICOS

Abrev.	LC50 (µM)	dC2-PO4	diC3-PO4	N00SO3	P T S	C5SO6	CSO3	SbF6	T C M	HOSO3	SO3(CF2)3CF3	CO2(CF2)3CF3	CH3(CH2)2COO y el iso	CH3(CH2)COO	NO3	H2PO4	S a c	D o c	[c6:0]	[c8:0]	[c12:0]	[c16:0]	[c18:0]	[c18:1]	Ref.
[C8-235mPy][Br]	0,61	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Wang, 2015, 15 min
[C8-235mPy][Br]	0,62	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Viboud, 2012(31)
[C8-235mPy][NTf2]	0,62	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Viboud, 2012(31)
[C12SmPy][Cl]	-0,54	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Nalecz-Jawecki, 2003
[3C1-C12SmPy][Cl]	-0,77	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Nalecz-Jawecki, 2003
[35C1-C12SmPy][Cl]	-0,89	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Nalecz-Jawecki, 2003
[N00-2MO-2MO][N00SO3]	4,03	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Cho
[N000-2OH][Ehexato]	2,62	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Viesca, 2020, 15 min
[N001-2OH][Ehexato]	2,35	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Viesca, 2020, 15 min
[N011-2OH][Ehexato]	2,31	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Viesca, 2020, 15 min
[N000-2OH][DBS]	2,08	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Viesca, 2020, 15 min
[N001-2OH][DBS]	2,00	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Viesca, 2020, 15 min
[N011-2OH][DBS]	1,95	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Viesca, 2020, 15 min
[N111-2OH][1COO]	4,34	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Costa, 2015,15
[N111-2OH][1COO]	3,67	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Mena, 2019,15

ANEXO I. DATOS DE TOXICIDAD PARA V. FISHERI Y DESCRIPTORES DE LÍQUIDOS IÓNICOS

Abrev.	LC50 (µM)	dC2-PO4	diC3-PO4	N00SO3	P T S	C5SO6	CSO3	SbF6	T C M	HOSO3	SO3(CF2)3CF3	CO2(CF2)3CF3	CH3(CH2)2 COO y el iso	CH3(CH2)C OO	NO3	H2PO4	S a c	D o c	[c6:0]	[c8:0]	[c12:0]	[c16:0]	[c18:0]	[c18:1]	Ref.
[N111-2OH][H2PO4]	3,76	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	Hernández, 2015,10
[N111-2OH][NTf2]	4,15	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Couling, 2005, 15
[N111-2OH][NTf2]	3,08	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Mena, 2019,15
[N111-2OH][Cl]	6,17	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Viboud, 2012
[N111-2OH][Cl]	3,64	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Mena, 2019,15
[N111-2OH][SO3(CF2)3CF3]	4,19	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Stolen, 2019, 30
[N111-2OH][CO2(CF2)3CF3]	4,52	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Stolen, 2019, 30
[coliC2Phe][Br]	3,46	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Kusuma, 2019,30
[coliC4Phe][Br]	2,34	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Kusuma, 2019,30
[coliC6Phe][Br]	1,51	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Kusuma, 2019,30
[coliC8Phe][Br]	1,62	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Kusuma, 2019,30
[coliC10Phe][Br]	1,04	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Kusuma, 2019,30
[coliC12Phe][Br]	0,90	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Kusuma, 2019,30
[coliC14Phe][Br]	0,90	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Kusuma, 2019,30
[coliC16Phe][Br]	>1,80	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Kusuma, 2019,30
[Chol][DHCit]	1,99	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Ventura, 2014, 5min

ANEXO I. DATOS DE TOXICIDAD PARA V. FISHERI Y DESCRIPTORES DE LÍQUIDOS IÓNICOS

Abrev.	LC50 (µM)	dC2-PO4	diC3-PO4	N00SO3	P T S	C5SO6	CSO3	SbF6	T C M	HOSO3	SO3(CF2)3CF3	CO2(CF2)3CF3	CH3(CH2)2 COO y el iso	CH3(CH2)C OO	NO3	H2PO4	S a c	D o c	[c6:0]	[c8:0]	[c12:0]	[c16:0]	[c18:0]	[c18:1]	Ref.	
[Chol][DHCit]	2,08	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Ventura, 2014, 15min	
[Chol][DHCit]	2,10	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Ventura, 2014, 30min	
[Chol][CI]	2,77	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Ventura, 2014, 5min	
[Chol][CI]	2,77	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Ventura, 2014, 15min	
[Chol][CI]	2,73	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Ventura, 2014, 30min	
[Bzchol][CI]	3,44	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Ventura, 2014, 5min	
[Bzchol][CI]	3,23	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Ventura, 2014, 15min	
[Bzchol][CI]	3,22	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Ventura, 2014, 30min	
[Chol][Bit]	1,91	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Ventura, 2014, 5min	
[Chol][Bit]	2,00	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Ventura, 2014, 15min	
[Chol][Bit]	1,98	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Ventura, 2014, 30min	
[Chol][But]	3,64	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Ventura, 2014, 5min
[Chol][But]	3,65	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Ventura, 2014, 15min
[Chol][But]	3,66	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Ventura, 2014, 30min

ANEXO I. DATOS DE TOXICIDAD PARA V. FISHERI Y DESCRIPTORES DE LÍQUIDOS IÓNICOS

Abrev.	LC50 (μM)	dC2-PO4	diC3-PO4	N00SO3	P T S	C5SO 6	CSO3	SbF 6	T C M	HOSO 3	SO3(CF2)3CF3	CO2(CF2)3CF3	CH3(CH2)2 COO y el iso	CH3(CH2)C OO	NO 3	H2PO 4	S a c	D o c	[c6:0]	[c8:0]	[c12:0]	[c16:0]	[c18:0]	[c18:1]	Ref.
[Chol][Prop]	3,58	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Ventura, 2014, 5min
[Chol][Prop]	3,47	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Ventura, 2014, 15min
[Chol][Prop]	3,44	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Ventura, 2014, 30min
[Chol][Ac]	3,87	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Ventura, 2014, 5min
[Chol][Ac]	3,72	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Ventura, 2014, 15min
[Chol][Ac]	3,62	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Ventura, 2014, 30min
[Chol][Sal]	3,26	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Ventura, 2014, 5min
[Chol][Sal]	3,14	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Ventura, 2014, 15min
[Chol][Sal]	2,99	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Ventura, 2014, 30min
[Chol][Sal]	2,95	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Sitra 2015, 5 min
[Chol][Sal]	2,80	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Sitra 2015, 15 min
[Chol][Sal]	2,65	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Sitra 2015, 30 min
[Chol][gal]	4,13	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Sitra 2015, 5 min
[Chol][gal]	3,85	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Sitra 2015, 15 min
[Chol][gal]	3,78	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Sitra 2015, 30 min

ANEXO I. DATOS DE TOXICIDAD PARA V. FISHERI Y DESCRIPTORES DE LÍQUIDOS IÓNICOS

Abrev.	LC50 (µM)	dC2-PO4	diC3-PO4	N00SO3	P T S	C5SO6	CSO3	SbF6	T C M	HOSO3	SO3(CF2)3CF3	CO2(CF2)3CF3	CH3(CH2)2 COO y el iso	CH3(CH2)C OO	NO3	H2PO4	S a c	D o c	[c6:0]	[c8:0]	[c12:0]	[c16:0]	[c18:0]	[c18:1]	Ref.	
[Chol][caf]	3,49	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Sitra 2015, 5 min	
[Chol][caf]	3,46	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Sitra 2015, 15 min
[Chol][caf]	3,41	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Sitra 2015, 30 min
[Chol][val]	3,46	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Sitra 2015, 5 min
[Chol][val]	3,58	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Sitra 2015, 15 min
[Chol][val]	3,52	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Sitra 2015, 30 min
[Chol][sig]	3,18	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Sitra 2015, 5 min
[Chol][sig]	3,18	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Sitra 2015, 15 min
[Chol][sig]	3,16	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Sitra 2015, 30 min
[Chol][neod]	2,75	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Ratamaki 2017, 5 min
[Chol][neod]	2,72	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Ratamaki 2017, 15 min
[Chol][dec]	2,00	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Ratamaki 2017, 5 min
[Chol][dec]	2,00	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Ratamaki 2017, 15 min
[Chol][isost]	2,11	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Ratamaki 2017, 5 min
[Chol][isost]	1,87	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Ratamaki 2017, 15 min
[N000-2OH][HCO2]	3,82	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Petric, 2013, 15

ANEXO I. DATOS DE TOXICIDAD PARA V. FISHERI Y DESCRIPTORES DE LÍQUIDOS IÓNICOS

Abrev.	LC50 (µM)	dC2-PO4	diC3-PO4	N00SO3	P T S	C5SO6	CSO3	SbF6	T C M	HOSO3	SO3(CF2)3CF3	CO2(CF2)3CF3	CH3(CH2)2 COO y el iso	CH3(CH2)C OO	NO3	H2PO4	S a c	D o c	[c6:0]	[c8:0]	[c12:0]	[c16:0]	[c18:0]	[c18:1]	Ref.
[N002OH-2OH][HCO2]	3,72	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Petric, 2013, 15
[N002OH-2OH][CCO2]	4,03	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Petric, 2013, 15
[N002OH-2OH][C2CO2]	3,56	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Petric, 2013, 15
[N002OH-2OH][C3CO2]	3,62	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Petric, 2013, 15
[N002OH-2OH][C3CO2]	3,64	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Petric, 2013, 15
[N002OH-2OH][C4CO2]	3,23	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Petric, 2013, 15
[N02OH2OH-2OH][C3CO2]	3,32	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Petric, 2013, 15
[N020H2OH-2OH][C4CO2]	3,26	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Petric, 2013, 15
[N000-2OH][C3CO2]	4,18	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Petric, 2013, 15
[N000-2C][NO3]	4,32	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Motalban, 2016, 15
[N4,4,4,4][C]	3,39	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Costa, 2015, 15
[N4,4,4,4][I]	3,27	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Koutias, 2019,5
[N4,4,4,4][I]	2,93	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Koutias, 2019, 15
[N4,4,4,4][pf6]	2,45	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Koutias, 2019, 15
[N4,4,4,4][pf6]		0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Koutias, 2019, 15
[N888-1][c6:0]	2,14	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	Oulego, 2019, 15
[N888-1][c8:0]	2,06	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	Oulego, 2019, 15

ANEXO I. DATOS DE TOXICIDAD PARA V. FISHERI Y DESCRIPTORES DE LÍQUIDOS IÓNICOS

Abrev.	LC50 (µM)	dC2-PO4	diC3-PO4	N00SO3	P T S	C5SO6	CSO3	SbF6	T C M	HOSO3	SO3(CF2)3CF3	CO2(CF2)3CF3	CH3(CH2)2 COO y el iso	CH3(CH2)C OO	NO3	H2PO4	S a c	D o c	[c6:0]	[c8:0]	[c12:0]	[c16:0]	[c18:0]	[c18:1]	Ref.
[N888-1][c12:0]	1,98	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	Oulego, 2019, 15
[N888-1][c16:0]	1,86	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	Oulego, 2019, 15
[N888-1][c18:0]	1,80	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	Oulego, 2019, 15
[N888-1][c18:1]	1,25	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	Oulego, 2019, 15
[N111-12][Br]	-0,11	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Garcia, 2001, 30
[N111-14][Br]	-0,08	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Garcia, 2001, 30
[N111-16][Br]	0,24	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Garcia, 2001, 30
[N111-16][Cl]	0,40	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Merck, 2010
[N112-1EOCO][NTf2]	3,32	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Merck, 2010
[N112-2MO][NTf2]	3,35	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Merck, 2010
[N1124][NTf2]	3,21	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Stolte, 2007,30
[N118-1C10ox][Cl]	-0,09	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Nalecz-Jawecki, 2003,15
[N11-12-1Ph][Br]	-0,33	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Garcia, 2001,30
[N11-12-1Ph][Cl]	-0,23	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Merck, 2010
[N11-12-1C8O][Cl]	0,39	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Nalecz-Jawecki, 2003,15
[N11-12-1C9O][Cl]	0,38	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Nalecz-Jawecki, 2003,15

ANEXO I. DATOS DE TOXICIDAD PARA V. FISHERI Y DESCRIPTORES DE LÍQUIDOS IÓNICOS

Abrev.	LC50 (µM)	dC2-PO4	diC3-PO4	N00SO3	P T S	C5SO6	CSO3	SbF6	T C M	HOSO3	SO3(CF2)3CF3	CO2(CF2)3CF3	CH3(CH2)2 COO y el iso	CH3(CH2)C OO	NO3	H2PO4	S a c	D o c	[c6:0]	[c8:0]	[c12:0]	[c16:0]	[c18:0]	[c18:1]	Ref.
[N11-12-1C10O][Cl]	0,60	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Nalecz-Jawecki, 2003, 15
[N11-14-1Ph][Br]	-0,39	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Garcia, 2001, 30
[N11-16-1Ph][Br]	0,11	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Garcia, 2001, 30
[N11-16-1Ph][Cl]	-0,31	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Merck, 2010
[N11-Ph-1C8O][Cl]	-0,70	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Nalecz-Jawecki, 2003, 15
[N11-Ph-1C10O][Cl]	-0,62	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Nalecz-Jawecki, 2003, 15
[N11-Ph-1C12O][Cl]	-0,38	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Nalecz-Jawecki, 2003, 15
[N2220][ch3so4]	5,41	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Ratamaki, 2019, 15
[N2226][Br]	2,46	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Couling, 2005
[N4444][Br]	3,27	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Couling, 2005
[C8mPyrr][SbF6]	1,69	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Montalbán, 2018
[C3mPyrr][PF6]	4,01	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Sonia, 2012, 15
[C3mPyrr][NTf2]	3,29	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Sonia, 2012, 15
[C4mPyrr][NTf2]	2,54	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Stolten, 2007, 30
[C4mPyrr][NTf2]	2,72	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Viboud, 2012
[C4mPyrr][(C2F5)3PF3]	1,70	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Merck, 2010

ANEXO I. DATOS DE TOXICIDAD PARA V. FISHERI Y DESCRIPTORES DE LÍQUIDOS IÓNICOS

Abrev.	LC50 (µM)	dC2-PO4	diC3-PO4	N00SO3	P T S	C5SO6	CSO3	SbF6	T C M	HOSO3	SO3(CF2)3CF3	CO2(CF2)3CF3	CH3(CH2)2COO y el iso	CH3(CH2)COO	NO3	H2PO4	S a c	D o c	[c6:0]	[c8:0]	[c12:0]	[c16:0]	[c18:0]	[c18:1]	Ref.
[C4mPyrr][Br]	4,40	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Viboud, 2012
[C4mPyrr][Br]	4,00	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Wang, 2015, 15 min
[C4mPyrr][N(CN)2]	4,26	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Viboud, 2012
[C4mPyrr][N(CN)2]	4,34	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Hernández, 2015, 10
[C4mPyrr][CF3SO3]	3,98	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Viboud, 2012
[C6mPyrr][Cl]	2,99	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Luis, 2007, 15
[C6mPyrr][NTf2]	2,40	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Merck, 2010
[C6mPyrr][Br]	3,19	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Viboud, 2012
[C6mPyrr][Br]	2,95	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Wang, 2015, 15 min
[C8mPyrr][Cl]	2,17	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Viboud, 2012
[C8mPyrr][NTf2]	1,58	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Viboud, 2012
[C8mPyrr][NTf2]	1,53	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Montalban, 2018,15
[C8mPyrr][SbF6]	1,69	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Montalban, 2018,15
[C8mPyrr][Br]	2,26	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Viboud, 2012
[C8mPyrr][Br]	2,15	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Wang, 2015, 15 min
[C8-3mPyrr][Br]	1,66	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Montalban, 2018,15

ANEXO I. DATOS DE TOXICIDAD PARA V. FISHERI Y DESCRIPTORES DE LÍQUIDOS IÓNICOS

Abrev.	LC50 (µM)	dC2-PO4	diC3-PO4	N00SO3	P T S	C5SO6	CSO3	SbF6	T C M	HOSO3	SO3(CF2)3CF3	CO2(CF2)3CF3	CH3(CH2)2 COO y el iso	CH3(CH2)C OO	NO3	H2PO4	S a c	D o c	[c6:0]	[c8:0]	[c12:0]	[c16:0]	[c18:0]	[c18:1]	Ref.
[EO-OC2mPyrr][NTf2]	3,23	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Merck, 2010
[EOC2mPyrr][NTf2]	2,97	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Merck, 2010
[OHC3mPyrr][NTf2]	3,91	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Merck, 2010
[C4-C3CNPyrr][Br]	5,33	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Viboud, 2012
[C2mMorp][Br]	5,21	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Pretti, 2011,30
[C4mMorp][Br]	4,87	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Pretti, 2011,30
[C4mMorp][NTf2]	2,49	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Stolte, 2007,30
[C4mMorp][Br]	5,45	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Viboud, 2012
[C4mMorp][N(CN)2]	4,89	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Viboud, 2012
[C4mMorp][CF3SO3]	4,40	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Viboud, 2012
[C6mMorp][Br]	3,94	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Pretti, 2011,30
[C8mMorp][Br]	2,56	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Viboud, 2012
[C8mMorp][Br]	2,38	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Pretti, 2011,30
[C10mMorp][Br]	1,30	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Pretti, 2011,30
[EOC1mMorp][NTf2]	3,38	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Cho
[4,5][oac]	4,64	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Ramataki, 2019,15
[5,5][oac]	4,08	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Ramataki, 2019,15

ANEXO I. DATOS DE TOXICIDAD PARA V. FISHERI Y DESCRIPTORES DE LÍQUIDOS IÓNICOS

Abrev.	LC50 (µM)	dC2-PO4	diC3-PO4	N00SO3	P T S	C5SO6	CSO3	SbF6	T C M	HOSO3	SO3(CF2)3CF3	CO2(CF2)3CF3	CH3(CH2)2 COO y el iso	CH3(CH2)C OO	NO3	H2PO4	S a c	D o c	[c6:0]	[c8:0]	[c12:0]	[c16:0]	[c18:0]	[c18:1]	Ref.
[5,6][oac]	4,02	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Ramataki, 2019,15
[C3mPip][PF6]	3,59	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Sonia, 2012,15
[C3mPip][NTf2]	3,01	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Sonia, 2012,15
[C4mPip][Br]	3,84	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Wang, 2015, 15 min
[C4mPip][Br]	4,22	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Viboud, 2012
[C4mPip][Br]	4,27	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Stolte, 2007,30
[C4mPip][NTf2]	2,56	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Stolte, 2007,30
[C6mPip][Br]	2,76	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Wang, 2015, 15 min
[C6mPip][Br]	2,94	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Viboud, 2012
[C8mPip][Br]	1,91	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Wang, 2015, 15 min
[C8mPip][Br]	2,00	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Viboud, 2012
[C4ePip][Br]	3,66	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Wang, 2015, 15 min
[C4ePip][Br]	3,96	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Viboud, 2012
[C8ePip][Br]	1,79	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Wang, 2015, 15 min
[C8ePip][Br]	1,80	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Viboud, 2012
[C8ePip][I]	2,20	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Viboud, 2012

ANEXO I. DATOS DE TOXICIDAD PARA V. FISHERI Y DESCRIPTORES DE LÍQUIDOS IÓNICOS

Abrev.	LC50 (µM)	dC2-PO4	diC3-PO4	N00SO3	P T S	C5SO6	CSO3	SbF6	T C M	HOSO3	SO3(CF2)3CF3	CO2(CF2)3CF3	CH3(CH2)2 COO y el iso	CH3(CH2)C OO	NO3	H2PO4	S a c	D o c	[c6:0]	[c8:0]	[c12:0]	[c16:0]	[c18:0]	[c18:1]	Ref.
[C8ePip][SCN]	1,50	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Viboud, 2012
[C4TROP][Br]	5,36	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Viboud, 2012
[C4TROP][I]	4,74	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Viboud, 2012
[C4TROP][NTf2]	2,61	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Viboud, 2012
[C4TROP][SCN]	4,07	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Viboud, 2012
[C8TROP][NTf2]	2,17	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Jafari, 2019
[C8TROP][N(CN)2]	2,52	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Viboud, 2012
[C8TROP][BF4]	2,77	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Viboud, 2012
[Bu3NC4][Sac]	3,11	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	Parajo, 2019,15
[Bu3NC4][Sac]	2,92	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	Parajo, 2019,30
[Bu3NC2][Sac]	2,36	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	Parajo, 2019,15
[Bu3NC2][Sac]	2,18	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	Parajo, 2019,30
[Me3NC2OC12][doc]	0,69	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	Parajo, 2019,15
[Me3NC2OC12][doc]	0,65	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	Parajo, 2019,30
[Me3NC2OC12][SCN]	0,35	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Parajo, 2019,15
[Me3NC2OC12][SCN]	0,25	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Parajo, 2019,30
[Me3NC2OC14][doc]	0,28	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	Parajo, 2019,15

ANEXO I. DATOS DE TOXICIDAD PARA V. FISHERI Y DESCRIPTORES DE LÍQUIDOS IÓNICOS

Abrev.	LC50 (μM)	dC2-PO4	diC3-PO4	N00SO3	P T S	C5SO6	CSO3	SbF6	T C M	HOSO3	SO3(CF2)3CF3	CO2(CF2)3CF3	CH3(CH2)2COO y el iso	CH3(CH2)COO	NO3	H2PO4	S a c	D o c	[c6:0]	[c8:0]	[c12:0]	[c16:0]	[c18:0]	[c18:1]	Ref.
[Me3NC2OC14][doc]	0,27	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	Parajo, 2019,30
[Me3NC2OC14][S CN]	0,47	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Parajo, 2019,15
[Me3NC2OC14][S CN]	0,38	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Parajo, 2019,30
[Bu3pC2][Sac]	1,54	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	Parajo, 2019,15
[Bu3pC2][Sac]	1,47	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	Parajo, 2019,30
[Bu3pC4][Sac]	2,12	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	Parajo, 2019,15
[Bu3pC4][Sac]	1,82	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	Parajo, 2019,30
[P2444][dC2-PO4]	3,07	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Couling, 2005,15
[P2444][diC3-PO4]	3,07	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Couling, 2005
[P4444][Br]	2,71	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Couling, 2005,15
[P4444][Br]	2,71	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Venture, 2012, 15
[Pi4441][Tosilate]	2,64	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Venture, 2012, 15
[Pi4441][Tosilate]	2,44	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Hernández, 2015, 10
[P4441][CH3SO3]	2,86	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Venture, 2012, 15
[P4441][CH3SO3]	2,64	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Hernández, 2015, 10
[P666-14][Br]	3,41	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Couling, 2005,15
[P666-14][Br]	1,05	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Ventura, 2012, 15

ANEXO I. DATOS DE TOXICIDAD PARA V. FISHERI Y DESCRIPTORES DE LÍQUIDOS IÓNICOS

Abrev.	LC50 (μM)	dC2-PO4	diC3-PO4	N00SO3	P T S	C5SO6	CSO3	SbF6	T C M	HOSO3	SO3(CF2)3CF3	CO2(CF2)3CF3	CH3(CH2)2COO y el iso	CH3(CH2)COO	NO3	H2PO4	S a c	D o c	[c6:0]	[c8:0]	[c12:0]	[c16:0]	[c18:0]	[c18:1]	Ref.	
[P666-14][Cl]	1,14	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Ventura, 2012, 15	
[P666-14][CH3SO3]	1,11	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Ventura, 2012, 15
[P666-14][(C2F5)3PF3]	1,70	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Merck, 2010
[P888-1][oac]	0,28	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Rantamäki, 2019, 15
[C2mDABCO][Br]	5,58	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Pretti, 2011,30
[C4mDABCO][Br]	4,87	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Pretti, 2011,30
[C6mDABCO][Br]	3,69	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Pretti, 2011,30
[C8mDABCO][Br]	2,35	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Pretti, 2011,30
[C10mDABCO][Br]	1,26	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Pretti, 2011,30
[G1111][CH3SO3]	3,96	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Ratamaki, 2019,15
[G1111][CF3COO]	0,47	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Luis P, 2010,15
[G1111][1COO]	3,17	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Luis P, 2010,15
[G1111][CF3SO3]	3,52	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Luis P, 2010,15
[G1111][Cap]	2,29	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Luis P, 2010,15
[G1111][Isost]	1,97	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Ratamaki, 2017, 5 min
[G1111][Isost]	1,79	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Ratamaki, 2017, 15min
[G1111][neod]	2,85	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Ratamaki, 2017, 5 min

ANEXO I. DATOS DE TOXICIDAD PARA V. FISHERI Y DESCRIPTORES DE LÍQUIDOS IÓNICOS

Abrev.	LC50 (µM)	dC2-PO4	diC3-PO4	N00SO3	P T S	C5SO6	CSO3	SbF6	T C M	HOSO3	SO3(CF2)3CF3	CO2(CF2)3CF3	CH3(CH2)2 COO y el iso	CH3(CH2)C OO	NO3	H2PO4	S a c	D o c	[c6:0]	[c8:0]	[c12:0]	[c16:0]	[c18:0]	[c18:1]	Ref.
[G1111][neod]	2,81	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Ratamaki, 2017, 15min
[TMGC4][I]	1,94	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Venture et al., 2012,15
[TMGC7][I]	0,93	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Venture et al., 2012,15
[TMGC12][I]	1,43	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Venture et al., 2012,15
[(di-h)2DMG][C]	0,92	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Venture et al., 2012,15
[(C3O)4DMG][C]	2,44																								Venture et al., 2012,15
[(C3O)4DMG][isost]	1,99	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Ratamaki, 2017, 5 min
[(C3O)4DMG][isost]	1,82	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Ratamaki, 2017, 15min
[(C3O)4DMG][neod]	2,86	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Ratamaki, 2017, 5 min
[(C3O)4DMG][neod]	2,84	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Ratamaki, 2017, 15min
[C4QUINU][Br]	4,45	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Viboud, 2012
[C8QUINU][Br]	2,32	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Viboud, 2012
[C8QUINU][N(CN)2]	2,26	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Viboud, 2012
[Me][1COO]	2,39	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Luis P, 2010,15
[Me][CF3COO]	2,24	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Luis P, 2010,15

ANEXO I. DATOS DE TOXICIDAD PARA V. FISHERI Y DESCRIPTORES DE LÍQUIDOS IÓNICOS

Abrev.	LC50 (µM)	dC2-PO4	diC3-PO4	N00SO3	P T S	C5SO 6	CSO3	SbF 6	T C M	HOSO 3	SO3(CF2)3CF3	CO2(CF2)3CF3	CH3(CH2)2 COO y el iso	CH3(CH2)C OO	NO 3	H2PO 4	S a c	D o c	[c6:0]	[c8:0]	[c12:0]	[c16:0]	[c18:0]	[c18:1]	Ref.	
[MeI][CF3SO3]	2,45	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Luis P, 2010, 15	
[S222][NTf2]	3,26	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Merck, 2010
[DBNH][OMs]	4,02	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Rantamäki , 2019, 15
[DBUH][OMs]	3,77	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Rantamäki , 2019, 15
5[MTBNH][OMs]	3,96	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Rantamäki , 2019, 15
7[MTBNH][OMs]	3,96	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Rantamäki , 2019, 15
[MTBDH][OMs]	3,86	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Rantamäki , 2019, 15

ANEXO I. DATOS DE TOXICIDAD PARA V. FISHERI Y DESCRIPTORES DE LÍQUIDOS IÓNICOS

Abrev.	LC50 (µM)	[DHCit]	[Bit]	[Sal]	[Gal]	[Caf]	[Val]	[Sig]	[Gly]	[Ala]	[Ser]	[Pro]	[Neod]	[Dec]	[isost]	[Ehexato]	[DBS]	Ref.
[im][CF3COO]	4,07	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Luis P, 2010, 15
[im][CH3COO]	3,61	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Luis P, 2010, 15
[im][CF3SO3]	3,81	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Luis, P, 2010,15
[im][cap]	2,29	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Luis, P, 2010, 15
[C1im][CF3COO]	3,57	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Luis, P, 2010, 15
[C1im][CF3COO]	4,07	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Luis, P, 2010, 15
[C1im][CF3SO3]	4,35	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Luis, P, 2010, 15
[C1im][Cap]	2,13	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Luis, P, 2010, 15
[C1im][HCOO]	2,83	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Luis, P, 2010, 15
[C1im][Cl]	3,94	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Montalban, 2016,15
[C1Cim][Cl]	4,31	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Montalban, 2016,15
[MOxa][1OSO3]	3,00	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Hernández 2015, 10
[C1mim][1OSO3]	4,76	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Luis, 2007, 15
[C1mim][NTf2]	3,80	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Sonia, 2012,15
[C1mim][NTf2]	3,61	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Delgado, 2019
[C2im][NTf2]	3,54	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Delgado, 2019
[C2im][Cl]	4,16	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Montalban, 2016, 15
[C2mim][2OSO3]	4,02	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Romero, 2008, 15
[C2mim][2OSO3]	4,10	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Montalban, 2016, 15

ANEXO I. DATOS DE TOXICIDAD PARA V. FISHERI Y DESCRIPTORES DE LÍQUIDOS IÓNICOS

Abrev.	LC50 (μM)	[DHCit]	[Bit]	[Sal]	[Gal]	[Caf]	[Val]	[Sig]	[Gly]	[Ala]	[Ser]	[Pro]	[Neod]	[Dec]	[isost]	[Ehexato]	[DBS]	Ref.
[C2mim][C1OSO3]	4,91	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Costa, 2015, 15
[C2mim][Br]	4,27	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Wang, 2015, 15
[C2mim][Cl]	4,55	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Luis P, 2007, 15
[C2mim][Cl]	4,80	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Montalban, 2015, 15
[C2mim][(2-OPhO)2B]	2,98	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Merck, 2010
[C2mim][(C2F5)2PO2]	3,05	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Merck, 2010
[C2mim][B(CN)4]	3,59	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Merck, 2010
[C2mim][B(CN)4]	3,62	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Viboud, 2012
[C2mim][SCN]	4,57	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Delgado, 2019, 15
[C2mim][SCN]	4,15	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Merck, 2010
[C2mim][CF3COO]	4,28	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Merck, 2010
[C2mim][FeCl4]	1,51	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Irabien, 2011,15
[C2mim][PF6]	3,92	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Costa, 2017
[C2mim][PF6]	4,22	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Montalban, 2016
[C2mim][(C2F5)3PF3]	1,36	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Viboud, 2012
[C2mim][1COO]	4,23	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Costa, 2017
[C2mim][1COO]	3,89	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Montalban, 2016, 15
[C2mim][1COO]	4,17	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Costa, 2015, 15
[C2mim][BF4]	3,44	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Costa, 2017

ANEXO I. DATOS DE TOXICIDAD PARA V. FISHERI Y DESCRIPTORES DE LÍQUIDOS IÓNICOS

Abrev.	LC50 (μM)	[DHCit]	[Bit]	[Sal]	[Gal]	[Caf]	[Val]	[Sig]	[Gly]	[Ala]	[Ser]	[Pro]	[Neod]	[Dec]	[isost]	[Ehexato]	[DBS]	Ref.
[C2mim][CF3SO3]	3,74	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Montalban, 2016, 15
[C2mim][NTf2]	2,93	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Sonia, 2012, 15
[C2mim][NTf2]	2,76	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Sonia, 2012, 15
[C2mim][NTf2]	3,30	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Costa, 2017
[C2mim][NTf2]	2,57	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Ventura, 2011, 15
[C2mim][NTf2]	3,17	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Delgado, 2019,15
[C2mim][NTf2]	3,62	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Montalban, 2016,15
[C2mim][NTf2]	3,41	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Costa, 2015,15
[C2mim][N(CN)2]	4,49	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Delgado, 2019
[C2mim][SO3(CF2)3CF3]	3,76	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Stolte, 2019,30
[C2mim][CO2(CF2)3CF3]	4,15	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Stolte, 2019,30
[C2-23mim][NTf2]	3,09	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Delgado, 2019,15
[C2-C3mim][NTf2]	2,32	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Sonia, 2012,15
[C2mim][TCM]	4,24	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Delgado, 2019
[OHC2mim][Gly]	4,76	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	Ghanem 2015,15
[OHC2mim][ala]	4,58	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	Ghanem 2015,15
[OHC2mim][ser]	4,66	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	Ghanem 2015,15
[OHC2mim][pro]	4,78	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	Ghanem 2015,15.
[C3mim][PF6]	3,55	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Sonia, 2012, 15

ANEXO I. DATOS DE TOXICIDAD PARA V. FISHERI Y DESCRIPTORES DE LÍQUIDOS IÓNICOS

Abrev.	LC50 (µM)	[DHCit]	[Bit]	[Sal]	[Gal]	[Caf]	[Val]	[Sig]	[Gly]	[Ala]	[Ser]	[Pro]	[Neod]	[Dec]	[isost]	[Ehexato]	[DBS]	Ref.
[C3mim][BF4]	3,94	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Ranke, 2004, 30
[HOC3mim][Cl]	3,52	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Hernández, 2015, 10
[HOC3mim][dca]	3,48	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Hernández, 2015, 10
[C3mim][NTf2]	2,77	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Ventura, 2010, 15
[C3mim][NTf2]	3,00	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Delgado, 2019,15
[C3-23mim][NTf2]	2,67	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Delgado, 2019
[C3-C3im][NTf2]	1,92	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Sonia, 2012,15
[C4im][CH3COO]	3,32	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Luis P, 2010,15
[C4im][Cap]	2,00	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Luis P, 2010,15
[C4im][CF3SO3]	2,77	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Luis P, 2010,15
[C4im][HCOO]	3,19	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Luis P, 2010,15
[C4im][CF3COO]	3,28	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Luis P, 2010,15
[C4mim][PF6]	3,07	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Venture 2011, 15
[C4mim][PF6]	3,07	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Garcia, 2005, 30
[C4mim][PF6]	3,29	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Montalban, 2016,15
[C4mim][Cl]	3,46	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Montalban, 2016, 15
[C4mim][Cl]	3,47	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	stolte, 2007, 30
[C4mim][Cl]	3,34	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	García, 2005, 30
[C4mim][Cl]	3,71	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Docherty, 2005

ANEXO I. DATOS DE TOXICIDAD PARA V. FISHERI Y DESCRIPTORES DE LÍQUIDOS IÓNICOS

Abrev.	LC50 (μM)	[DHCit]	[Bit]	[Sal]	[Gal]	[Caf]	[Val]	[Sig]	[Gly]	[Ala]	[Ser]	[Pro]	[Neod]	[Dec]	[isost]	[Ehexato]	[DBS]	Ref.
[C4mim][Cl]	3,39	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Romero,2008
[C4mim][Cl]	3,21	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Petric, 2013, 15
[C4mim][Cl]	3,49	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Mena, 2019, 15
[C4mim][oac]	3,47	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Mena, 2019, 15
[C4mim][BF4]	3,10	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Garcia, 2005,30
[C4mim][BF4]	3,55	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Ranke, 2004
[C4mim][BF4]	3,20	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Samori, 2010,15
[C4mim][BF4]	3,12	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Samori 2007,15
[C4mim][BF4]	3,46	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Montalban, 2016, 15
[C4mim][Br]	3,44	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Wang, 2015, 15
[C4mmim][Br]	3,25	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Wang, 2015, 15
[C4mim][Br]	3,27	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Garcia, 2005,30
[C4mim][Br]	4,01	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Docherty, 2005
[C4mim][Br]	3,66	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Vivoud 2012
[C4mim][Br]	3,07	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Ranke 2004
[C4mim][Br]	3,53	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Venture, 2012, 15
[C4mim][Br]	3,27	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Koutias, 2019, 5
[C4mim][Br]	3,11	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Koutias, 2019, 15
[C4mim][NTf2]	2,53	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Venture, 2011, 15

ANEXO I. DATOS DE TOXICIDAD PARA V. FISHERI Y DESCRIPTORES DE LÍQUIDOS IÓNICOS

Abrev.	LC50 (µM)	[DHCit]	[Bit]	[Sal]	[Gal]	[Caf]	[Val]	[Sig]	[Gly]	[Ala]	[Ser]	[Pro]	[Neod]	[Dec]	[isost]	[Ehexato]	[DBS]	Ref.
[C4mim][NTf2]	3,39	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Couling, 2005, 15
[C4mim][NTf2]	2,46	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Stolte, 2007,30
[C4mim][NTf2]	2,60	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Delgado, 2019,15
[C4mim][NTf2]	2,51	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Montalban, 2016,15
[C4mim][NTf2]	2,95	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Mena, 2019,15
[iC4mim][NTf2]	2,83	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Sonia, 2012,15
[C4mim][N(CN)2]	3,44	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Delgado, 2019,15
[C4mim][N(CN)2]	3,67	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Docherty, 2005
[C4mim][N(CN)2]	3,11	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Samori, 2010,15
[C4mim][SCN]	3,41	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Delgado, 2019,15
[C4mim][SCN]	3,42	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Costa, 2017
[C4mim][SCN]	2,37	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Francisco 2015, 10
[C4mim][I]	3,59	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Luis P, 2010
[C4mim][pTS]	3,52	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Ranke, 2004
[C4mim][pTS]	3,32	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Venture, 2012, 15
[C4mim][8OSO3]	1,85	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Matzke 2007, 30
[C4mim][HOSO3]	2,12	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Costa, 2017
[C4mim][HOSO3]	2,12	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Hernandez, 2015,10
[C4mim][1OSO3]	3,57	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Costa, 2017

ANEXO I. DATOS DE TOXICIDAD PARA V. FISHERI Y DESCRIPTORES DE LÍQUIDOS IÓNICOS

Abrev.	LC50 (µM)	[DHCit]	[Bit]	[Sal]	[Gal]	[Caf]	[Val]	[Sig]	[Gly]	[Ala]	[Ser]	[Pro]	[Neod]	[Dec]	[isost]	[Ehexato]	[DBS]	Ref.
[C4mim][1OSO3]	3,59	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Venture, 2012, 15
[C4mim][1OSO3]	3,57	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Montalban, 2016, 15
[C4mim][1OSO3]	3,16	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Koutia, 2019,5
[C4mim][1OSO3]	3,04	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Koutia, 2019, 15
[C4mim][C2OSO3]	3,20	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Hernández, 2015, 10
[C4Femim][1OSO3]	1,76	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Francisco, 2015, 10
[C4mim][CF32N]	3,48	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Matzke, 2007. 30
[C4mim][CF3SO3]	3,60	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Cho
[C4mim][FeCl4]	1,51	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Irabien,2011,15
[C4eim][BF4]	2,80	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Ranke, 2004
[C4mim][TCM]	3,35	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Delgado, 2019
[C4mim][C5SO6]	3,48	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Costa, 2017
[C4mim][C5SO6]	3,48	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Montalban, 2016, 15
[C4-23mim][NTf2]	2,36	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Delgado, 2019
[C4-23mim][NTf2]	2,30	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Sonia, 2012, 15
[C4-23mim][NTf2]	2,87	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Montalban 2016, 15
[C4-C4im][NTf2]	2,11	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Sonia, 2012,15
[C5mim][BF4]	3,14	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Ranke, 2004
[C5mim][NTf2]	2,03	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Sonia, 2012,15

ANEXO I. DATOS DE TOXICIDAD PARA V. FISHERI Y DESCRIPTORES DE LÍQUIDOS IÓNICOS

Abrev.	LC50 (μM)	[DHCit]	[Bit]	[Sal]	[Gal]	[Caf]	[Val]	[Sig]	[Gly]	[Ala]	[Ser]	[Pro]	[Neod]	[Dec]	[isost]	[Ehexato]	[DBS]	Ref.
[C5C5im][NTf2]	1,79	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Sonia, 2012, 15
[C5mim][Cl]	3,78	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Montalban, 2019, 15
[C6mim][PF6]	2,17	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	García, 2005, 30
[C6mim][PF6]	2,11	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Romero, 2008
[C6mim][PF6]	2,36	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Montalban, 2016, 15
[C6mim][Cl]	2,18	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Romero, 2008
[C6mim][Cl]	2,32	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	García et al., 2005, 30
[C6mim][Cl]	2,37	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Montalban, 2016, 15
[C6mim][BF4]	3,18	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Ranke, 2004, 30
[C6mim][Br]	2,82	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Wang, 2015, 15
[C6mmim][Br]	3,06	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Wang, 2015, 15
[C6mim][Br]	3,13	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Viboud, 2012
[C6mim][Br]	1,42	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Docherty, 2005
[C6mim][NTf2]	1,71	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Sonia, 2012, 15
[C6mim][NTf2]	1,80	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Delgado, 2019, 15
[C6mim][NTf2]	2,11	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Ventura, 2011, 15
[C6mim][NTf2]	2,05	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Merck, 2010
[C6C6im][NTf2]	1,95	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Sonia, 2012, 15
[C6C6im][NTf2]	1,82	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Montalban, 2016, 15

ANEXO I. DATOS DE TOXICIDAD PARA V. FISHERI Y DESCRIPTORES DE LÍQUIDOS IÓNICOS

Abrev.	LC50 (μM)	[DHCit]	[Bit]	[Sal]	[Gal]	[Caf]	[Val]	[Sig]	[Gly]	[Ala]	[Ser]	[Pro]	[Neod]	[Dec]	[isost]	[Ehexato]	[DBS]	Ref.
[C6mim][(C2F5)3PF3]	2,65	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Merck, 2010
[C6mim][(2-SO2PhCO)N]	2,67	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Merck, 2010
[C6-23mim][Cl]	1,74	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Luis 2007,15
[C6eim][BF4]	2,15	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Ranke, 2004
[C7mim][NTf2]	1,62	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Sonia, 2012,15
[C7mim][BF4]	2,44	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Ranke, 2004
[C8mim][Br]	2,15	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	wang, 2015, 15
[C8mim][Br]	2,27	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Viboud,2012
[C8mim][Br]	0,63	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Docherty,2005
[C8mim][Br]	0,71	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Motalban,2018,15
[C8mim][Br]	1,76	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Wang, 2015, 15
[C8mmim][Br]	1,41	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Ranke, 2004
[C8mim][BF4]	0,91	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Montalban, 2016, 15
[C8mim][Cl]	0,69	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Montalban, 2016, 15
[C8mim][Cl]	1,01	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Stolten, 2007, 30
[C8mim][Cl]	1,19	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Garcia, 2005, 30
[C8mim][Cl]	0,94	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Romero, 2008
[C8mim][Cl]	0,30	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Petric, 2013, 15
[C8mim][PF6]	0,70	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Romero, 2008

ANEXO I. DATOS DE TOXICIDAD PARA V. FISHERI Y DESCRIPTORES DE LÍQUIDOS IÓNICOS

Abrev.	LC50 (μM)	[DHCit]	[Bit]	[Sal]	[Gal]	[Caf]	[Val]	[Sig]	[Gly]	[Ala]	[Ser]	[Pro]	[Neod]	[Dec]	[isost]	[Ehexato]	[DBS]	Ref.
[C8mim][PF6]	0,70	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Ventura, 2011, 15
[C8mim][PF6]	0,95	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Garcia, 2005, 30
[C8mim][PF6]	1,25	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Montalban, 2016, 15
[C8mim][NTf2]	1,13	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Sonia 2012, 15
[C8mim][NTf2]	0,83	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Merck, 2010
[C8mim][NTf2]	0,99	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Montalban 2016, 15
[C8mim][NTf2]	0,95	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Montalban 2018, 15
[C8mim][SbF6]	0,85	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Montalbán, 2018,15
[C9mim][BF4]	0,72	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Ranke, 2004
[C9mim][Cl]	1,40	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Jafari, 2019
[C10mim][BF4]	-0,18	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Ranke, 2004
[C10mim][Cl]	0,50	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Ranke, 2004
[C10mim][Cl]	-0,23	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Stolten, 2007,30
[C2OCOC10mim][Br]	1,08	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Ventura ,2012,15
[C10mim][FeCl4]	-0,43	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Irabien, 2011,15
[C14mim][Cl]	-0,15	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Stolte, 2007,30
[C16mim][Cl]	0,23	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Stolte, 2007,30
[C18mim][Cl]	1,35	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Merck, 2010
[MOC2mim][BF4]	4,15	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Samori, 2007, 15

ANEXO I. DATOS DE TOXICIDAD PARA V. FISHERI Y DESCRIPTORES DE LÍQUIDOS IÓNICOS

Abrev.	LC50 (μM)	[DHCit]	[Bit]	[Sal]	[Gal]	[Caf]	[Val]	[Sig]	[Gly]	[Ala]	[Ser]	[Pro]	[Neod]	[Dec]	[isost]	[Ehexato]	[DBS]	Ref.
[MOC2mim][BF4]	3,90	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Samori, 2010,15
[MOC2mim][N(CN)2]	4,06	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Samori, 2007,15
[MOC2mim][N(CN)2]	3,99	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Samori, 2010,15
[MOC2OC2mim][BF4]	3,79	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Samori, 2010, 15
[MOC2OC2mim][Cl]	2,26	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Venture, 2015, 15
[MOC2OC2mim][N(CN)2]	3,88	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Samori, 2010,15
[MOC2OC2OC2mim][BF4]	3,45	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Samori, 2010,15
[MOC2OC2OC2mim][N(CN)2]	3,69	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Samori, 2010,15
[MOC2OC2OC2mim][N(CN)2]	2,65	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Samori, 2010,15
[MOC2mim][Cl]	4,18	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Stolte, 2007,30
[MOC2mim][NTf2]	2,83	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Stolte, 2007,30
[MOC3mim][NTf2]	3,20	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Stolte, 2007,30
[EOC1mim][Cl]	4,08	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Stolte, 2007,30
[EOC1mim][NTf2]	3,00	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Stolte, 2007,30
[EOC2mim][Br]	4,28	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Stolte, 2007,30
[EOC2mim][NTf2]	2,95	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Stolte, 2007,30
[CIC2mim][Cl]	2,25	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Stolte 2007
[OHC2mim][I]	3,89	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Stolte, 2007,30
[OHC2mim][Cl]	5,34	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Montalban, 2016,15

ANEXO I. DATOS DE TOXICIDAD PARA V. FISHERI Y DESCRIPTORES DE LÍQUIDOS IÓNICOS

Abrev.	LC50 (µM)	[DHCit]	[Bit]	[Sal]	[Gal]	[Caf]	[Val]	[Sig]	[Gly]	[Ala]	[Ser]	[Pro]	[Neod]	[Dec]	[isost]	[Ehexato]	[DBS]	Ref.
[OHC2mim][NTf2]	4,05	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Stolte, 2007,30
[OHC3mim][NTf2]	3,81	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Stolte, 2007,30
[OHC3mim][SO3(CF2)3CF3]	4,06	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Stolte, 2019,30
[OHC3mim][CO2(CF2)3CF3]	4,57	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Stolte, 2019,30
[CNC1mim][NTf2]	3,81	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Stolte, 2007,30
[Phmim][N(CN)2]	2,84	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Delgado, 2019
[ImidC2Phe][Br]	3,49	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Kusuma, 2019,30
[ImidC4Phe][Br]	2,33	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Kusuma, 2019,30
[ImidC6Phe][Br]	1,38	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Kusuma, 2019,30
[ImidC8Phe][Br]	1,29	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Kusuma, 2019,30
[Imid10Phe][Br]	0,95	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Kusuma, 2019,30
[ImidC12Phe][Br]	0,92	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Kusuma, 2019,30
[ImidC14Phe][Br]	0,92	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Kusuma, 2019,30
[ImidC16Phe][Br]	>1,80	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Kusuma, 2019,30
[C10C6Omim][Cl]	-0,85	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Nalecz-Jawecki, 2003, 15
[C10cC6Omim][Cl]	-0,85	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Nalecz-Jawecki, 2003, 15
[C10C6Smim][Cl]	-0,66	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Nalecz-Jawecki, 2003, 15
[13mim][NTf2]	3,61	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Delgado, 2019
[Amim][NTf2]	2,94	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Delgado, 2019

ANEXO I. DATOS DE TOXICIDAD PARA V. FISHERI Y DESCRIPTORES DE LÍQUIDOS IÓNICOS

Abrev.	LC50 (µM)	[DHCit]	[Bit]	[Sal]	[Gal]	[Caf]	[Val]	[Sig]	[Gly]	[Ala]	[Ser]	[Pro]	[Neod]	[Dec]	[isost]	[Ehexato]	[DBS]	Ref.
[Amim][N(CN)2]	4,31	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Delgado, 2019
[Amim][Cl]	4,36	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Montalban, 2016, 15
[C2-4mPy][INTf2]	2,73	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Delgado, 2019
[C2-4mPy][2OSO3]	3,83	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Montalban, 2016, 15
[OHC3Py][INTf2]	4,01	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Merck, 2010
[C2-4mPy][CO2(CF2)3CF3]	3,68	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Stote, 2019,30
[C2-4mPy][INTf2]	2,73	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Delgado, 2019
[C3-3mPy][INTf2]	1,90	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Sonia, 2012,15
[C3-3mPy][PF6]	2,79	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Sonia, 2012,15
[pyC2Phe][Br]	3,34	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Kusuma, 2019,30
[pyC4Phe][Br]	2,28	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Kusuma, 2019,30
[pyC6Phe][Br]	1,40	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Kusuma, 2019,30
[pyC8Phe][Br]	1,29	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Kusuma, 2019,30
[pyC10Phe][Br]	0,94	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Kusuma, 2019,30
[pyC12Phe][Br]	0,89	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Kusuma, 2019,30
[pyC14Phe][Br]	0,96	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Kusuma, 2019,30
[pyC16Phe][Br]	>1,80	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Kusuma, 2019,30
[Py][CF3SO3]	2,52	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Koutinas, 2020, 5
[Py][CF3SO3]	2,52	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Koutinas, 2020, 15

ANEXO I. DATOS DE TOXICIDAD PARA V. FISHERI Y DESCRIPTORES DE LÍQUIDOS IÓNICOS

Abrev.	LC50 (μM)	[DHCit]	[Bit]	[Sal]	[Gal]	[Caf]	[Val]	[Sig]	[Gly]	[Ala]	[Ser]	[Pro]	[Neod]	[Dec]	[isost]	[Ehexato]	[DBS]	Ref.
[C4Py][N(CN)2]	3,30	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Docherty, 2005
[C4Py][Br]	3,38	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Wang, 2015, 15
[C4Py][Br]	3,72	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Vivoud 2012
[C4Py][Br]	3,39	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Docherty, 2005
[C4Py][Cl]	3,30	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Docherty, 2005
[C4Py][Cl]	3,18	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Stolte, 2007,30
[C4Py][Cl]	3,24	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Petric, 2013, 15
[C4Py][Al2Cl7]	3,01	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Merck, 2010
[C4Py][NTf2]	2,44	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Delgado, 2019,15
[C4-3mPy][Br]	3,14	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Wang, 2015, 15
[C4-3mPy][Br]	2,75	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Docherty, 2005
[C4-3mPy][N(CN)2]	2,66	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Docherty, 2005
[C4-3mPy][BF4]	3,30	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Costa, 2017
[C4-4mPy][BF4]	2,44	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Montalban, 2016, 15
[C4-4mPy][BF4]	1,51	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Hernández, 2015, 10
[C4-4mPy][BF4]	3,02	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Merck, 2010
[C4-4mPy][BF4]	2,38	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Costa, 2015, 15
[C4-4mPy][Cl]	3,32	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Costa, 2017
[C4-4mPy][Cl]	3,04	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Costa, 2015,15

ANEXO I. DATOS DE TOXICIDAD PARA V. FISHERI Y DESCRIPTORES DE LÍQUIDOS IÓNICOS

Abrev.	LC50 (μM)	[DHCit]	[Bit]	[Sal]	[Gal]	[Caf]	[Val]	[Sig]	[Gly]	[Ala]	[Ser]	[Pro]	[Neod]	[Dec]	[isost]	[Ehexato]	[DBS]	Ref.
[C4-4mPy][TCM]	2,68	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Delgado, 2019
[C4-4mPy][NTf2]	2,04	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Delgado, 2019
[C4-23mPy][Br]	2,24	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Wang, 2015, 15
[C4-23mPy][Br]	2,93	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Viboud, 2012
[C4-23mPy][CF3SO3]	2,84	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Viboud, 2012
[C4-35mPy][N(CN)2]	2,38	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Docherty, 2005
[C4-35mPy][Br]	2,69	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Docherty, 2005
[C4-35mPy][Br]	2,49	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Viboud, 2012
[C4-35mPy][SCN]	2,25	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Viboud, 2012
[C4-35mPy][NTf2]	1,86	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Viboud, 2012
[C4-235mPy][Br]	2,37	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Wang, 2015, 15
[C4-235mPy][Br]	2,48	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Viboud, 2012
[C4-235mPy][NTf2]	1,56	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Viboud, 2012
[C4-4C1NPy][Br]	2,52	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Stolte, 2007,30
[C4-4C1NPy][Br]	2,32	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Couling, 2005, 15
[C4-4C1NPy][Cl]	2,52	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Stolte, 2007, 30
[C4-4C1NPy][NTf2]	1,85	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Stolte, 2007, 30
[C6Py][Br]	2,69	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Wang, 2015, 15
[C6Py][Br]	2,85	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Viboud, 2012

ANEXO I. DATOS DE TOXICIDAD PARA V. FISHERI Y DESCRIPTORES DE LÍQUIDOS IÓNICOS

Abrev.	LC50 (μM)	[DHCit]	[Bit]	[Sal]	[Gal]	[Caf]	[Val]	[Sig]	[Gly]	[Ala]	[Ser]	[Pro]	[Neod]	[Dec]	[isost]	[Ehexato]	[DBS]	Ref.
[C6-3mPy][Cl]	2,40	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Cao, 2018
[C6-4mPy][Br]	2,11	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Wang, 2015, 15
[C6-4mPy][Br]	2,07	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Docherty, 2005
[C6-4mPy][Cl]	1,44	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Luis, 2007,15
[C6-4C1NPy][NTf2]	1,38	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Merck, 2010
[C8Py][Cl]	1,69	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Merck, 2010
[C8Py][SbF6]	1,13	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Montalbán, 2018
[C8Py][Br]	1,69	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Wang, 2015, 15
[C8Py][Br]	1,89	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Viboud, 2012
[C8Py][Br]	1,27	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Montalban, 2018,15
[C8Py][NTf2]	1,51	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Montalban, 2018,15
[C8-3mPy][Br]	1,36	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Wang, 2015, 15
[C8-3mPy][Br]	0,79	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Docherty, 2005
[C8-23mPy][Br]	1,08	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Viboud, 2012(31)
[C8-35mPy][Br]	1,12	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Viboud, 2012
[C8-35mPy][NTf2]	0,36	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Papaiconomou, 2010
[C8-35mPy][BF4]	0,97	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Viboud, 2012
[C8-2m5ePy][Br]	0,59	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Viboud, 2012
[C8-235mPy][Br]	0,61	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Wang, 2015, 15

ANEXO I. DATOS DE TOXICIDAD PARA V. FISHERI Y DESCRIPTORES DE LÍQUIDOS IÓNICOS

Abrev.	LC50 (µM)	[DHCit]	[Bit]	[Sal]	[Gal]	[Caf]	[Val]	[Sig]	[Gly]	[Ala]	[Ser]	[Pro]	[Neod]	[Dec]	[isost]	[Ehexato]	[DBS]	Ref.
[C8-235mPy][Br]	0,62	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Viboud, 2012
[C8-235mPy][NTf2]	0,62	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Viboud, 2012
[C12SmPy][Cl]	-0,54	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Nalecz-Jawecki, 2003
[3C1-C12SmPy][Cl]	-0,77	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Nalecz-Jawecki, 2003
[35C1-C12SmPy][Cl]	-0,89	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Nalecz-Jawecki, 2003
[N00-2MO-2MO][N00SO3]	4,03	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Cho
[N000-2OH][Ehexato]	2,62	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	Viesca, 2020, 15
[N001-2OH][Ehexato]	2,35	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	Viesca, 2020, 15
[N011-2OH][Ehexato]	2,31	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	Viesca, 2020, 15
[N000-2OH][DBS]	2,08	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	Viesca, 2020, 15
[N001-2OH][DBS]	2,00	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	Viesca, 2020, 15
[N011-2OH][DBS]	1,95	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	Viesca, 2020, 15
[N111-2OH][1COO]	4,34	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Costa, 2015,15
[N111-2OH][1COO]	3,67	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Mena, 2019,15
[N111-2OH][H2PO4]	3,76	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Hernández, 2015,10
[N111-2OH][NTf2]	4,15	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Couling, 2005, 15
[N111-2OH][NTf2]	3,08	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Mena, 2019,15
[N111-2OH][Cl]	6,17	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Viboud, 2012
[N111-2OH][Cl]	3,64	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Mena, 2019,15

ANEXO I. DATOS DE TOXICIDAD PARA V. FISHERI Y DESCRIPTORES DE LÍQUIDOS IÓNICOS

Abrev.	LC50 (µM)	[DHCit]	[Bit]	[Sal]	[Gal]	[Caf]	[Val]	[Sig]	[Gly]	[Ala]	[Ser]	[Pro]	[Neod]	[Dec]	[isost]	[Ehexato]	[DBS]	Ref.
[N111-2OH][SO3(CF2)3CF3]	4,19	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Stolen, 2019, 30
[N111-2OH][CO2(CF2)3CF3]	4,52	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Stolen, 2019, 30
[coliC2Phe][Br]	3,46	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Kusuma, 2019,30
[coliC4Phe][Br]	2,34	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Kusuma, 2019,30
[coliC6Phe][Br]	1,51	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Kusuma, 2019,30
[coliC8Phe][Br]	1,62	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Kusuma, 2019,30
[coliC10Phe][Br]	1,04	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Kusuma, 2019,30
[coliC12Phe][Br]	0,90	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Kusuma, 2019,30
[coliC14Phe][Br]	0,90	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Kusuma, 2019,30
[coliC16Phe][Br]	>1,80	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Kusuma, 2019,30
[Chol][DHCit]	1,99	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Ventura, 2014, 5
[Chol][DHCit]	2,08	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Ventura, 2014, 15
[Chol][DHCit]	2,10	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Ventura, 2014, 30
[Chol][Cl]	2,77	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Ventura, 2014, 5
[Chol][Cl]	2,77	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Ventura, 2014, 15
[Chol][Cl]	2,73	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Ventura, 2014, 30
[Bzchol][Cl]	3,44	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Ventura, 2014, 5
[Bzchol][Cl]	3,23	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Ventura, 2014, 15
[Bzchol][Cl]	3,22	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Ventura, 2014, 30

ANEXO I. DATOS DE TOXICIDAD PARA V. FISHERI Y DESCRIPTORES DE LÍQUIDOS IÓNICOS

Abrev.	LC50 (µM)	[DHCit]	[Bit]	[Sal]	[Gal]	[Caf]	[Val]	[Sig]	[Gly]	[Ala]	[Ser]	[Pro]	[Neod]	[Dec]	[isost]	[Ehexato]	[DBS]	Ref.
[Chol][Bit]	1,91	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Ventura, 2014, 5
[Chol][Bit]	2,00	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Ventura, 2014, 15
[Chol][Bit]	1,98	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Ventura, 2014, 30
[Chol][But]	3,64	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Ventura, 2014, 5
[Chol][But]	3,65	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Ventura, 2014, 15
[Chol][But]	3,66	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Ventura, 2014, 30
[Chol][Prop]	3,58	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Ventura, 2014, 5
[Chol][Prop]	3,47	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Ventura, 2014, 15
[Chol][Prop]	3,44	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Ventura, 2014, 30
[Chol][Ac]	3,87	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Ventura, 2014, 5
[Chol][Ac]	3,72	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Ventura, 2014, 15
[Chol][Ac]	3,62	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Ventura, 2014, 30
[Chol][Sal]	3,26	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Ventura, 2014, 5
[Chol][Sal]	3,14	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Ventura, 2014, 15
[Chol][Sal]	2,99	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Ventura, 2014, 30
[Chol][Sal]	2,95	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Sitra 2015, 5
[Chol][Sal]	2,80	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Sitra 2015, 15
[Chol][Sal]	2,65	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Sitra 2015, 30
[Chol][gal]	4,13	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Sitra 2015, 5

ANEXO I. DATOS DE TOXICIDAD PARA V. FISHERI Y DESCRIPTORES DE LÍQUIDOS IÓNICOS

Abrev.	LC50 (μM)	[DHCit]	[Bit]	[Sal]	[Gal]	[Caf]	[Val]	[Sig]	[Gly]	[Ala]	[Ser]	[Pro]	[Neod]	[Dec]	[isost]	[Ehexato]	[DBS]	Ref.
[Chol][gal]	3,85	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Sitra 2015, 15
[Chol][gal]	3,78	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Sitra 2015, 30
[Chol][caf]	3,49	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Sitra 2015, 5
[Chol][caf]	3,46	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Sitra 2015, 15
[Chol][caf]	3,41	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Sitra 2015, 30
[Chol][val]	3,46	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Sitra 2015, 5
[Chol][val]	3,58	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Sitra 2015, 15
[Chol][val]	3,52	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Sitra 2015, 30
[Chol][sig]	3,18	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Sitra 2015, 5
[Chol][sig]	3,18	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Sitra 2015, 15
[Chol][sig]	3,16	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Sitra 2015, 30
[Chol][neod]	2,75	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	Ratamaki 2017, 5
[Chol][neod]	2,72	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	Ratamaki 2017, 15
[Chol][dec]	2,00	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	Ratamaki 2017, 5
[Chol][dec]	2,00	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	Ratamaki 2017, 15
[Chol][isost]	2,11	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	Ratamaki 2017, 5
[Chol][isost]	1,87	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	Ratamaki 2017, 15
[N000-2OH][HCO2]	3,82	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Petric, 2013, 15
[N002OH-2OH][HCO2]	3,72	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Petric, 2013, 15

ANEXO I. DATOS DE TOXICIDAD PARA V. FISHERI Y DESCRIPTORES DE LÍQUIDOS IÓNICOS

Abrev.	LC50 (µM)	[DHCit]	[Bit]	[Sal]	[Gal]	[Caf]	[Val]	[Sig]	[Gly]	[Ala]	[Ser]	[Pro]	[Neod]	[Dec]	[isost]	[Ehexato]	[DBS]	Ref.
[N002OH-2OH][CCO2]	4,03	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Petric, 2013, 15
[N002OH-2OH][C2CO2]	3,56	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Petric, 2013, 15
[N002OH-2OH][C3CO2]	3,62	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Petric, 2013, 15
[N002OH-2OH][C3CO2]	3,64	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Petric, 2013, 15
[N002OH-2OH][C4CO2]	3,23	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Petric, 2013, 15
[N020H2OH-2OH][C3CO2]	3,32	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Petric, 2013, 15
[N020H2OH-2OH][C4CO2]	3,26	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Petric, 2013, 15
[N000-2OH][C3CO2]	4,18	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Petric, 2013, 15
[N000-2C][NO3]	4,32	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Motalban, 2016, 15
[N4,4,4,4][Cl]	3,39	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Costa, 2015, 15
[N4,4,4,4][I]	3,27	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Koutias, 2019,5
[N4,4,4,4][I]	2,93	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Koutias, 2019, 15
[N4,4,4,4][pf6]	2,45	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Koutias, 2019, 15
[N4,4,4,4][pf6]		0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Koutias, 2019, 15
[N888-1][c6:0]	2,14	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Oulego, 2019, 15
[N888-1][c8:0]	2,06	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Oulego, 2019, 15
[N888-1][c12:0]	1,98	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Oulego, 2019, 15
[N888-1][c16:0]	1,86	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Oulego, 2019, 15
[N888-1][c18:0]	1,80	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Oulego, 2019, 15

ANEXO I. DATOS DE TOXICIDAD PARA V. FISHERI Y DESCRIPTORES DE LÍQUIDOS IÓNICOS

Abrev.	LC50 (μM)	[DHCit]	[Bit]	[Sal]	[Gal]	[Caf]	[Val]	[Sig]	[Gly]	[Ala]	[Ser]	[Pro]	[Neod]	[Dec]	[isost]	[Ehexato]	[DBS]	Ref.
[N888-1][c18:1]	1,25	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Oulego, 2019, 15
[N111-12][Br]	-0,11	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Garcia, 2001, 30
[N111-14][Br]	-0,08	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Garcia, 2001, 30
[N111-16][Br]	0,24	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Garcia, 2001, 30
[N111-16][Cl]	0,40	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Merck, 2010
[N112-1EOCO][NTf2]	3,32	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Merck, 2010
[N112-2MO][NTf2]	3,35	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Merck, 2010
[N1124][NTf2]	3,21	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Stolte, 2007,30
[N118-1C10ox][Cl]	-0,09	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Nalecz-Jawecki, 2003,15
[N11-12-1Ph][Br]	-0,33	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Garcia, 2001,30
[N11-12-1Ph][Cl]	-0,23	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Merck, 2010
[N11-12-1C8O][Cl]	0,39	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Nalecz-Jawecki, 2003,15
[N11-12-1C9O][Cl]	0,38	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Nalecz-Jawecki, 2003,15
[N11-12-1C10O][Cl]	0,60	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Nalecz-Jawecki, 2003,15
[N11-14-1Ph][Br]	-0,39	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Garcia, 2001, 30
[N11-16-1Ph][Br]	0,11	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Garcia, 2001, 30
[N11-16-1Ph][Cl]	-0,31	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Merck, 2010
[N11-Ph-1C8O][Cl]	-0,70	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Nalecz-Jawecki, 2003, 15
[N11-Ph-1C10O][Cl]	-0,62	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Nalecz-Jawecki, 2003, 15

ANEXO I. DATOS DE TOXICIDAD PARA V. FISHERI Y DESCRIPTORES DE LÍQUIDOS IÓNICOS

Abrev.	LC50 (μM)	[DHCit]	[Bit]	[Sal]	[Gal]	[Caf]	[Val]	[Sig]	[Gly]	[Ala]	[Ser]	[Pro]	[Neod]	[Dec]	[isost]	[Ehexato]	[DBS]	Ref.
[N11-Ph-1C12O][Cl]	-0,38	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Nalecz-Jawecki, 2003, 15
[N2220][ch3so4]	5,41	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Ratamaki, 2019, 15
[N2226][Br]	2,46	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Couling, 2005
[N4444][Br]	3,27	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Couling, 2005
[C8mPyrr][SbF6]	1,69	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Montalbán, 2018
[C3mPyrr][PF6]	4,01	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Sonia, 2012, 15
[C3mPyrr][NTf2]	3,29	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Sonia, 2012, 15
[C4mPyrr][NTf2]	2,54	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Stolten, 2007, 30
[C4mPyrr][NTf2]	2,72	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Viboud, 2012
[C4mPyrr][(C2F5)3PF3]	1,70	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Merck, 2010
[C4mPyrr][Br]	4,40	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Viboud, 2012
[C4mPyrr][Br]	4,00	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Wang, 2015, 15
[C4mPyrr][N(CN)2]	4,26	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Viboud, 2012
[C4mPyrr][N(CN)2]	4,34	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Hernández, 2015, 10
[C4mPyrr][CF3SO3]	3,98	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Viboud, 2012
[C6mPyrr][Cl]	2,99	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Luis, 2007, 15
[C6mPyrr][NTf2]	2,40	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Merck, 2010
[C6mPyrr][Br]	3,19	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Viboud, 2012
[C6mPyrr][Br]	2,95	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Wang, 2015, 15

ANEXO I. DATOS DE TOXICIDAD PARA V. FISHERI Y DESCRIPTORES DE LÍQUIDOS IÓNICOS

Abrev.	LC50 (µM)	[DHCit]	[Bit]	[Sal]	[Gal]	[Caf]	[Val]	[Sig]	[Gly]	[Ala]	[Ser]	[Pro]	[Neod]	[Dec]	[isost]	[Ehexato]	[DBS]	Ref.
[C8mPyrr][Cl]	2,17	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Viboud, 2012
[C8mPyrr][NTf2]	1,58	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Viboud, 2012
[C8mPyrr][NTf2]	1,53	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Montalban, 2018,15
[C8mPyrr][SbF6]	1,69	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Montalban, 2018,15
[C8mPyrr][Br]	2,26	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Viboud, 2012
[C8mPyrr][Br]	2,15	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Wang, 2015, 15 min
[C8-3mPyrr][Br]	1,66	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Montalban, 2018,15
[EO-OC2mPyrr][NTf2]	3,23	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Merck, 2010
[EOC2mPyrr][NTf2]	2,97	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Merck, 2010
[OHC3mPyrr][NTf2]	3,91	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Merck, 2010
[C4-C3CNPyrr][Br]	5,33	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Viboud, 2012
[C2mMorp][Br]	5,21	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Pretti, 2011,30
[C4mMorp][Br]	4,87	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Pretti, 2011,30
[C4mMorp][NTf2]	2,49	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Stolte, 2007,30
[C4mMorp][Br]	5,45	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Viboud, 2012
[C4mMorp][N(CN)2]	4,89	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Viboud, 2012
[C4mMorp][CF3SO3]	4,40	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Viboud, 2012
[C6mMorp][Br]	3,94	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Pretti, 2011,30
[C8mMorp][Br]	2,56	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Viboud, 2012

ANEXO I. DATOS DE TOXICIDAD PARA V. FISHERI Y DESCRIPTORES DE LÍQUIDOS IÓNICOS

Abrev.	LC50 (μM)	[DHCit]	[Bit]	[Sal]	[Gal]	[Caf]	[Val]	[Sig]	[Gly]	[Ala]	[Ser]	[Pro]	[Neod]	[Dec]	[isost]	[Ehexato]	[DBS]	Ref.
[C8mMorp][Br]	2,38	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Pretti, 2011,30
[C10mMorp][Br]	1,30	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Pretti, 2011,30
[EOC1mMorp][NTf2]	3,38	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Cho
[4,5][oac]	4,64	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Ramataki, 2019,15
[5,5][oac]	4,08	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Ramataki, 2019,15
[5,6][oac]	4,02	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Ramataki, 2019,15
[C3mPip][PF6]	3,59	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Sonia, 2012,15
[C3mPip][NTf2]	3,01	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Sonia, 2012,15
[C4mPip][Br]	3,84	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Wang, 2015, 15
[C4mPip][Br]	4,22	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Viboud, 2012
[C4mPip][Br]	4,27	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Stolte, 2007,30
[C4mPip][NTf2]	2,56	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Stolte, 2007,30
[C6mPip][Br]	2,76	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Wang, 2015, 15
[C6mPip][Br]	2,94	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Viboud, 2012
[C8mPip][Br]	1,91	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Wang, 2015, 15
[C8mPip][Br]	2,00	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Viboud, 2012
[C4ePip][Br]	3,66	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Wang, 2015, 15
[C4ePip][Br]	3,96	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Viboud, 2012
[C8ePip][Br]	1,79	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Wang, 2015, 15

ANEXO I. DATOS DE TOXICIDAD PARA V. FISHERI Y DESCRIPTORES DE LÍQUIDOS IÓNICOS

Abrev.	LC50 (μM)	[DHCit]	[Bit]	[Sal]	[Gal]	[Caf]	[Val]	[Sig]	[Gly]	[Ala]	[Ser]	[Pro]	[Neod]	[Dec]	[isost]	[Ehexato]	[DBS]	Ref.
[C8ePip][Br]	1,80	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Viboud, 2012
[C8ePip][I]	2,20	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Viboud, 2012
[C8ePip][SCN]	1,50	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Viboud, 2012
[C4TROP][Br]	5,36	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Viboud, 2012
[C4TROP][I]	4,74	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Viboud, 2012
[C4TROP][NTf2]	2,61	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Viboud, 2012
[C4TROP][SCN]	4,07	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Viboud, 2012
[C8TROP][NTf2]	2,17	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Jafari, 2019
[C8TROP][N(CN)2]	2,52	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Viboud, 2012
[C8TROP][BF4]	2,77	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Viboud, 2012
[Bu3NC4][Sac]	3,11	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Parajo, 2019,15
[Bu3NC4][Sac]	2,92	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Parajo, 2019,30
[Bu3NC2][Sac]	2,36	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Parajo, 2019,15
[Bu3NC2][Sac]	2,18	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Parajo, 2019,30
[Me3NC2OC12][doc]	0,69	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Parajo, 2019,15
[Me3NC2OC12][doc]	0,65	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Parajo, 2019,30
[Me3NC2OC12][SCN]	0,35	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Parajo, 2019,15
[Me3NC2OC12][SCN]	0,25	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Parajo, 2019,30
[Me3NC2OC14][doc]	0,28	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Parajo, 2019,15

ANEXO I. DATOS DE TOXICIDAD PARA V. FISHERI Y DESCRIPTORES DE LÍQUIDOS IÓNICOS

Abrev.	LC50 (µM)	[DHCit]	[Bit]	[Sal]	[Gal]	[Caf]	[Val]	[Sig]	[Gly]	[Ala]	[Ser]	[Pro]	[Neod]	[Dec]	[isost]	[Ehexato]	[DBS]	Ref.
[Me3NC2OC14][doc]	0,27	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Parajo, 2019,30
[Me3NC2OC14][SCN]	0,47	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Parajo, 2019,15
[Me3NC2OC14][SCN]	0,38	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Parajo, 2019,30
[Bu3pC2][Sac]	1,54	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Parajo, 2019,15
[Bu3pC2][Sac]	1,47	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Parajo, 2019,30
[Bu3pC4][Sac]	2,12	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Parajo, 2019,15
[Bu3pC4][Sac]	1,82	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Parajo, 2019,30
[P2444][dC2-PO4]	3,07	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Couling, 2005,15
[P2444][diC3-PO4]	3,07	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Couling, 2005
[P4444][Br]	2,71	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Couling, 2005,15
[P4444][Br]	2,71	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Venture, 2012, 15
[Pi4441][Tosilate]	2,64	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Venture, 2012, 15
[Pi4441][Tosilate]	2,44	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Hernández, 2015, 10
[P4441][CH3SO3]	2,86	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Venture, 2012, 15
[P4441][CH3SO3]	2,64	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Hernández, 2015, 10
[P666-14][Br]	3,41	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Couling, 2005,15
[P666-14][Br]	1,05	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Ventura, 2012, 15
[P666-14][Cl]	1,14	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Ventura, 2012, 15
[P666-14][CH3SO3]	1,11	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Ventura, 2012, 15

ANEXO I. DATOS DE TOXICIDAD PARA V. FISHERI Y DESCRIPTORES DE LÍQUIDOS IÓNICOS

Abrev.	LC50 (μM)	[DHCit]	[Bit]	[Sal]	[Gal]	[Caf]	[Val]	[Sig]	[Gly]	[Ala]	[Ser]	[Pro]	[Neod]	[Dec]	[isost]	[Ehexato]	[DBS]	Ref.
[P666-14] [(C2F5)3PF3]	1,70	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Merck, 2010
[P888-1] [oac]	0,28	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Rantamäki, 2019, 15
[C2mDABCO] [Br]	5,58	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Pretti, 2011,30
[C4mDABCO] [Br]	4,87	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Pretti, 2011,30
[C6mDABCO] [Br]	3,69	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Pretti, 2011,30
[C8mDABCO] [Br]	2,35	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Pretti, 2011,30
[C10mDABCO] [Br]	1,26	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Pretti, 2011,30
[G1111] [CH3SO3]	3,96	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Ratamaki, 2019,15
[G1111] [CF3COO]	0,47	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Luis P, 2010,15
[G1111] [1COO]	3,17	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Luis P, 2010,15
[G1111] [CF3SO3]	3,52	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Luis P, 2010,15
[G1111] [Cap]	2,29	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Luis P, 2010,15
[G1111] [Isost]	1,97	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	Ratamaki, 2017, 5
[G1111] [Isost]	1,79	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	Ratamaki, 2017, 15
[G1111] [neod]	2,85	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	Ratamaki, 2017, 5
[G1111] [neod]	2,81	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	Ratamaki, 2017, 15
[TMGC4] [I]	1,94	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Venture et al., 2012,15
[TMGC7] [I]	0,93	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Venture et al., 2012,15
[TMGC12] [I]	1,43	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Venture et al., 2012,15

ANEXO I. DATOS DE TOXICIDAD PARA V. FISHERI Y DESCRIPTORES DE LÍQUIDOS IÓNICOS

Abrev.	LC50 (µM)	[DHCit]	[Bit]	[Sal]	[Gal]	[Caf]	[Val]	[Sig]	[Gly]	[Ala]	[Ser]	[Pro]	[Neod]	[Dec]	[isost]	[Ehexato]	[DBS]	Ref.
[(di-h)2DMG][Cl]	0,92	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Venture et al., 2012,15
[(C3O)4DMG][Cl]	2,44	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Venture et al., 2012,15
[(C3O)4DMG][isost]	1,99	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	Ratamaki, 2017, 5
[(C3O)4DMG][isost]	1,82	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	Ratamaki, 2017, 15
[(C3O)4DMG][neod]	2,86	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	Ratamaki, 2017, 5
[(C3O)4DMG][neod]	2,84	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	Ratamaki, 2017, 15
[C4QUINU][Br]	4,45	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Viboud, 2012
[C8QUINU][Br]	2,32	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Viboud, 2012
[C8QUINU][N(CN)2]	2,26	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Viboud, 2012
[MeI][1COO]	2,39	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Luis P, 2010,15
[MeI][CF3COO]	2,24	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Luis P, 2010,15
[MeI][CF3SO3]	2,45	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Luis P, 2010,15
[S222][NTf2]	3,26	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Merck, 2010
[DBNH][OMs]	4,02	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Rantamäki, 2019, 15
[DBUH][OMs]	3,77	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Rantamäki, 2019, 15
5[MTBNH][OMs]	3,96	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Rantamäki, 2019, 15
7[MTBNH][OMs]	3,96	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Rantamäki, 2019, 15
[MTBDH][OMs]	3,86	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Rantamäki, 2019, 15

ANEXO I. DATOS DE TOXICIDAD PARA V. FISHERI Y DESCRIPTORES DE LÍQUIDOS IÓNICOS

Abrev.	LC50 µM	Y*	Im	Py	N	Pyrr	Morp	Pip	TROP	P	DABC O	G	QUINU	Mel	S	Moxa	[DBNH]	[DBUH]	[MTBNH]	[MTBDH]	Ref.
[im][CF3COO]	4,07		1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Luis P, 2010, 15
[im][CH3COO]	3,61		1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Luis P, 2010, 15
[im][CF3SO3]	3,81		1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Luis, P, 2010,15
[im][cap]	2,29		1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Luis, P, 2010, 15
[C1im][CF3COO]	3,57		1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Luis, P, 2010, 15
[C1im][CF3COO]	4,07		1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Luis, P, 2010, 15
[C1im][CF3SO3]	4,35		1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Luis, P, 2010, 15
[C1im][Cap]	2,13		1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Luis, P, 2010, 15
[C1im][HCOO]	2,83		1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Luis, P, 2010, 15
[C1im][Cl]	3,94		1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Montalban, 2016,15
[C1im][Cl]	4,31		1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Montalban, 2016,15
[MOxa][1OSO3]	3,00		0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	Hernández 2015, 10
[C1mim][1OSO3]	4,76		1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Luis, 2007, 15
[C1mim][NTf2]	3,80		1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Sonia, 2012,15
[C1mim][NTf2]	3,61		1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Delgado, 2019
[C2im][NTf2]	3,54		1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Delgado, 2019
[C2im][Cl]	4,16		1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Montalban, 2016, 15
[C2mim][2OSO3]	4,02		1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Romero, 2008, 15
[C2mim][2OSO3]	4,10		1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Montalban, 2016, 15
[C2mim][C1OSO3]	4,91		1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Costa, 2015, 15
[C2mim][Br]	4,27		1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Wang, 2015, 15 min
[C2mim][Cl]	4,55		1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Luis P, 2007, 15
[C2mim][Cl]	4,80		1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Montalban, 2015, 15
[C2mim][[(2-OPhO)2B]	2,98		1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Merck, 2010
[C2mim][[(C2F5)2PO2]	3,05		1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Merck, 2010
[C2mim][B(CN)4]	3,59		1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Merck, 2010
[C2mim][B(CN)4]	3,62		1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Viboud, 2012
[C2mim][SCN]	4,57		1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Delgado, 2019, 15
[C2mim][SCN]	4,15		1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Merck, 2010
[C2mim][CF3COO]	4,28		1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Merck, 2010
[C2mim][FeCl4]	1,51		1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Irabien, 2011,15

ANEXO I. DATOS DE TOXICIDAD PARA V. FISHERI Y DESCRIPTORES DE LÍQUIDOS IÓNICOS

Abrev.	LC50 µM	Y*	Im	Py	N	Pyrr	Morp	Pip	TROP	P	DABC O	G	QUINU	Mel	S	Moxa	[DBNH]	[DBUH]	[MTBNH]	[MTBDH]	Ref.
[C2mim][PF6]	3,92		1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Costa, 2017
[C2mim][PF6]	4,22		1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Montalban, 2016
[C2mim][(C2F5)3PF3]	1,36		1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Viboud, 2012
[C2mim][1COO]	4,23		1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Costa, 2017
[C2mim][1COO]	3,89		1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Montalban, 2016, 15
[C2mim][1COO]	4,17		1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Costa, 2015, 15 VF
[C2mim][BF4]	3,44		1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Costa, 2017
[C2mim][CF3SO3]	3,74		1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Montalban, 2016, 15
[C2mim][NTf2]	2,93		1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Sonia, 2012, 15
[C2mim][NTf2]	2,76		1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Sonia, 2012, 15
[C2mim][NTf2]	3,30		1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Costa, 2017
[C2mim][NTf2]	2,57		1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Ventura, 2011, 15
[C2mim][NTf2]	3,17		1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Delgado, 2019,15
[C2mim][NTf2]	3,62		1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Montalban, 2016,15
[C2mim][NTf2]	3,41		1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Costa, 2015,15
[C2mim][N(CN)2]	4,49		1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Delgado, 2019
[C2mim][SO3(CF2)3CF3]	3,76		1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Stolte, 2019,30
[C2mim][CO2(CF2)3CF3]	4,15		1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Stolte, 2019,30
[C2-23mim][NTf2]	3,09		1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Delgado, 2019,15
[C2-C3mim][NTf2]	2,32		1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Sonia, 2012,15
[C2mim][TCM]	4,24		1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Delgado, 2019
[OHC2mim][Gly]	4,76		1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Ghanem 2015,15 min.
[OHC2mim][ala]	4,58		1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Ghanem 2015,15 min.
[OHC2mim][ser]	4,66		1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Ghanem 2015,15 min.
[OHC2mim][pro]	4,78		1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Ghanem 2015,15 min.
[C3mim][PF6]	3,55		1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Sonia, 2012, 15
[C3mim][BF4]	3,94		1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Ranke, 2004, 30
[HOC3mim][Cl]	3,52		1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Hernández, 2015, 10
[HOC3mim][dca]	3,48		1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Hernández, 2015, 10
[C3mim][NTf2]	2,77		1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Ventura, 2010, 15
[C3mim][NTf2]	3,00		1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Delgado, 2019,15

ANEXO I. DATOS DE TOXICIDAD PARA V. FISHERI Y DESCRIPTORES DE LÍQUIDOS IÓNICOS

Abrev.	LC50 µM	Y*	Im	Py	N	Pyrr	Morp	Pip	TROP	P	DABC O	G	QUINU	Mel	S	Moxa	[DBNH]	[DBUH]	[MTBNH]	[MTBDH]	Ref.
[C3-23mim][NTf2]	2,67		1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Delgado, 2019
[C3-C3im][NTf2]	1,92		1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Sonia, 2012,15
[C4im][CH3COO]	3,32		1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Luis P, 2010,15
[C4im][Cap]	2,00		1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Luis P, 2010,15
[C4im][CF3SO3]	2,77		1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Luis P, 2010,15
[C4im][HCOO]	3,19		1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Luis P, 2010,15
[C4im][CF3COO]	3,28		1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Luis P, 2010,15
[C4mim][PF6]	3,07		1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Venture 2011, 15
[C4mim][PF6]	3,07		1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Garcia, 2005, 30
[C4mim][PF6]	3,29		1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Montalban, 2016,15
[C4mim][Cl]	3,46		1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Montalban, 2016, 15
[C4mim][Cl]	3,47		1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	stolte, 2007, 30
[C4mim][Cl]	3,34		1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	García, 2005, 30
[C4mim][Cl]	3,71		1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Docherty, 2005
[C4mim][Cl]	3,39		1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Romero,2008
[C4mim][Cl]	3,21		1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Petric, 2013, 15
[C4mim][Cl]	3,49		1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Mena, 2019, 15
[C4mim][oac]	3,47		1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Mena, 2019, 15
[C4mim][BF4]	3,10		1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Garcia, 2005,30
[C4mim][BF4]	3,55		1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Ranke, 2004
[C4mim][BF4]	3,20		1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Samori, 2010,15
[C4mim][BF4]	3,12		1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Samori 2007,15
[C4mim][BF4]	3,46		1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Montalban, 2016, 15
[C4mim][Br]	3,44		1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Wang, 2015, 15 min
[C4mmim][Br]	3,25		1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Wang, 2015, 15 min
[C4mim][Br]	3,27		1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Garcia, 2005,30
[C4mim][Br]	4,01		1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Docherty, 2005
[C4mim][Br]	3,66		1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Vivoud 2012
[C4mim][Br]	3,07		1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Ranke 2004
[C4mim][Br]	3,53		1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Venture, 2012, 15
[C4mim][Br]	3,27		1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Koutias, 2019, 5
[C4mim][Br]	3,11		1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Koutias, 2019, 15

ANEXO I. DATOS DE TOXICIDAD PARA V. FISHERI Y DESCRIPTORES DE LÍQUIDOS IÓNICOS

Abrev.	LC50 µM	Y*	Im	Py	N	Pyrr	Morp	Pip	TROP	P	DABC O	G	QUINU	Mel	S	Moxa	[DBNH]	[DBUH]	[MTBNH]	[MTBDH]	Ref.
[C4mim][NTf2]	2,53		1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Venture, 2011, 15
[C4mim][NTf2]	3,39		1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Couling, 2005, 15
[C4mim][NTf2]	2,46		1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Stolte, 2007,30
[C4mim][NTf2]	2,60		1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Delgado, 2019,15
[C4mim][NTf2]	2,51		1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Montalban, 2016,15
[C4mim][NTf2]	2,95		1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Mena, 2019,15
[C4mim][NTf2]	2,83		1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Sonia, 2012,15
[C4mim][N(CN)2]	3,44		1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Delgado, 2019,15
[C4mim][N(CN)2]	3,67		1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Docherty, 2005
[C4mim][N(CN)2]	3,11		1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Samori, 2010,15
[C4mim][SCN]	3,41		1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Delgado, 2019,15
[C4mim][SCN]	3,42		1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Costa, 2017
[C4mim][SCN]	2,37		1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Francisco 2015, 10
[C4mim][I]	3,59		1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Luis P, 2010
[C4mim][pTS]	3,52		1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Ranke, 2004
[C4mim][pTS]	3,32		1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Venture, 2012, 15
[C4mim][8OSO3]	1,85		1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Matzke 2007, 30
[C4mim][HOSO3]	2,12		1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Costa, 2017
[C4mim][HOSO3]	2,12		1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Hernandez, 2015,10
[C4mim][1OSO3]	3,57		1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Costa, 2017
[C4mim][1OSO3]	3,59		1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Venture, 2012, 15
[C4mim][1OSO3]	3,57		1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Montalban, 2016, 15
[C4mim][1OSO3]	3,16		1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Koutia, 2019,5
[C4mim][1OSO3]	3,04		1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Koutia, 2019, 15
[C4mim][C2OSO3]	3,20		1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Hernández, 2015, 10
[C4Femim][1OSO3]	1,76		1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Francisco, 2015, 10
[C4mim][(CF3)2N]	3,48		1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Matzke, 2007. 30
[C4mim][CF3SO3]	3,60		1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Cho
[C4mim][FeCl4]	1,51		1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Irabien,2011,15
[C4eim][BF4]	2,80		1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Ranke, 2004
[C4mim][TCM]	3,35		1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Delgado, 2019
[C4mim][C5SO6]	3,48		1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Costa, 2017

ANEXO I. DATOS DE TOXICIDAD PARA V. FISHERI Y DESCRIPTORES DE LÍQUIDOS IÓNICOS

Abrev.	LC50 μM	Y*	Im	Py	N	Pyrr	Morp	Pip	TROP	P	DABC O	G	QUINU	Mel	S	Moxa	[DBNH]	[DBUH]	[MTBNH]	[MTBDH]	Ref.
[C4mim][C5SO6]	3,48		1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Montalban, 2016, 15
[C4-23mim][NTf2]	2,36		1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Delgado, 2019
[C4-23mim][NTf2]	2,30		1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Sonia, 2012, 15
[C4-23mim][NTf2]	2,87		1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Montalban 2016, 15
[C4-C4im][NTf2]	2,11		1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Sonia, 2012,15
[C5mim][BF4]	3,14		1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Ranke, 2004
[C5mim][NTf2]	2,03		1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Sonia, 2012,15
[C5C5im][NTf2]	1,79		1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Sonia, 2012,15
[C5mim][Cl]	3,78		1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Moltalban, 2019,15
[C6mim][PF6]	2,17		1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	García, 2005, 30
[C6mim][PF6]	2,11		1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Romero, 2008
[C6mim][PF6]	2,36		1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Montalban, 2016,15
[C6mim][Cl]	2,18		1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Romero, 2008
[C6mim][Cl]	2,32		1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	García et al., 2005,30
[C6mim][Cl]	2,37		1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Montalban, 2016,15
[C6mim][BF4]	3,18		1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Ranke, 2004, 30
[C6mim][Br]	2,82		1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Wang, 2015, 15 min
[C6mmim][Br]	3,06		1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Wang, 2015, 15 min
[C6mim][Br]	3,13		1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Viboud, 2012
[C6mim][Br]	1,42		1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Docherty, 2005
[C6mim][NTf2]	1,71		1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Sonia, 2012, 15
[C6mim][NTf2]	1,80		1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Delgado, 2019, 15
[C6mim][NTf2]	2,11		1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Ventura, 2011, 15
[C6mim][NTf2]	2,05		1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Merck, 2010 VF
[C6C6im][NTf2]	1,95		1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Sonia, 2012, 15
[C6C6im][NTf2]	1,82		1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Montalban, 2016, 15
[C6mim][[(C2F5)3PF3]	2,65		1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Merck, 2010
[C6mim][[(2-SO2PhCO)N]	2,67		1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Merck, 2010
[C6-23mim][Cl]	1,74		1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Luis 2007,15
[C6eim] [BF4]	2,15		1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Ranke, 2004
[C7mim][NTf2]	1,62		1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Sonia, 2012,15
[C7mim][BF4]	2,44		1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Ranke, 2004

ANEXO I. DATOS DE TOXICIDAD PARA V. FISHERI Y DESCRIPTORES DE LÍQUIDOS IÓNICOS

Abrev.	LC50 µM	Y*	Im	Py	N	Pyrr	Morp	Pip	TROP	P	DABC O	G	QUINU	Mel	S	Moxa	[DBNH]	[DBUH]	[MTBNH]	[MTBDH]	Ref.
[C8mim][Br]	2,15		1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	wang, 2015, 15 min
[C8mim][Br]	2,27		1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Viboud,2012
[C8mim][Br]	0,63		1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Docherty,2005
[C8mim][Br]	0,71		1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Motalban,2018,15
[C8mim][Br]	1,76		1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Wang, 2015, 15 min
[C8mmim][Br]	1,41		1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Ranke, 2004
[C8mim][BF4]	0,91		1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Montalban, 2016, 15
[C8mim][Cl]	0,69		1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Montalban, 2016, 15
[C8mim][Cl]	1,01		1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Stolten, 2007, 30
[C8mim][Cl]	1,19		1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Garcia, 2005, 30
[C8mim][Cl]	0,94		1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Romero, 2008
[C8mim][Cl]	0,30		1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Petric, 2013, 15
[C8mim][PF6]	0,70		1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Romero, 2008
[C8mim][PF6]	0,70		1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Ventura, 2011, 15
[C8mim][PF6]	0,95		1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Garcia, 2005, 30
[C8mim][PF6]	1,25		1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Montalban, 2016, 15
[C8mim][NTf2]	1,13		1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Sonia 2012, 15
[C8mim][NTf2]	0,83		1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Merck, 2010
[C8mim][NTf2]	0,99		1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Montalban 2016, 15
[C8mim][NTf2]	0,95		1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Montalban 2018, 15
[C8mim][SbF6]	0,85		1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Montalbán, 2018,15
[C9mim][BF4]	0,72		1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Ranke, 2004
[C9mim][Cl]	1,40		1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Jafari, 2019
[C10mim][BF4]	-0,18		1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Ranke, 2004
[C10mim][Cl]	0,50		1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Ranke, 2004
[C10mim][Cl]	-0,23		1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Stolten, 2007,30
[C2OCOC10mim][Br]	1,08		1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Ventura ,2012,15
[C10mim][FeCl4]	-0,43		1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Irabien, 2011,15
[C14mim][Cl]	-0,15		1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Stolte, 2007,30
[C16mim][Cl]	0,23		1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Stolte, 2007,30
[C18mim][Cl]	1,35		1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Merck, 2010
[MOC2mim][BF4]	4,15		1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Samori, 2007, 15

ANEXO I. DATOS DE TOXICIDAD PARA V. FISHERI Y DESCRIPTORES DE LÍQUIDOS IÓNICOS

Abrev.	LC50 µM	Y*	Im	Py	N	Pyrr	Morp	Pip	TROP	P	DABC O	G	QUINU	Mel	S	Moxa	[DBNH]	[DBUH]	[MTBNH]	[MTBDH]	Ref.
[MOC2mim][BF4]	3,90		1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Samori, 2010,15
[MOC2mim][N(CN)2]	4,06		1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Samori, 2007,15
[MOC2mim][N(CN)2]	3,99		1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Samori, 2010,15
[MOC2OC2mim][BF4]	3,79		1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Samori, 2010, 15
[MOC2OC2mim][Cl]	2,26		1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Venture, 2015, 15
[MOC2OC2mim][N(CN)2]	3,88		1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Samori, 2010,15
[MOC2OC2OC2mim][BF4]	3,45		1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Samori, 2010,15
[MOC2OC2OC2mim][N(CN)2]	3,69		1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Samori, 2010,15
[MOC2OC2OC2mim][N(CN)2]	2,65		1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Samori, 2010,15
[MOC2mim][Cl]	4,18		1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Stolte, 2007,30
[MOC2mim][NTf2]	2,83		1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Stolte, 2007,30
[MOC3mim][NTf2]	3,20		1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Stolte, 2007,30
[EOC1mim][Cl]	4,08		1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Stolte, 2007,30
[EOC1mim][NTf2]	3,00		1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Stolte, 2007,30
[EOC2mim][Br]	4,28		1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Stolte, 2007,30
[EOC2mim][NTf2]	2,95		1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Stolte, 2007,30
[CIC2mim][Cl]	2,25		1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Stolte 2007
[OHC2mim][I]	3,89		1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Stolte, 2007,30
[OHC2mim][Cl]	5,34		1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Montalban, 2016,15
[OHC2mim][NTf2]	4,05		1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Stolte, 2007,30
[OHC3mim][NTf2]	3,81		1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Stolte, 2007,30
[OHC3mim][SO3(CF2)3CF3]	4,06		1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Stolte, 2019,30
[OHC3mim][CO2(CF2)3CF3]	4,57		1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Stolte, 2019,30
[CNC1mim][NTf2]	3,81		1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Stolte, 2007,30
[Phmim][N(CN)2]	2,84		1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Delgado, 2019
[ImidC2Phe][Br]	3,49		1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Kusuma, 2019,30
[ImidC4Phe][Br]	2,33		1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Kusuma, 2019,30
[ImidC6Phe][Br]	1,38		1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Kusuma, 2019,30
[ImidC8Phe][Br]	1,29		1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Kusuma, 2019,30
[Imid10Phe][Br]	0,95		1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Kusuma, 2019,30
[Imid12Phe][Br]	0,92		1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Kusuma, 2019,30
[Imid14Phe][Br]	0,92		1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Kusuma, 2019,30

ANEXO I. DATOS DE TOXICIDAD PARA V. FISHERI Y DESCRIPTORES DE LÍQUIDOS IÓNICOS

Abrev.	LC50 µM	Y*	Im	Py	N	Pyrr	Morp	Pip	TROP	P	DABC O	G	QUINU	Mel	S	Moxa	[DBNH]	[DBUH]	[MTBNH]	[MTBDH]	Ref.
[ImidC16Phe][Br]	>1,80		1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Kusuma, 2019,30
[C10C6Omim][Cl]	-0,85		1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Nalecz-Jawecki, 2003, 15
[C10cC6Omim][Cl]	-0,85		1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Nalecz-Jawecki, 2003, 15
[C10C6Smim][Cl]	-0,66		1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Nalecz-Jawecki, 2003, 15
[13mim][NTf2]	3,61		1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Delgado, 2019
[Amim][NTf2]	2,94		1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Delgado, 2019
[Amim][N(CN)2]	4,31		1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Delgado, 2019
[Amim][Cl]	4,36		1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Montalban, 2016, 15
[C2-4mPy][NTf2]	2,73		0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Delgado, 2019
[C2-4mPy][2OSO3]	3,83		0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Montalban, 2016, 15
[OHC3Py][NTf2]	4,01		0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Merck, 2010
[C2-4mPy][CO2(CF2)3CF3]	3,68		0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Stote, 2019,30
[C2-4mPy][NTf2]	2,73		0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Delgado, 2019
[C3-3mPy][NTf2]	1,90		0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Sonia, 2012,15
[C3-3mPy][PF6]	2,79		0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Sonia, 2012,15
[pyC2Phe][Br]	3,34		0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Kusuma, 2019,30
[pyC4Phe][Br]	2,28		0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Kusuma, 2019,30
[pyC6Phe][Br]	1,40		0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Kusuma, 2019,30
[pyC8Phe][Br]	1,29		0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Kusuma, 2019,30
[pyC10Phe][Br]	0,94		0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Kusuma, 2019,30
[pyC12Phe][Br]	0,89		0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Kusuma, 2019,30
[pyC14Phe][Br]	0,96		0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Kusuma, 2019,30
[pyC16Phe][Br]	>1,80		0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Kusuma, 2019,30
[Py][CF3SO3]	2,52		0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Koutinas, 2020, 5
[Py][CF3SO3]	2,52		0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Koutinas, 2020, 15
[C4Py][N(CN)2]	3,30		0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Docherty, 2005
[C4Py][Br]	3,38		0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Wang, 2015, 15
[C4Py][Br]	3,72		0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Vivoud 2012
[C4Py][Br]	3,39		0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Docherty, 2005
[C4Py][Cl]	3,30		0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Docherty, 2005
[C4Py][Cl]	3,18		0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Stolte, 2007,30

ANEXO I. DATOS DE TOXICIDAD PARA V. FISHERI Y DESCRIPTORES DE LÍQUIDOS IÓNICOS

Abrev.	LC50 μM	Y*	Im	Py	N	Pyrr	Morp	Pip	TROP	P	DABC O	G	QUINU	Mel	S	Moxa	[DBNH]	[DBUH]	[MTBNH]	[MTBDH]	Ref.
[C4Py][Cl]	3,24		0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Petric, 2013, 15
[C4Py][Al2Cl7]	3,01		0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Merck, 2010
[C4Py][NTf2]	2,44		0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Delgado, 2019, 15
[C4-3mPy][Br]	3,14		0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Wang, 2015, 15
[C4-3mPy][Br]	2,75		0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Docherty, 2005
[C4-3mPy][N(CN)2]	2,66		0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Docherty, 2005
[C4-3mPy][BF4]	3,30		0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Costa, 2017
[C4-4mPy][BF4]	2,44		0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Montalban, 2016, 15
[C4-4mPy][BF4]	1,51		0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Hernández, 2015, 10
[C4-4mPy][BF4]	3,02		0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Merck, 2010
[C4-4mPy][BF4]	2,38		0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Costa, 2015, 15
[C4-4mPy][Cl]	3,32		0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Costa, 2017
[C4-4mPy][Cl]	3,04		0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Costa, 2015, 15
[C4-4mPy][TCM]	2,68		0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Delgado, 2019
[C4-4mPy][NTf2]	2,04		0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Delgado, 2019
[C4-23mPy][Br]	2,24		0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Wang, 2015, 15
[C4-23mPy][Br]	2,93		0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Viboud, 2012
[C4-23mPy][CF3SO3]	2,84		0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Viboud, 2012
[C4-35mPy][N(CN)2]	2,38		0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Docherty, 2005
[C4-35mPy][Br]	2,69		0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Docherty, 2005
[C4-35mPy][Br]	2,49		0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Viboud, 2012
[C4-35mPy][SCN]	2,25		0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Viboud, 2012
[C4-35mPy][NTf2]	1,86		0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Viboud, 2012
[C4-235mPy][Br]	2,37		0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Wang, 2015, 15
[C4-235mPy][Br]	2,48		0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Viboud, 2012(31)
[C4-235mPy][NTf2]	1,56		0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Viboud, 2012(31)
[C4-4C1NPy][Br]	2,52		0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Stolte, 2007, 30
[C4-4C1NPy][Br]	2,32		0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Couling, 2005, 15
[C4-4C1NPy][Cl]	2,52		0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Stolte, 2007, 30
[C4-4C1NPy][NTf2]	1,85		0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Stolte, 2007, 30
[C6Py][Br]	2,69		0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Wang, 2015, 15
[C6Py][Br]	2,85		0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Viboud, 2012

ANEXO I. DATOS DE TOXICIDAD PARA V. FISHERI Y DESCRIPTORES DE LÍQUIDOS IÓNICOS

Abrev.	LC50 µM	Y*	Im	Py	N	Pyrr	Morp	Pip	TROP	P	DABC O	G	QUINU	Mel	S	Moxa	[DBNH]	[DBUH]	[MTBNH]	[MTBDH]	Ref.
[C6-3mPy][Cl]	2,40		0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Cao, 2018
[C6-4mPy][Br]	2,11		0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Wang, 2015, 15
[C6-4mPy][Br]	2,07		0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Docherty, 2005
[C6-4mPy][Cl]	1,44		0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Luis, 2007,15
[C6-4C1NPY][NTf2]	1,38		0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Merck, 2010
[C8Py][Cl]	1,69		0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Merck, 2010
[C8Py][SbF6]	1,13		0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Montalbán, 2018
[C8Py][Br]	1,69		0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Wang, 2015, 15
[C8Py][Br]	1,89		0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Viboud, 2012
[C8Py][Br]	1,27		0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Montalban, 2018,15
[C8Py][NTf2]	1,51		0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Montalban, 2018,15
[C8-3mPy][Br]	1,36		0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Wang, 2015, 15
[C8-3mPy][Br]	0,79		0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Docherty, 2005
[C8-23mPy][Br]	1,08		0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Viboud, 2012
[C8-35mPy][Br]	1,12		0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Viboud, 2012
[C8-35mPy][NTf2]	0,36		0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Papaiconomou, 2010
[C8-35mPy][BF4]	0,97		0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Viboud, 2012
[C8-2m5ePy][Br]	0,59		0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Viboud, 2012
[C8-235mPy][Br]	0,61		0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Wang, 2015, 15
[C8-235mPy][Br]	0,62		0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Viboud, 2012
[C8-235mPy][NTf2]	0,62		0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Viboud, 2012
[C12SmPy][Cl]	-0,54		0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Nalecz-Jawecki, 2003
[3C1-C12SmPy][Cl]	-0,77		0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Nalecz-Jawecki, 2003
[35C1-C12SmPy][Cl]	-0,89		0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Nalecz-Jawecki, 2003
[N00-2MO-2MO][N00SO3]	4,03		0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Cho
[N000-2OH][Ehexato]	2,62		0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Viesca, 2020, 15
[N001-2OH][Ehexato]	2,35		0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Viesca, 2020, 15
[N011-2OH][Ehexato]	2,31		0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Viesca, 2020, 15
[N000-2OH][DBS]	2,08		0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Viesca, 2020, 15
[N001-2OH][DBS]	2,00		0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Viesca, 2020, 15
[N011-2OH][DBS]	1,95		0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Viesca, 2020, 15
[N111-2OH][1COO]	4,34		0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Costa, 2015,15

ANEXO I. DATOS DE TOXICIDAD PARA V. FISHERI Y DESCRIPTORES DE LÍQUIDOS IÓNICOS

Abrev.	LC50 μM	Y*	Im	Py	N	Pyrr	Morp	Pip	TROP	P	DABC O	G	QUINU	Mel	S	Moxa	[DBNH]	[DBUH]	[MTBNH]	[MTBDH]	Ref.
[N111-2OH][1COO]	3,67		0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Mena, 2019,15
[N111-2OH][H2PO4]	3,76		0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Hernández, 2015,10
[N111-2OH][NTf2]	4,15		0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Couling, 2005, 15
[N111-2OH][NTf2]	3,08		0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Mena, 2019,15
[N111-2OH][Cl]	6,17		0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Viboud, 2012
[N111-2OH][Cl]	3,64		0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Mena, 2019,15
[N111-2OH][SO3(CF2)3CF3]	4,19		0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Stolen, 2019, 30
[N111-2OH][CO2(CF2)3CF3]	4,52		0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Stolen, 2019, 30
[coliC2Phe][Br]	3,46		0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Kusuma, 2019,30
[coliC4Phe][Br]	2,34		0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Kusuma, 2019,30
[coliC6Phe][Br]	1,51		0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Kusuma, 2019,30
[coliC8Phe][Br]	1,62		0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Kusuma, 2019,30
[coliC10Phe][Br]	1,04		0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Kusuma, 2019,30
[coliC12Phe][Br]	0,90		0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Kusuma, 2019,30
[coliC14Phe][Br]	0,90		0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Kusuma, 2019,30
[coliC16Phe][Br]	>1,80		0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Kusuma, 2019,30
[Chol][DHCit]	1,99		0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Ventura, 2014, 5
[Chol][DHCit]	2,08		0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Ventura, 2014, 15
[Chol][DHCit]	2,10		0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Ventura, 2014, 30
[Chol][Cl]	2,77		0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Ventura, 2014, 5
[Chol][Cl]	2,77		0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Ventura, 2014, 15
[Chol][Cl]	2,73		0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Ventura, 2014, 30
[Bzchol][Cl]	3,44		0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Ventura, 2014, 5
[Bzchol][Cl]	3,23		0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Ventura, 2014, 15
[Bzchol][Cl]	3,22		0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Ventura, 2014, 30
[Chol][Bit]	1,91		0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Ventura, 2014, 5
[Chol][Bit]	2,00		0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Ventura, 2014, 15
[Chol][Bit]	1,98		0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Ventura, 2014, 30
[Chol][But]	3,64		0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Ventura, 2014, 5
[Chol][But]	3,65		0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Ventura, 2014, 15
[Chol][But]	3,66		0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Ventura, 2014, 30
[Chol][Prop]	3,58		0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Ventura, 2014, 5

ANEXO I. DATOS DE TOXICIDAD PARA V. FISHERI Y DESCRIPTORES DE LÍQUIDOS IÓNICOS

Abrev.	LC50 µM	Y*	Im	Py	N	Pyrr	Morp	Pip	TROP	P	DABC O	G	QUINU	Mel	S	Moxa	[DBNH]	[DBUH]	[MTBNH]	[MTBDH]	Ref.
[Chol][Prop]	3,47		0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Ventura, 2014, 15
[Chol][Prop]	3,44		0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Ventura, 2014, 30
[Chol][Ac]	3,87		0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Ventura, 2014, 5
[Chol][Ac]	3,72		0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Ventura, 2014, 15
[Chol][Ac]	3,62		0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Ventura, 2014, 30
[Chol][Sal]	3,26		0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Ventura, 2014, 5
[Chol][Sal]	3,14		0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Ventura, 2014, 15
[Chol][Sal]	2,99		0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Ventura, 2014, 30
[Chol][Sal]	2,95		0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Sitra 2015, 5
[Chol][Sal]	2,80		0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Sitra 2015, 15
[Chol][Sal]	2,65		0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Sitra 2015, 30
[Chol][gal]	4,13		0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Sitra 2015, 5
[Chol][gal]	3,85		0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Sitra 2015, 15
[Chol][gal]	3,78		0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Sitra 2015, 30
[Chol][caf]	3,49		0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Sitra 2015, 5
[Chol][caf]	3,46		0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Sitra 2015, 15
[Chol][caf]	3,41		0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Sitra 2015, 30
[Chol][val]	3,46		0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Sitra 2015, 5
[Chol][val]	3,58		0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Sitra 2015, 15
[Chol][val]	3,52		0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Sitra 2015, 30
[Chol][sig]	3,18		0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Sitra 2015, 5
[Chol][sig]	3,18		0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Sitra 2015, 15
[Chol][sig]	3,16		0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Sitra 2015, 30
[Chol][neod]	2,75		0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Ratamaki 2017, 5
[Chol][neod]	2,72		0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Ratamaki 2017, 15 min
[Chol][dec]	2,00		0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Ratamaki 2017, 5 min
[Chol][dec]	2,00		0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Ratamaki 2017, 15 min
[Chol][isost]	2,11		0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Ratamaki 2017, 5 min
[Chol][isost]	1,87		0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Ratamaki 2017, 15 min
[N ₀₀₀ -2OH][HCO ₂]	3,82		0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Petric, 2013, 15
[N ₀₀₂ OH-2OH][HCO ₂]	3,72		0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Petric, 2013, 15

ANEXO I. DATOS DE TOXICIDAD PARA V. FISHERI Y DESCRIPTORES DE LÍQUIDOS IÓNICOS

Abrev.	LC50 μM	Y*	Im	Py	N	Pyrr	Morp	Pip	TROP	P	DABC O	G	QUINU	Mel	S	Moxa	[DBNH]	[DBUH]	[MTBNH]	[MTBDH]	Ref.
[N _{0020H-20H}][CCO ₂]	4,03		0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Petric, 2013, 15
[N _{0020H-20H}][C ₂ CO ₂]	3,56		0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Petric, 2013, 15
[N _{0020H-20H}][C ₃ CO ₂]	3,62		0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Petric, 2013, 15
[N _{0020H-20H}][C ₃ CO ₂]	3,64		0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Petric, 2013, 15
[N _{0020H-20H}][C ₄ CO ₂]	3,23		0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Petric, 2013, 15
[N _{020H20H-20H}][C ₃ CO ₂]	3,32		0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Petric, 2013, 15
[N _{020H20H-20H}][C ₄ CO ₂]	3,26		0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Petric, 2013, 15
[N _{000-20H}][C ₃ CO ₂]	4,18		0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Petric, 2013, 15
[N _{000-2c}][NO ₃]	4,32		0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Motalban, 2016, 15
[N _{4,4,4,4}][Cl]	3,39		0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Costa, 2015, 15
[N _{4,4,4,4}][I]	3,27		0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Koutias, 2019,5
[N _{4,4,4,4}][I]	2,93		0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Koutias, 2019, 15
[N _{4,4,4,4}][PF ₆]	2,45		0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Koutias, 2019, 15
[N _{4,4,4,4}][PF ₆]			0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Koutias, 2019, 15
[N ₈₈₈₋₁] [c6:0]	2,14		0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Oulego, 2019, 15
[N ₈₈₈₋₁] [c8:0]	2,06		0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Oulego, 2019, 15
[N ₈₈₈₋₁] [c12:0]	1,98		0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Oulego, 2019, 15
[N ₈₈₈₋₁] [c16:0]	1,86		0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Oulego, 2019, 15
[N ₈₈₈₋₁] [c18:0]	1,80		0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Oulego, 2019, 15
[N ₈₈₈₋₁] [c18:1]	1,25		0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Oulego, 2019, 15
[N ₁₁₁₋₁₂][Br]	-0,11		0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Garcia, 2001, 30
[N ₁₁₁₋₁₄][Br]	-0,08		0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Garcia, 2001, 30
[N ₁₁₁₋₁₆][Br]	0,24		0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Garcia, 2001, 30
[N ₁₁₁₋₁₆][Cl]	0,40		0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Merck, 2010
[N _{112-1EOCo}][NTf ₂]	3,32		0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Merck, 2010
[N _{112-2MO}][NTf ₂]	3,35		0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Merck, 2010
[N ₁₁₂₄][NTf ₂]	3,21		0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Stoite, 2007,30
[N _{118-1C10oX}][Cl]	-0,09		0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Nalecz-Jawecki, 2003,15
[N _{11-12-1Ph}][Br]	-0,33		0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Garcia, 2001,30
[N _{11-12-1Ph}][Cl]	-0,23		0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Merck, 2010
[N _{11-12-1C8O}][Cl]	0,39		0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Nalecz-Jawecki, 2003,15

ANEXO I. DATOS DE TOXICIDAD PARA V. FISHERI Y DESCRIPTORES DE LÍQUIDOS IÓNICOS

Abrev.	LC50 µM	Y*	Im	Py	N	Pyrr	Morp	Pip	TROP	P	DABC O	G	QUINU	Mel	S	Moxa	[DBNH]	[DBUH]	[MTBNH]	[MTBDH]	Ref.
[N _{11-12-1C90}][Cl]	0,38		0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Nalecz-Jawecki, 2003,15
[N _{11-12-1C100}][Cl]	0,60		0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Nalecz-Jawecki, 2003,15
[N _{11-14-1Ph}][Br]	-0,39		0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Garcia, 2001, 30
[N _{11-16-1Ph}][Br]	0,11		0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Garcia, 2001, 30
[N _{11-16-1Ph}][Cl]	-0,31		0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Merck, 2010
[N _{11-Ph-1C80}][Cl]	-0,70		0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Nalecz-Jawecki, 2003, 15
[N _{11-Ph-1C100}][Cl]	-0,62		0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Nalecz-Jawecki, 2003, 15
[N _{11-Ph-1C120}][Cl]	-0,38		0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Nalecz-Jawecki, 2003, 15
[N ₂₂₂₀][CH ₃ SO ₃]	5,41		0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Ratamaki, 2019, 15
[N ₂₂₂₆][Br]	2,46		0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Couling, 2005
[N ₄₄₄₄][Br]	3,27		0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Couling, 2005
[C _{8m} Pyrr][SbF ₆]	1,69		0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Montalbán, 2018
[C _{3m} Pyrr][PF ₆]	4,01		0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Sonia, 2012, 15
[C _{3m} Pyrr][NTf ₂]	3,29		0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Sonia, 2012, 15
[C _{4m} Pyrr][NTf ₂]	2,54		0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Stolten, 2007, 30
[C _{4m} Pyrr][NTf ₂]	2,72		0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Viboud, 2012
[C _{4m} Pyrr][(C ₂ F ₅) ₃ PF ₃]	1,70		0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Merck, 2010
[C _{4m} Pyrr][Br]	4,40		0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Viboud, 2012
[C _{4m} Pyrr][Br]	4,00		0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Wang, 2015, 15
[C _{4m} Pyrr][N(CN) ₂]	4,26		0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Viboud, 2012
[C _{4m} Pyrr][N(CN) ₂]	4,34		0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Hernández, 2015, 10
[C _{4m} Pyrr][CF ₃ SO ₃]	3,98		0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Viboud, 2012
[C _{6m} Pyrr][Cl]	2,99		0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Luis, 2007, 15
[C _{6m} Pyrr][NTf ₂]	2,40		0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Merck, 2010
[C _{6m} Pyrr][Br]	3,19		0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Viboud, 2012
[C _{6m} Pyrr][Br]	2,95		0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Wang, 2015, 15
[C _{8m} Pyrr][Cl]	2,17		0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Viboud, 2012
[C _{8m} Pyrr][NTf ₂]	1,58		0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Viboud, 2012
[C _{8m} Pyrr][NTf ₂]	1,53		0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Montalban, 2018,15
[C _{8m} Pyrr][SbF ₆]	1,69		0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Montalban, 2018,15

ANEXO I. DATOS DE TOXICIDAD PARA V. FISHERI Y DESCRIPTORES DE LÍQUIDOS IÓNICOS

Abrev.	LC50 μM	Y*	Im	Py	N	Pyrr	Morp	Pip	TROP	P	DABC O	G	QUINU	Mel	S	Moxa	[DBNH]	[DBUH]	[MTBNH]	[MTBDH]	Ref.
[C ₈ mPyrr][Br]	2,26		0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Viboud, 2012
[C ₈ mPyrr][Br]	2,15		0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Wang, 2015, 15
[C ₈ -3mPyrr][Br]	1,66		0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Montalban, 2018,15
[EO-OC ₂ mPyrr][NTf ₂]	3,23		0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Merck, 2010
[EOC ₂ mPyrr][NTf ₂]	2,97		0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Merck, 2010
[OHC ₃ mPyrr][NTf ₂]	3,91		0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Merck, 2010
[C ₄ -C ₃ CNPyr][Br]	5,33		0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Viboud, 2012
[C ₂ mMorp][Br]	5,21		0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Pretti, 2011,30
[C ₄ mMorp][Br]	4,87		0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Pretti, 2011,30
[C ₄ mMorp][NTf ₂]	2,49		0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Stolte, 2007,30
[C ₄ mMorp][Br]	5,45		0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Viboud, 2012
[C ₄ mMorp][N(CN) ₂]	4,89		0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Viboud, 2012
[C ₄ mMorp][CF ₃ SO ₃]	4,40		0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Viboud, 2012
[C ₆ mMorp][Br]	3,94		0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Pretti, 2011,30
[C ₈ mMorp][Br]	2,56		0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Viboud, 2012
[C ₈ mMorp][Br]	2,38		0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Pretti, 2011,30
[C ₁₀ mMorp][Br]	1,30		0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Pretti, 2011,30
[EOC ₁ mMorp][NTf ₂]	3,38		0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Cho
[4,5][OAC]	4,64		0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Ramataki, 2019,15
[5,5][OAC]	4,08		0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Ramataki, 2019,15
[5,6][OAC]	4,02		0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Ramataki, 2019,15
[C ₃ mPip][PF ₆]	3,59		0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Sonia, 2012,15
[C ₃ mPip][NTf ₂]	3,01		0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Sonia, 2012,15
[C ₄ mPip][Br]	3,84		0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Wang, 2015, 15
[C ₄ mPip][Br]	4,22		0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Viboud, 2012
[C ₄ mPip][Br]	4,27		0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Stolte, 2007,30
[C ₄ mPip][NTf ₂]	2,56		0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Stolte, 2007,30
[C ₆ mPip][Br]	2,76		0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Wang, 2015, 15
[C ₆ mPip][Br]	2,94		0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Viboud, 2012
[C ₈ mPip][Br]	1,91		0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Wang, 2015, 15
[C ₈ mPip][Br]	2,00		0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Viboud, 2012
[C _{4e} Pip][Br]	3,66		0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Wang, 2015, 15

ANEXO I. DATOS DE TOXICIDAD PARA V. FISHERI Y DESCRIPTORES DE LÍQUIDOS IÓNICOS

Abrev.	LC50 μM	Y*	Im	Py	N	Pyrr	Morp	Pip	TROP	P	DABC O	G	QUINU	Mel	S	Moxa	[DBNH]	[DBUH]	[MTBNH]	[MTBDH]	Ref.
[C ₆ ePip][Br]	3,96		0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Viboud, 2012
[C ₈ ePip][Br]	1,79		0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Wang, 2015, 15
[C ₈ ePip][Br]	1,80		0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Viboud, 2012
[C ₈ ePip][I]	2,20		0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Viboud, 2012
[C ₈ ePip][SCN]	1,50		0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Viboud, 2012
[C ₄ TROP][Br]	5,36		0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Viboud, 2012
[C ₄ TROP][I]	4,74		0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Viboud, 2012
[C ₄ TROP][NTf ₂]	2,61		0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Viboud, 2012
[C ₄ TROP][SCN]	4,07		0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Viboud, 2012
[C ₈ TROP][NTf ₂]	2,17		0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Jafari, 2019
[C ₈ TROP][N(CN) ₂]	2,52		0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Viboud, 2012
[C ₈ TROP][BF ₄]	2,77		0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Viboud, 2012
[Bu ₃ NC ₄][Sac]	3,11		0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Parajo, 2019,15
[Bu ₃ NC ₄][Sac]	2,92		0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Parajo, 2019,30
[Bu ₃ NC ₂][Sac]	2,36		0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Parajo, 2019,15
[Bu ₃ NC ₂][Sac]	2,18		0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Parajo, 2019,30
[Me ₃ NC ₂ OC ₁₂][doc]	0,69		0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Parajo, 2019,15
[Me ₃ NC ₂ OC ₁₂][doc]	0,65		0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Parajo, 2019,30
[Me ₃ NC ₂ OC ₁₂][SCN]	0,35		0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Parajo, 2019,15
[Me ₃ NC ₂ OC ₁₂][SCN]	0,25		0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Parajo, 2019,30
[Me ₃ NC ₂ OC ₁₄][doc]	0,28		0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Parajo, 2019,15
[Me ₃ NC ₂ OC ₁₄][doc]	0,27		0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Parajo, 2019,30
[Me ₃ NC ₂ OC ₁₄][SCN]	0,47		0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Parajo, 2019,15
[Me ₃ NC ₂ OC ₁₄][SCN]	0,38		0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Parajo, 2019,30
[Bu ₃ pC ₂][Sac]	1,54		0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Parajo, 2019,15
[Bu ₃ pC ₂][Sac]	1,47		0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Parajo, 2019,30
[Bu ₃ pC ₄][Sac]	2,12		0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Parajo, 2019,15
[Bu ₃ pC ₄][Sac]	1,82		0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Parajo, 2019,30
[P ₂₄₄₄][dC ₂ -PO ₄]	3,07		0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Couling, 2005,15
[P ₂₄₄₄][diC ₃ -PO ₄]	3,07		0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Couling, 2005
[P ₄₄₄₄][Br]	2,71		0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Couling, 2005,15
[P ₄₄₄₄][Br]	2,71		0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Venture, 2012, 15

ANEXO I. DATOS DE TOXICIDAD PARA V. FISHERI Y DESCRIPTORES DE LÍQUIDOS IÓNICOS

Abrev.	LC50 μM	Y*	Im	Py	N	Pyrr	Morp	Pip	TROP	P	DABC O	G	QUINU	Mel	S	Moxa	[DBNH]	[DBUH]	[MTBNH]	[MTBDH]	Ref.
[P ₄₄₄ 1][Tosilate]	2,64		0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Venture, 2012, 15
[P ₄₄₄ 1][Tosilate]	2,44		0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Hernández, 2015, 10
[P ₄₄₄ 1][CH ₃ SO ₃]	2,86		0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Venture, 2012, 15
[P ₄₄₄ 1][CH ₃ SO ₃]	2,64		0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Hernández, 2015, 10
[P ₆₆₆₋₁₄][Br]	3,41		0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Couling, 2005,15
[P ₆₆₆₋₁₄][Br]	1,05		0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Ventura, 2012, 15
[P ₆₆₆₋₁₄][Cl]	1,14		0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Ventura, 2012, 15
[P ₆₆₆₋₁₄][CH ₃ SO ₃]	1,11		0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Ventura, 2012, 15
[P ₆₆₆₋₁₄][(C ₂ F ₅) ₃ PF ₆]	1,70		0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Merck, 2010
[P ₈₈₈₋₁][OAC]	0,28		0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Rantamäki, 2019, 15
[C ₂ mDABCO][Br]	5,58		0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Pretti, 2011,30
[C ₄ mDABCO][Br]	4,87		0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Pretti, 2011,30
[C ₆ mDABCO][Br]	3,69		0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Pretti, 2011,30
[C ₈ mDABCO][Br]	2,35		0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Pretti, 2011,30
[C ₁₀ mDABCO][Br]	1,26		0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Pretti, 2011,30
[G ₁₁₁₁][CH ₃ SO ₃]	3,96		0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	Ratamaki, 2019,15
[G ₁₁₁₁][CF ₃ COO]	0,47		0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	Luis P, 2010,15
[G ₁₁₁₁][1COO]	3,17		0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	Luis P, 2010,15
[G ₁₁₁₁][CF ₃ SO ₃]	3,52		0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	Luis P, 2010,15
[G ₁₁₁₁][Cap]	2,29		0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	Luis P, 2010,15
[G ₁₁₁₁][Isost]	1,97		0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	Ratamaki, 2017, 5
[G ₁₁₁₁][Isost]	1,79		0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	Ratamaki, 2017, 15
[G ₁₁₁₁][neod]	2,85		0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	Ratamaki, 2017, 5
[G ₁₁₁₁][neod]	2,81		0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	Ratamaki, 2017, 15
[TMGC ₄][I]	1,94		0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	Venture et al., 2012,15
[TMGC ₇][I]	0,93		0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	Venture et al., 2012,15
[TMGC ₁₂][I]	1,43		0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	Venture et al., 2012,15
[(di-h) ₂ DMG][Cl]	0,92		0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	Venture et al., 2012,15
[(C ₃ O) ₄ DMG][Cl]	2,44		0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	Venture et al., 2012,15
[(C ₃ O) ₄ DMG][isost]	1,99		0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	Ratamaki, 2017, 5

ANEXO I. DATOS DE TOXICIDAD PARA V. FISHERI Y DESCRIPTORES DE LÍQUIDOS IÓNICOS

Abrev.	LC50 μM	Y*	Im	Py	N	Pyrr	Morp	Pip	TROP	P	DABC O	G	QUINU	Mel	S	Moxa	[DBNH]	[DBUH]	[MTBNH]	[MTBDH]	Ref.
[(C ₃ O)4DMG][isost]	1,82		0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	Ratamaki, 2017, 15
[(C ₃ O)4DMG][neod]	2,86		0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	Ratamaki, 2017, 5
[(C ₃ O)4DMG][neod]	2,84		0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	Ratamaki, 2017, 15
[C ₄ QUINU][Br]	4,45		0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	Viboud, 2012
[C ₈ QUINU][Br]	2,32		0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	Viboud, 2012
[C ₈ QUINU][N(CN)2]	2,26		0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	Viboud, 2012
[Mel][1COO]	2,39		0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	Luis P, 2010,15
[Mel][CF ₃ COO]	2,24		0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	Luis P, 2010,15
[Mel][CF ₃ SO ₃]	2,45		0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	Luis P, 2010,15
[S ₂₂₂][NTf ₂]	3,26		0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	Merck, 2010
[DBNH][OMs]	4,02		0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	Rantamäki, 2019, 15
[DBUH][OMs]	3,77		0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	Rantamäki, 2019, 15
5[MTBNH][OMs]	3,96		0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	Rantamäki, 2019, 15
7[MTBNH][OMs]	3,96		0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	Rantamäki, 2019, 15
[MTBDH][OMs]	3,86		0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	Rantamäki, 2019, 15

ANEXO I. DATOS DE TOXICIDAD PARA V. FISHERI Y DESCRIPTORES DE LÍQUIDOS IÓNICOS

Abrev.	LC50 µM	n° C más larga unida a N del catión	n° C más corta unida a N del catión	n°C sustitución alquímica en C del catión	n° de O en S*, S* no tiene porque ser cadena larga	n° de Cl en S*	n° de Si en S*	n° de N en S*	n° de azufres en S*	n° de OH en S*	n° de CN en S*	n° de Cy6 en S*	SP/N/S/G	n° de dobles enlaces cadenas más larga unida a N	n° de COO- en S*	n° de fenil a C del catión	n° de CONh en S*	n° C de cada ciclica unida a N del catión	piridil unida a N del catión	Ref.
[im][CF ₃ COO]	4,07	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Luis P, 2010, 15
[im][CH ₃ COO]	3,61	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Luis P, 2010, 15
[im][CF ₃ SO ₃]	3,81	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Luis, P, 2010,15
[im][cap]	2,29	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Luis, P, 2010, 15
[C ₁ im][CF ₃ COO]	3,57	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Luis, P, 2010, 15
[C ₁ im][CF ₃ COO]	4,07	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Luis, P, 2010, 15
[C ₁ im][CF ₃ SO ₃]	4,35	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Luis, P, 2010, 15
[C ₁ im][Cap]	2,13	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Luis, P, 2010, 15
[C ₁ im][HCOO]	2,83	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Luis, P, 2010, 15
[C ₁ im][Cl]	3,94	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Montalban, 2016,15
[C ₁ im][Cl]	4,31	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Montalban, 2016,15
[MOxa][1OSO ₃]	3,00	1	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Hernández 2015, 10
[C ₁ mim][1OSO ₃]	4,76	1	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Luis, 2007, 15
[C ₁ mim][NTf ₂]	3,80	1	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Sonia, 2012,15
[C ₁ mim][NTf ₂]	3,61	1	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Delgado, 2019
[C ₂ im][NTf ₂]	3,54	2	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Delgado, 2019
[C ₂ im][Cl]	4,16	2	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Montalban, 2016, 15
[C ₂ mim][2OSO ₃]	4,02	2	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Romero, 2008, 15
[C ₂ mim][2OSO ₃]	4,10	2	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Montalban, 2016, 15

ANEXO I. DATOS DE TOXICIDAD PARA V. FISHERI Y DESCRIPTORES DE LÍQUIDOS IÓNICOS

Abrev.	LC50 μ M	n° C más larga unida a N del catión	n° C más corta unida a N del catión	n° C sustitución alquímica en C del catión	n° de O en S ⁺ , S ⁺ no tiene porque ser cadena larga	n° de Cl en S ⁺	n° de Si en S ⁺	n° de N en S ⁺	n° de azufres en S ⁺	n° de OH en S ⁺	n° de CN en S ⁺	n° de Cy6 en S ⁺	SP/N/S/G	n° de enlaces cadenas más larga unida a N	n° de COO- en S ⁺	n° de fenil a C del catión	n° de CONh en S ⁺	n° C de cadea ciclica unida a N del catión	piridil unida a N del catión	Ref.
[C ₂ mim][C ₁ OSO ₃]	4,91	2	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Costa, 2015, 15
[C ₂ mim][Br]	4,27	2	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Wang, 2015, 15 min
[C ₂ mim][Cl]	4,55	2	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Luis P, 2007, 15
[C ₂ mim][Cl]	4,80	2	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Montalban, 2015, 15
[C ₂ mim][[(2-OPhO) ₂ B]	2,98	2	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Merck, 2010
[C ₂ mim][[(C ₂ F ₅) ₂ PO ₂]	3,05	2	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Merck, 2010
[C ₂ mim][B(CN) ₄]	3,59	2	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Merck, 2010
[C ₂ mim][B(CN) ₄]	3,62	2	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Viboud, 2012
[C ₂ mim][SCN]	4,57	2	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Delgado, 2019, 15
[C ₂ mim][SCN]	4,15	2	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Merck, 2010
[C ₂ mim][CF ₃ COO]	4,28	2	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Merck, 2010
[C ₂ mim][FeCl ₄]	1,51	2	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Irabien, 2011,15
[C ₂ mim][PF ₆]	3,92	2	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Costa, 2017
[C ₂ mim][PF ₆]	4,22	2	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Montalban, 2016
[C ₂ mim][[(C ₂ F ₅) ₃ PF ₃]	1,36	2	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Viboud, 2012
[C ₂ mim][1COO]	4,23	2	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Costa, 2017
[C ₂ mim][1COO]	3,89	2	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Montalban, 2016, 15
[C ₂ mim][1COO]	4,17	2	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Costa, 2015, 15 VF
[C ₂ mim][BF ₄]	3,44	2	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Costa, 2017
[C ₂ mim][CF ₃ SO ₃]	3,74	2	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Montalban, 2016, 15

ANEXO I. DATOS DE TOXICIDAD PARA V. FISHERI Y DESCRIPTORES DE LÍQUIDOS IÓNICOS

Abrev.	LC50 μ M	n° C más larga unida a N del catión	n° C más corta unida a N del catión	n° C sustitución alquímica en C del catión	n° de O en S*, S* no tiene porque ser cadena larga	n° de Cl en S*	n° de Si en S*	n° de N en S*	n° de azufres en S*	n° de OH en S*	n° de CN en S*	n° de Cy6 en S*	SP/N/S/G	n° de dobles enlaces cadenas más larga unida a N	n° de COO- en S*	n° de fenil a C del catión	n° de CONh en S*	n° C de cadea ciclica unida a N del catión	piridil unida a N del catión	Ref.
[C ₂ mim][NTf ₂]	2,93	2	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Sonia, 2012, 15
[C ₂ mim][NTf ₂]	2,76	2	2	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Sonia, 2012, 15
[C ₂ mim][NTf ₂]	3,30	2	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Costa, 2017
[C ₂ mim][NTf ₂]	2,57	2	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Ventura, 2011, 15
[C ₂ mim][NTf ₂]	3,17	2	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Delgado, 2019,15
[C ₂ mim][NTf ₂]	3,62	2	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Montalban, 2016,15
[C ₂ mim][NTf ₂]	3,41	2	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Costa, 2015,15
[C ₂ mim][N(CN) ₂]	4,49	2	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Delgado, 2019
[C ₂ mim][SO ₃ (CF ₂) ₃ CF ₃]	3,76	2	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Stolte, 2019,30
[C ₂ mim][CO ₂ (CF ₂) ₃ CF ₃]	4,15	2	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Stolte, 2019,30
[C ₂ -23mim][NTf ₂]	3,09	2	1	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Delgado, 2019,15
[C ₂ -C ₃ mim][NTf ₂]	2,32	2	1	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Sonia, 2012,15
[C ₂ mim][TCM]	4,24	2	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Delgado, 2019
[OHC ₂ mim][Gly]	4,76	2	1	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Ghanem 2015,15 min.
[OHC ₂ mim][ala]	4,58	2	1	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Ghanem 2015,15 min.
[OHC ₂ mim][ser]	4,66	2	1	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Ghanem 2015,15 min.
[OHC ₂ mim][pro]	4,78	2	1	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Ghanem 2015,15 min.
[C ₃ mim][PF ₆]	3,55	3	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Sonia, 2012, 15
[C ₃ mim][BF ₄]	3,94	3	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Ranke, 2004, 30
[HOC ₃ mim][Cl]	3,52	3	1	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Hernández, 2015, 10

ANEXO I. DATOS DE TOXICIDAD PARA V. FISHERI Y DESCRIPTORES DE LÍQUIDOS IÓNICOS

Abrev.	LC50 μ M	n° C más larga unida a N del catión	n° C más corta unida a N del catión	n° C sustitución alquímica en C del catión	n° de O en S ⁺ , S ⁺ no tiene porque ser cadena larga	n° de Cl en S ⁺	n° de Si en S ⁺	n° de N en S ⁺	n° de azufres en S ⁺	n° de OH en S ⁺	n° de CN en S ⁺	n° de Cy6 en S ⁺	SP/N/S/G	n° de dobles enlaces cadenas más larga unida a N	n° de COO- en S ⁺	n° de fenil a C del catión	n° de CONh en S ⁺	n° C de cadea ciclica unida a N del catión	piridil unida a N del catión	Ref.
[HOC ₃ mim][dca]	3,48	3	1	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Hernández, 2015, 10
[C ₃ mim][NTf ₂]	2,77	3	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Ventura, 2010, 15
[C ₃ mim][NTf ₂]	3,00	3	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Delgado, 2019,15
[C ₃ -23mim][NTf ₂]	2,67	3	1	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Delgado, 2019
[C ₃ -C ₃ mim][NTf ₂]	1,92	3	3	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Sonia, 2012,15
[C ₄ im][CH ₃ COO]	3,32	4	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Luis P, 2010,15
[C ₄ im][Cap]	2,00	4	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Luis P, 2010,15
[C ₄ im][CF ₃ SO ₃]	2,77	4	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Luis P, 2010,15
[C ₄ im][HCOO]	3,19	4	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Luis P, 2010,15
[C ₄ im][CF ₃ COO]	3,28	4	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Luis P, 2010,15
[C ₄ mim][PF ₆]	3,07	4	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Venture 2011, 15
[C ₄ mim][PF ₆]	3,07	4	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	García, 2005, 30
[C ₄ mim][PF ₆]	3,29	4	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Montalban, 2016,15
[C ₄ mim][Cl]	3,46	4	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Montalban, 2016, 15
[C ₄ mim][Cl]	3,47	4	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	stolte, 2007, 30
[C ₄ mim][Cl]	3,34	4	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	García, 2005, 30
[C ₄ mim][Cl]	3,71	4	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Docherty, 2005
[C ₄ mim][Cl]	3,39	4	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Romero,2008
[C ₄ mim][Cl]	3,21	4	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Petric, 2013, 15
[C ₄ mim][Cl]	3,49	4	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Mena, 2019, 15

ANEXO I. DATOS DE TOXICIDAD PARA V. FISHERI Y DESCRIPTORES DE LÍQUIDOS IÓNICOS

Abrev.	LC50 μ M	n° C más larga unida a N del catión	n° C más corta unida a N del catión	n° C sustitución alquilica en C del catión	n° de O en S*, S* no tiene porque ser cadena larga	n° de Cl en S*	n° de Si en S*	n° de N en S*	n° de azufres en S*	n° de OH en S*	n° de CN en S*	n° de Cy6 en S*	SP/N/S/G	n° de dobles enlaces cadenas más larga unida a N	n° de COO- en S*	n° de fenil a C del catión	n° de CONh en S*	n° C de cadea ciclica unida a N del catión	piridil unida a N del catión	Ref.
[C ₄ mim][OAC]	3,47	4	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Mena, 2019, 15
[C ₄ mim][BF ₄]	3,10	4	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Garcia, 2005,30
[C ₄ mim][BF ₄]	3,55	4	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Ranke, 2004
[C ₄ mim][BF ₄]	3,20	4	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Samori, 2010,15
[C ₄ mim][BF ₄]	3,12	4	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Samori 2007,15
[C ₄ mim][BF ₄]	3,46	4	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Montalban, 2016, 15
[C ₄ mim][Br]	3,44	4	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Wang, 2015, 15 min
[C ₄ mmim][Br]	3,25	4	1	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Wang, 2015, 15 min
[C ₄ mim][Br]	3,27	4	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Garcia, 2005,30
[C ₄ mim][Br]	4,01	4	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Docherty, 2005
[C ₄ mim][Br]	3,66	4	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Vivoud 2012
[C ₄ mim][Br]	3,07	4	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Ranke 2004
[C ₄ mim][Br]	3,53	4	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Venture, 2012, 15
[C ₄ mim][Br]	3,27	4	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Koutias, 2019, 5
[C ₄ mim][Br]	3,11	4	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Koutias, 2019, 15
[C ₄ mim][NTf ₂]	2,53	4	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Venture, 2011, 15
[C ₄ mim][NTf ₂]	3,39	4	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Couling, 2005, 15
[C ₄ mim][NTf ₂]	2,46	4	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Stolte, 2007,30
[C ₄ mim][NTf ₂]	2,60	4	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Delgado, 2019,15
[C ₄ mim][NTf ₂]	2,51	4	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Montalban, 2016,15

ANEXO I. DATOS DE TOXICIDAD PARA V. FISHERI Y DESCRIPTORES DE LÍQUIDOS IÓNICOS

Abrev.	LC50 µM	n° C más larga unida a N del catión	n° C más corta unida a N del catión	n° C sustitución alquímica en C del catión	n° de O en S ⁺ , S ⁺ no tiene porque ser cadena larga	n° de Cl en S ⁺	n° de Si en S ⁺	n° de N en S ⁺	n° de azufres en S ⁺	n° de OH en S ⁺	n° de CN en S ⁺	n° de Cy6 en S ⁺	SP/N/S/G	n° de dobles enlaces cadenas más larga unida a N	n° de COO- en S ⁺	n° de fenil a C del catión	n° de CONh en S ⁺	n° C de cadea ciclica unida a N del catión	piridil unida a N del catión	Ref.
[C ₄ mim][NTf ₂]	2,95	4	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Mena, 2019,15
[C ₄ mim][NTf ₂]	2,83	4	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Sonia, 2012,15
[C ₄ mim][N(CN) ₂]	3,44	4	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Delgado, 2019,15
[C ₄ mim][N(CN) ₂]	3,67	4	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Docherty, 2005
[C ₄ mim][N(CN) ₂]	3,11	4	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Samori, 2010,15
[C ₄ mim][SCN]	3,41	4	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Delgado, 2019,15
[C ₄ mim][SCN]	3,42	4	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Costa, 2017
[C ₄ mim][SCN]	2,37	4	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Francisco 2015, 10
[C ₄ mim][I]	3,59	4	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Luis P, 2010
[C ₄ mim][pTS]	3,52	4	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Ranke, 2004
[C ₄ mim][pTS]	3,32	4	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Venture, 2012, 15
[C ₄ mim][8OSO ₃]	1,85	4	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Matzke 2007, 30
[C ₄ mim][HOSO ₃]	2,12	4	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Costa, 2017
[C ₄ mim][HOSO ₃]	2,12	4	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Hernandez, 2015,10
[C ₄ mim][1OSO ₃]	3,57	4	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Costa, 2017
[C ₄ mim][1OSO ₃]	3,59	4	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Venture, 2012, 15
[C ₄ mim][1OSO ₃]	3,57	4	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Montalban, 2016, 15
[C ₄ mim][1OSO ₃]	3,16	4	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Koutia, 2019,5
[C ₄ mim][1OSO ₃]	3,04	4	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Koutia, 2019, 15
[C ₄ mim][C ₂ OSO ₃]	3,20	4	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Hernández, 2015, 10

ANEXO I. DATOS DE TOXICIDAD PARA V. FISHERI Y DESCRIPTORES DE LÍQUIDOS IÓNICOS

Abrev.	LC50 μ M	n° C más larga unida a N del catión	n° C más corta unida a N del catión	n° C sustitución alquilica en C del catión	n° de O en S*, S* no tiene porque ser cadena larga	n° de Cl en S*	n° de Si en S*	n° de N en S*	n° de azufres en S*	n° de OH en S*	n° de CN en S*	n° de Cy6 en S*	SP/N/S/G	n° de dobles enlaces cadenas más larga unida a N	n° de COO- en S*	n° de fenil a C del catión	n° de CONh en S*	n° C de cadea ciclica unida a N del catión	piridil unida a N del catión	Ref.
[C ₄ Femim][1OSO ₃]	1,76	4	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	Francisco, 2015, 10
[C ₄ mim][(CF ₃) ₂ N]	3,48	4	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Matzke, 2007. 30
[C ₄ mim][CF ₃ SO ₃]	3,60	4	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Cho
[C ₄ mim][FeCl ₄]	1,51	4	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Irabien,2011,15
[C ₄ eim][BF ₄]	2,80	4	2	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Ranke, 2004
[C ₄ mim][TCM]	3,35	4	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Delgado, 2019
[C ₄ mim][C ₅ SO ₆]	3,48	4	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Costa, 2017
[C ₄ mim][C ₅ SO ₆]	3,48	4	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Montalban, 2016, 15
[C ₄ -23mim][NTf ₂]	2,36	4	1	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Delgado, 2019
[C ₄ -23mim][NTf ₂]	2,30	4	1	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Sonia, 2012, 15
[C ₄ -23mim][NTf ₂]	2,87	4	1	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Montalban 2016, 15
[C ₄ -C4im][NTf ₂]	2,11	4	4	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Sonia, 2012,15
[C ₅ mim][BF ₄]	3,14	5	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Ranke, 2004
[C ₅ mim][NTf ₂]	2,03	5	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Sonia, 2012,15
[C ₅ C ₅ im][NTf ₂]	1,79	5	5	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Sonia, 2012,15
[C ₅ mim][Cl]	3,78	5	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Moltalban, 2019,15
[C ₆ mim][PF ₆]	2,17	6	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	García, 2005, 30
[C ₆ mim][PF ₆]	2,11	6	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Romero, 2008
[C ₆ mim][PF ₆]	2,36	6	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Montalban, 2016,15
[C ₆ mim][Cl]	2,18	6	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Romero, 2008

ANEXO I. DATOS DE TOXICIDAD PARA V. FISHERI Y DESCRIPTORES DE LÍQUIDOS IÓNICOS

Abrev.	LC50 μ M	n° C más larga unida a N del catión	n° C más corta unida a N del catión	n° C sustitución alquímica en C del catión	n° de O en S ⁺ , S ⁺ no tiene porque ser cadena larga	n° de Cl en S ⁺	n° de Si en S ⁺	n° de N en S ⁺	n° de azufres en S ⁺	n° de OH en S ⁺	n° de CN en S ⁺	n° de Cy6 en S ⁺	SP/N/S/G	n° de dobles enlaces cadenas más larga unida a N	n° de COO- en S ⁺	n° de fenil a C del catión	n° de CONh en S ⁺	n° C de cadea ciclica unida a N del catión	piridil unida a N del catión	Ref.
[C ₆ mim][Cl]	2,32	6	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Garcia et al., 2005,30
[C ₆ mim][Cl]	2,37	6	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Montalban, 2016,15
[C ₆ mim][BF ₄]	3,18	6	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Ranke, 2004, 30
[C ₆ mim][Br]	2,82	6	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Wang, 2015, 15 min
[C ₆ mmim][Br]	3,06	6	1	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Wang, 2015, 15 min
[C ₆ mim][Br]	3,13	6	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Viboud, 2012
[C ₆ mim][Br]	1,42	6	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Docherty, 2005
[C ₆ mim][NTf ₂]	1,71	6	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Sonia, 2012, 15
[C ₆ mim][NTf ₂]	1,80	6	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Delgado, 2019, 15
[C ₆ mim][NTf ₂]	2,11	6	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Ventura, 2011, 15
[C ₆ mim][NTf ₂]	2,05	6	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Merck, 2010 VF
C ₆ C ₆ l[m][NTf ₂]	1,95	6	6	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Sonia, 2012, 15
[C ₆ C ₆ l[m][NTf ₂]	1,82	6	6	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Montalban, 2016, 15
[C ₆ mim][[(C ₂ F ₅) ₂ PF ₆]	2,65	6	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Merck, 2010
[C ₆ mim][[2-SO ₂ PhCO)N]	2,67	6	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Merck, 2010
[C ₆ -23mim][Cl]	1,74	6	1	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Luis 2007,15
[C ₆ el[m][BF ₄]	2,15	6	2	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Ranke, 2004
[C ₇ mim][NTf ₂]	1,62	7	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Sonia, 2012,15
[C ₇ mim][BF ₄]	2,44	7	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Ranke, 2004
[C ₈ mim][Br]	2,15	8	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	wang, 2015, 15 min

ANEXO I. DATOS DE TOXICIDAD PARA V. FISHERI Y DESCRIPTORES DE LÍQUIDOS IÓNICOS

Abrev.	LC50 μ M	n° C más larga unida a N del catión	n° C más corta unida a N del catión	n° C sustitución alquilica en C del catión	n° de O en S*, S* no tiene porque ser cadena larga	n° de Cl en S*	n° de Si en S*	n° de N en S*	n° de azufres en S*	n° de OH en S*	n° de CN en S*	n° de Cy6 en S*	SP/N/S/G	n° de dobles enlaces cadenas más larga unida a N	n° de COO- en S*	n° de fenil a C del catión	n° de CONh en S*	n° C de cadea ciclica unida a N del catión	piridil unida a N del catión	Ref.
[C ₈ mim][Br]	2,27	8	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Viboud,2012
[C ₈ mim][Br]	0,63	8	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Docherty,2005
[C ₈ mim][Br]	0,71	8	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Motalban,2018,15
[C ₈ mim][Br]	1,76	8	1	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Wang, 2015, 15 min
[C ₈ mim][Br]	1,41	8	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Ranke, 2004
[C ₈ mim][BF ₄]	0,91	8	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Montalban, 2016, 15
[C ₈ mim][Cl]	0,69	8	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Montalban, 2016, 15
[C ₈ mim][Cl]	1,01	8	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Stolten, 2007, 30
[C ₈ mim][Cl]	1,19	8	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Garcia, 2005, 30
[C ₈ mim][Cl]	0,94	8	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Romero, 2008
[C ₈ mim][Cl]	0,30	8	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Petric, 2013, 15
[C ₈ mim][PF ₆]	0,70	8	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Romero, 2008
[C ₈ mim][PF ₆]	0,70	8	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Ventura, 2011, 15
[C ₈ mim][PF ₆]	0,95	8	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Garcia, 2005, 30
[C ₈ mim][PF ₆]	1,25	8	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Montalban, 2016, 15
[C ₈ mim][NTf ₂]	1,13	8	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Sonia 2012, 15
[C ₈ mim][NTf ₂]	0,83	8	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Merck, 2010
[C ₈ mim][NTf ₂]	0,99	8	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Montalban 2016, 15
[C ₈ mim][NTf ₂]	0,95	8	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Montalban 2018, 15
[C ₈ mim][SbF ₆]	0,85	8	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Montalbán, 2018,15

ANEXO I. DATOS DE TOXICIDAD PARA V. FISHERI Y DESCRIPTORES DE LÍQUIDOS IÓNICOS

Abrev.	LC50 μ M	n° C más larga unida a N del catión	n° C más corta unida a N del catión	n°C sustitución alquilica en C del catión	n° de O en S ⁺ , S ⁺ no tiene porque ser cadena larga	n° de Cl en S ⁺	n° de Si en S ⁺	n° de N en S ⁺	n° de azufres en S ⁺	n° de OH en S ⁺	n° de CN en S ⁺	n° de Cy6 en S ⁺	SP/N/S/G	n° de dobles enlaces cadenas más larga unida a N	n° de COO- en S ⁺	n° de fenil a C del catión	n° de CONh en S ⁺	n° C de cadea ciclica unida a N del catión	piridil unida a N del catión	Ref.
[C ₉ mim][BF ₄]	0,72	9	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Ranke, 2004
[C ₉ mim][Cl]	1,40	9	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Jafari, 2019
[C ₁₀ mim][BF ₄]	-0,18	10	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Ranke, 2004
[C ₁₀ mim][Cl]	0,50	10	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Ranke, 2004
[C ₁₀ mim][Cl]	-0,23	10	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Stolten, 2007,30
[C ₂ OCOC ₁₀ mim][Br]	1,08	12	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	Ventura ,2012,15
[C ₁₀ mim][FeCl ₄]	-0,43	10	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Irabien, 2011,15
[C ₁₄ mim][Cl]	-0,15	14	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Stolte, 2007,30
[C ₁₆ mim][Cl]	0,23	16	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Stolte, 2007,30
[C ₁₈ mim][Cl]	1,35	18	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Merck, 2010
[MOC ₂ mim][BF ₄]	4,15	3	1	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Samori, 2007, 15
[MOC ₂ mim][BF ₄]	3,90	3	1	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Samori, 2010,15
[MOC ₂ mim][N(CN) ₂]	4,06	3	1	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Samori, 2007,15
[MOC ₂ mim][N(CN) ₂]	3,99	3	1	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Samori, 2010,15
[MOC ₂ OC ₂ mim][BF ₄]	3,79	5	1	0	2	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Samori, 2010, 15
[MOC ₂ OC ₂ mim][Cl]	2,26	5	1	0	2	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Venture, 2015, 15
[MOC ₂ OC ₂ mim][N(CN) ₂]	3,88	5	1	0	2	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Samori, 2010,15
[MOC ₂ OC ₂ OC ₂ mim][BF ₄]	3,45	7	1	0	3	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Samori, 2010,15
[MOC ₂ OC ₂ OC ₂ mim][N(CN) ₂]	3,69	7	1	0	3	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Samori, 2010,15
[MOC ₂ OC ₂ OC ₂ mim][N(CN) ₂]	2,65	9	1	0	4															Samori, 2010,15

ANEXO I. DATOS DE TOXICIDAD PARA V. FISHERI Y DESCRIPTORES DE LÍQUIDOS IÓNICOS

Abrev.	LC50 μ M	n° C más larga unida a N del catión	n° C más corta unida a N del catión	n° C sustitución alquímica en C del catión	n° de O en S ⁺ , S ⁺ no tiene porque ser cadena larga	n° de Cl en S ⁺	n° de Si en S ⁺	n° de N en S ⁺	n° de azufres en S ⁺	n° de OH en S ⁺	n° de CN en S ⁺	n° de Cy6 en S ⁺	SP/N/S/G	n° de dobles enlaces cadenas más larga unida a N	n° de COO- en S ⁺	n° de fenil a C del catión	n° de CONh en S ⁺	n° C de cadea ciclica unida a N del catión	piridil unida a N del catión	Ref.
[MOC ₂ mim][Cl]	4,18	3	1	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Stolte, 2007,30
[MOC ₂ mim][NTf ₂]	2,83	3	1	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Stolte, 2007,30
[MOC ₃ mim][NTf ₂]	3,20	4	1	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Stolte, 2007,30
[EOC ₁ mim][Cl]	4,08	3	1	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Stolte, 2007,30
[EOC ₁ mim][NTf ₂]	3,00	3	1	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Stolte, 2007,30
[EOC ₂ mim][Br]	4,28	4	1	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Stolte, 2007,30
[EOC ₂ mim][NTf ₂]	2,95	4	1	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Stolte, 2007,30
[ClC ₂ mim][Cl]	2,25	2	1	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Stolte 2007
[OHC ₂ mim][I]	3,89	2	1	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Stolte, 2007,30
[OHC ₂ mim][Cl]	5,34	2	1	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Montalban, 2016,15
[OHC ₂ mim][NTf ₂]	4,05	2	1	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Stolte, 2007,30
[OHC ₃ mim][NTf ₂]	3,81	3	1	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Stolte, 2007,30
[OHC ₃ mim][SO ₃ (CF ₂) ₃ CF ₃]	4,06	3	1	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Stolte, 2019,30
[OHC ₃ mim][CO ₂ (CF ₂) ₃ CF ₃]	4,57	3	1	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Stolte, 2019,30
[CNC ₁ mim][NTf ₂]	3,81	1	1	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	Stolte, 2007,30
[Phmim][N(CN) ₂]	2,84	1	1	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	Delgado, 2019
[ImidC ₂ Phe][Br]	3,49	1	4	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	1	1	0	0	Kusuma, 2019,30
[ImidC ₄ Phe][Br]	2,33	1	6	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	1	1	0	0	Kusuma, 2019,30
[ImidC ₆ Phe][Br]	1,38	1	8	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	1	1	0	0	Kusuma, 2019,30
[ImidC ₈ Phe][Br]	1,29	1	10	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	1	1	0	0	Kusuma, 2019,30

ANEXO I. DATOS DE TOXICIDAD PARA V. FISHERI Y DESCRIPTORES DE LÍQUIDOS IÓNICOS

Abrev.	LC50 μ M	n° C más larga unida a N del catión	n° C más corta unida a N del catión	n° C sustitución alquímica en C del catión	n° de O en S*, S* no tiene porque ser cadena larga	n° de Cl en S*	n° de Si en S*	n° de N en S*	n° de azufres en S*	n° de OH en S*	n° de CN en S*	n° de Cy6 en S*	SP/N/S/G	n° de dobles enlaces cadenas más larga unida a N	n° de COO- en S*	n° de fenil a C del catión	n° de CONh en S*	n° C de cadea ciclica unida a N del catión	piridil unida a N del catión	Ref.
[ImidC ₁₀ Phe][Br]	0,95	1	12	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	1	1	0	0	Kusuma, 2019,30
[ImidC ₁₂ Phe][Br]	0,92	1	14	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	1	1	0	0	Kusuma, 2019,30
[ImidC ₁₄ Phe][Br]	0,92	1	16	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	1	1	0	0	Kusuma, 2019,30
[ImidC ₁₆ Phe][Br]	>1,80	1	18	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	1	1	0	0	Kusuma, 2019,30
[C ₁₀ C ₆ Omim][Cl]	-0,85	10	7	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Nalecz-Jawecki, 2003, 15
[C ₁₀ C ₆ Omim][Cl]	-0,85	10	1	0	1	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	Nalecz-Jawecki, 2003, 15
[C ₁₀ C ₆ Smim][Cl]	-0,66	10	7	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Nalecz-Jawecki, 2003, 15
[1 ₃ mim][NTf ₂]	3,61	1	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Delgado, 2019
[Amim][NTf ₂]	2,94	3	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	Delgado, 2019
[Amim][N(CN) ₂]	4,31	3	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	Delgado, 2019
[Amim][Cl]	4,36	3	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	Montalban, 2016, 15
[C ₂ -4mPy][NTf ₂]	2,73	2	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Delgado, 2019
[C ₂ -4mPy][ZOSO ₃]	3,83	2	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Montalban, 2016, 15
[OHC ₃ Py][NTf ₂]	4,01	3	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Merck, 2010
[C ₂ -4mPy][CO ₂ (CF ₂) ₃ CF ₃]	3,68	2	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Stote, 2019,30
[C ₂ -4mPy][NTf ₂]	2,73	2	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Delgado, 2019
[C ₃ -3mPy][NTf ₂]	1,90	3	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Sonia, 2012,15
[C ₃ -3mPy][PF ₆]	2,79	3	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Sonia, 2012,15
[pyC ₂ Phe][Br]	3,34	4	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	1	1	0	0	Kusuma, 2019,30
[pyC ₄ Phe][Br]	2,28	6	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	1	1	0	0	Kusuma, 2019,30

ANEXO I. DATOS DE TOXICIDAD PARA V. FISHERI Y DESCRIPTORES DE LÍQUIDOS IÓNICOS

Abrev.	LC50 µM	n° C más larga unida a N del catión	n° C más corta unida a N del catión	n° C sustitución alquímica en C del catión	n° de O en S*, S* no tiene porque ser cadena larga	n° de Cl en S*	n° de Si en S*	n° de N en S*	n° de azufres en S*	n° de OH en S*	n° de CN en S*	n° de Cy6 en S*	SP/N/S/G	n° de dobles enlaces cadenas más larga unida a N	n° de COO- en S*	n° de fenil a C del catión	n° de CONh en S*	n° C de cadea ciclica unida a N del catión	piridil unida a N del catión	Ref.
[pyC ₆ Phe][Br]	1,40	8	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	1	1	0	0	Kusuma, 2019,30
[pyC ₈ Phe][Br]	1,29	10	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	1	1	0	0	Kusuma, 2019,30
[pyC ₁₀ Phe][Br]	0,94	12	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	1	1	0	0	Kusuma, 2019,30
[pyC ₁₂ Phe][Br]	0,89	14	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	1	1	0	0	Kusuma, 2019,30
[pyC ₁₄ Phe][Br]	0,96	16	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	1	1	0	0	Kusuma, 2019,30
[pyC ₁₆ Phe][Br]	>1,80	18	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	1	1	0	0	Kusuma, 2019,30
[Py][CF ₃ SO ₃]	2,52	4	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Koutinas, 2020, 5
[Py][CF ₃ SO ₃]	2,52	4	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Koutinas, 2020, 15
[C ₄ Py][N(CN) ₂]	3,30	4	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Docherty, 2005
[C ₄ Py][Br]	3,38	4	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Wang, 2015, 15 min
[C ₄ Py][Br]	3,72	4	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Vivoud 2012
[C ₄ Py][Br]	3,39	4	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Docherty, 2005
[C ₄ Py][Cl]	3,30	4	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Docherty, 2005
[C ₄ Py][Cl]	3,18	4	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Stolte, 2007,30
[C ₄ Py][Cl]	3,24	4	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Petric, 2013, 15
[C ₄ Py][Al ₂ Cl ₇]	3,01	4	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Merck, 2010
[C ₄ Py][NTf ₂]	2,44	4	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Delgado, 2019,15
[C ₄ -3mPy][Br]	3,14	4	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Wang, 2015, 15 min
[C ₄ -3mPy][Br]	2,75	4	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Docherty, 2005
[C ₄ -3mPy][N(CN) ₂]	2,66	4	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Docherty, 2005

ANEXO I. DATOS DE TOXICIDAD PARA V. FISHERI Y DESCRIPTORES DE LÍQUIDOS IÓNICOS

Abrev.	LC50 μ M	n° C más larga unida a N del catión	n° C más corta unida a N del catión	n° C sustitución alquilica en C del catión	n° de O en S ⁺ , S ⁺ no tiene porque ser cadena larga	n° de Cl en S ⁺	n° de Si en S ⁺	n° de N en S ⁺	n° de azufres en S ⁺	n° de OH en S ⁺	n° de CN en S ⁺	n° de Cy6 en S ⁺	SP/N/S/G	n° de dobles enlaces cadenas más larga unida a N	n° de COO- en S ⁺	n° de fenil a C del catión	n° de CONh en S ⁺	n° C de cadea ciclica unida a N del catión	piridil unida a N del catión	Ref.
[C ₄ -3mPy][BF ₄]	3,30	4	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Costa, 2017
[C ₄ -4mPy][BF ₄]	2,44	4	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Montalban, 2016, 15
[C ₄ -4mPy][BF ₄]	1,51	4	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Hernández, 2015, 10
[C ₄ -4mPy][BF ₄]	3,02	4	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Merck, 2010
[C ₄ -4mPy][BF ₄]	2,38	4	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Costa, 2015, 15
[C ₄ -4mPy][Cl]	3,32	4	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Costa, 2017
[C ₄ -4mPy][Cl]	3,04	4	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Costa, 2015,15
[C ₄ -4mPy][TCM]	2,68	4	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Delgado, 2019
[C ₄ -4mPy][NTf ₂]	2,04	4	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Delgado, 2019
[C ₄ -23mPy][Br]	2,24	4	0	2	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Wang, 2015, 15 min
[C ₄ -23mPy][Br]	2,93	4	0	2	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Viboud, 2012
[C ₄ -23mPy][CF ₃ SO ₃]	2,84	4	0	2	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Viboud, 2012
[C ₄ -35mPy][N(CN) ₂]	2,38	4	0	2	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Docherty, 2005
[C ₄ -35mPy][Br]	2,69	4	0	2	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Docherty, 2005
[C ₄ -35mPy][Br]	2,49	4	0	2	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Viboud, 2012(31)
[C ₄ -35mPy][SCN]	2,25	4	0	2	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Viboud, 2012(31)
[C ₄ -35mPy][NTf ₂]	1,86	4	0	2	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Viboud, 2012(31)
[C ₄ -235mPy][Br]	2,37	4	0	3	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Wang, 2015, 15 min
[C ₄ -235mPy][Br]	2,48	4	0	3	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Viboud, 2012(31)
[C ₄ -235mPy][NTf ₂]	1,56	4	0	3	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Viboud, 2012(31)

ANEXO I. DATOS DE TOXICIDAD PARA V. FISHERI Y DESCRIPTORES DE LÍQUIDOS IÓNICOS

Abrev.	LC50 μ M	n° C más larga unida a N del catión	n° C más corta unida a N del catión	n° C sustitución alquilica en C del catión	n° de O en S*, S* no tiene porque ser cadena larga	n° de Cl en S*	n° de Si en S*	n° de N en S*	n° de azufres en S*	n° de OH en S*	n° de CN en S*	n° de Cy6 en S*	SP/N/S/G	n° de dobles enlaces cadenas más larga unida a N	n° de COO- en S*	n° de fenil a C del catión	n° de CONh en S*	n° C de cadea ciclica unida a N del catión	piridil unida a N del catión	Ref.
[C ₄ -4C ₁ NPY][Br]	2,52	4	0	2	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Stolte, 2007,30
[C ₄ -4C ₁ NPY][Br]	2,32	4	0	2	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Couling, 2005, 15
[C ₄ -4C ₁ NPY][Cl]	2,52	4	0	2	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Stolte, 2007, 30
[C ₄ -4C ₁ NPY][NTf ₂]	1,85	4	0	2	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Stolte, 2007, 30
[C ₆ Py][Br]	2,69	6	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Wang, 2015, 15 min
[C ₆ Py][Br]	2,85	6	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Viboud, 2012
[C ₆ -3mPy][Cl]	2,40	6	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Cao, 2018
[C ₆ -4mPy][Br]	2,11	6	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Wang, 2015, 15 min
[C ₆ -4mPy][Br]	2,07	6	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Docherty, 2005
[C ₆ -4mPy][Cl]	1,44	6	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Luis, 2007,15
[C ₆ -4C ₁ NPY][NTf ₂]	1,38	6	0	2	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Merck, 2010
[C ₈ Py][Cl]	1,69	8	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Merck, 2010
[C ₈ Py][SbF ₆]	1,13	8	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Montalbán, 2018
[C ₈ Py][Br]	1,69	8	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Wang, 2015, 15 min
[C ₈ Py][Br]	1,89	8	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Viboud, 2012
[C ₈ Py][Br]	1,27	8	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Montalban, 2018,15
[C ₈ Py][NTf ₂]	1,51	8	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Montalban, 2018,15
[C ₈ -3mPy][Br]	1,36	8	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Wang, 2015, 15 min
[C ₈ -3mPy][Br]	0,79	8	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Docherty, 2005
[C ₈ -23mPy][Br]	1,08	8	0	2	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Viboud, 2012(31)

ANEXO I. DATOS DE TOXICIDAD PARA V. FISHERI Y DESCRIPTORES DE LÍQUIDOS IÓNICOS

Abrev.	LC50 μ M	n° C más larga unida a N del catión	n° C más corta unida a N del catión	n° C sustitución alquímica en C del catión	n° de O en S ⁺ , S ⁺ no tiene porque ser cadena larga	n° de Cl en S ⁺	n° de Si en S ⁺	n° de N en S ⁺	n° de azufres en S ⁺	n° de OH en S ⁺	n° de CN en S ⁺	n° de Cy6 en S ⁺	SP/N/S/G	n° de dobles enlaces cadenas más larga unida a N	n° de COO- en S ⁺	n° de fenil a C del catión	n° de CONh en S ⁺	n° C de cadea ciclica unida a N del catión	piridil unida a N del catión	Ref.
[C ₈ -35mPy][Br]	1,12	8	0	2	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Viboud, 2012
[C ₈ -35mPy][NTf ₂]	0,36	8	0	2	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Papaiconomou, 2010
[C ₈ -35mPy][BF ₄]	0,97	8	0	2	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Viboud, 2012
[C ₈ -2m5ePy][Br]	0,59	8	0	3	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Viboud, 2012
[C ₈ -235mPy][Br]	0,61	8	0	3	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Wang, 2015, 15 min
[C ₈ -235mPy][Br]	0,62	8	0	3	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Viboud, 2012(31)
[C ₈ -235mPy][NTf ₂]	0,62	8	0	3	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Viboud, 2012(31)
[C ₁ 2SmPy][Cl]	-0,54	12	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Nalecz-Jawecki, 2003
[3C ₁ -C ₁ 2SmPy][Cl]	-0,77	12	0	1	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Nalecz-Jawecki, 2003
[35C ₁ -C ₁ 2SmPy][Cl]	-0,89	12	0	2	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Nalecz-Jawecki, 2003
[N _{00-2MO-2MO}][N00SO ₃]	4,03	0	0	0	2	0	0	0	0	0	0	0	6	0	0	0	0	0	0	Cho
[N _{000-2OH}][Ehexato]	2,62	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	2	0	0	0	0	0	0	Viesca, 2020, 15 min
[N _{001-2OH}][Ehexato]	2,35	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	3	0	0	0	0	0	0	Viesca, 2020, 15 min
[N _{011-2OH}][Ehexato]	2,31	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	4	0	0	0	0	0	0	Viesca, 2020, 15 min
[N _{000-2OH}][DBS]	2,08	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	2	0	0	0	0	0	0	Viesca, 2020, 15 min
[N _{001-2OH}][DBS]	2,00	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	3	0	0	0	0	0	0	Viesca, 2020, 15 min
[N _{011-2OH}][DBS]	1,95	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	4	0	0	0	0	0	0	Viesca, 2020, 15 min
[N _{111-2OH}][1COO]	4,34	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	5	0	0	0	0	0	0	Costa, 2015,15
[N _{111-2OH}][1COO]	3,67	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	5	0	0	0	0	0	0	Mena, 2019,15
[N _{111-2OH}][H ₂ PO ₄]	3,76	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	5	0	0	0	0	0	0	Hernández, 2015,10

ANEXO I. DATOS DE TOXICIDAD PARA V. FISHERI Y DESCRIPTORES DE LÍQUIDOS IÓNICOS

Abrev.	LC50 µM	n° C más larga unida a N del catión	n° C más corta unida a N del catión	n°C sustitución alquímica en C del catión	n° de O en S*, S* no tiene porque ser cadena larga	n° de Cl en S*	n° de Si en S*	n° de N en S*	n° de azufres en S*	n° de OH en S*	n° de CN en S*	n° de Cy6 en S*	SP/N/S/G	n° de dobles enlaces cadenas más larga unida a N	n° de COO- en S*	n° de fenil a C del catión	n° de CONh en S*	n° C de cadea ciclica unida a N del catión	piridil unida a N del catión	Ref.
[N _{111-20H}][NTf ₂]	4,15	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	5	0	0	0	0	0	0	Couling, 2005, 15
[N _{111-20H}][NTf ₂]	3,08	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	5	0	0	0	0	0	0	Mena, 2019,15
[N _{111-20H}][Cl]	6,17	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	5	0	0	0	0	0	0	Viboud, 2012
[N _{111-20H}][Cl]	3,64	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	5	0	0	0	0	0	0	Mena, 2019,15
[N _{111-20H}][SO ₂ (CF ₂) ₃ CF ₃]	4,19	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	5	0	0	0	0	0	0	Stolen, 2019, 30
[N _{111-20H}][CO ₂ (CF ₂) ₃ CF ₃]	4,52	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	5	0	0	0	0	0	0	Stolen, 2019, 30
[colic ₂ Phe][Br]	3,46	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	9	0	1	1	1	0	0	Kusuma, 2019,30
[colic ₄ Phe][Br]	2,34	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	11	0	1	1	1	0	0	Kusuma, 2019,30
[colic ₆ Phe][Br]	1,51	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	13	0	1	1	1	0	0	Kusuma, 2019,30
[colic ₈ Phe][Br]	1,62	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	15	0	1	1	1	0	0	Kusuma, 2019,30
[colic ₁₀ Phe][Br]	1,04	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	17	0	1	1	1	0	0	Kusuma, 2019,30
[colic ₁₂ Phe][Br]	0,90	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	19	0	1	1	1	0	0	Kusuma, 2019,30
[colic ₁₄ Phe][Br]	0,90	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	21	0	1	1	1	0	0	Kusuma, 2019,30
[colic ₁₆ Phe][Br]	>1,80	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	23	0	1	1	1	0	0	Kusuma, 2019,30
[Chol][DHCit]	1,99	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	5	0	0	0	0	0	0	Ventura, 2014, 5min
[Chol][DHCit]	2,08	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	5	0	0	0	0	0	0	Ventura, 2014, 15min
[Chol][DHCit]	2,10	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	5	0	0	0	0	0	0	Ventura, 2014, 30min
[Chol][Cl]	2,77	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	5	0	0	0	0	0	0	Ventura, 2014, 5min
[Chol][Cl]	2,77	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	5	0	0	0	0	0	0	Ventura, 2014, 15min
[Chol][Cl]	2,73	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	5	0	0	0	0	0	0	Ventura, 2014, 30min

ANEXO I. DATOS DE TOXICIDAD PARA V. FISHERI Y DESCRIPTORES DE LÍQUIDOS IÓNICOS

Abrev.	LC50 µM	n° C más larga unida a N del catión	n° C más corta unida a N del catión	n° C sustitución alquímica en C del catión	n° de O en S*, S* no tiene porque ser cadena larga	n° de Cl en S*	n° de Si en S*	n° de N en S*	n° de azufres en S*	n° de OH en S*	n° de CN en S*	n° de Cy6 en S*	SP/N/S/G	n° de dobles enlaces cadenas más larga unida a N	n° de COO- en S*	n° de fenil a C del catión	n° de CONh en S*	n° C de cadea ciclica unida a N del catión	piridil unida a N del catión	Ref.
[Bzchol][Cl]	3,44	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	5	0	0	0	0	0	0	Ventura, 2014, 5min
[Bzchol][Cl]	3,23	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	5	0	0	0	0	0	0	Ventura, 2014, 15min
[Bzchol][Cl]	3,22	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	5	0	0	0	0	0	0	Ventura, 2014, 30min
[Chol][Bit]	1,91	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	5	0	0	0	0	0	0	Ventura, 2014, 5min
[Chol][Bit]	2,00	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	5	0	0	0	0	0	0	Ventura, 2014, 15min
[Chol][Bit]	1,98	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	5	0	0	0	0	0	0	Ventura, 2014, 30min
[Chol][But]	3,64	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	5	0	0	0	0	0	0	Ventura, 2014, 5min
[Chol][But]	3,65	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	5	0	0	0	0	0	0	Ventura, 2014, 15min
[Chol][But]	3,66	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	5	0	0	0	0	0	0	Ventura, 2014, 30min
[Chol][Prop]	3,58	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	5	0	0	0	0	0	0	Ventura, 2014, 5min
[Chol][Prop]	3,47	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	5	0	0	0	0	0	0	Ventura, 2014, 15min
[Chol][Prop]	3,44	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	5	0	0	0	0	0	0	Ventura, 2014, 30min
[Chol][Ac]	3,87	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	5	0	0	0	0	0	0	Ventura, 2014, 5min
[Chol][Ac]	3,72	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	5	0	0	0	0	0	0	Ventura, 2014, 15min
[Chol][Ac]	3,62	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	5	0	0	0	0	0	0	Ventura, 2014, 30min
[Chol][Sal]	3,26	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	5	0	0	0	0	0	0	Ventura, 2014, 5min
[Chol][Sal]	3,14	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	5	0	0	0	0	0	0	Ventura, 2014, 15min
[Chol][Sal]	2,99	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	5	0	0	0	0	0	0	Ventura, 2014, 30min
[Chol][Sal]	2,95	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	5	0	0	0	0	0	0	Sitra 2015, 5 min
[Chol][Sal]	2,80	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	5	0	0	0	0	0	0	Sitra 2015, 15 min

ANEXO I. DATOS DE TOXICIDAD PARA V. FISHERI Y DESCRIPTORES DE LÍQUIDOS IÓNICOS

Abrev.	LC50 µM	n° C más larga unida a N del catión	n° C más corta unida a N del catión	n° C sustitución alquímica en C del catión	n° de O en S*, S* no tiene porque ser cadena larga	n° de Cl en S*	n° de Si en S*	n° de N en S*	n° de azufres en S*	n° de OH en S*	n° de CN en S*	n° de Cy6 en S*	SP/N/S/G	n° de dobles enlaces cadenas más larga unida a N	n° de COO- en S*	n° de fenil a C del catión	n° de CONh en S*	n° C de cadea ciclica unida a N del catión	piridil unida a N del catión	Ref.
[Chol][Sal]	2,65	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	5	0	0	0	0	0	0	Sitra 2015, 30 min
[Chol][gal]	4,13	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	5	0	0	0	0	0	0	Sitra 2015, 5 min
[Chol][gal]	3,85	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	5	0	0	0	0	0	0	Sitra 2015, 15 min
[Chol][gal]	3,78	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	5	0	0	0	0	0	0	Sitra 2015, 30 min
[Chol][caf]	3,49	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	5	0	0	0	0	0	0	Sitra 2015, 5 min
[Chol][caf]	3,46	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	5	0	0	0	0	0	0	Sitra 2015, 15 min
[Chol][caf]	3,41	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	5	0	0	0	0	0	0	Sitra 2015, 30 min
[Chol][val]	3,46	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	5	0	0	0	0	0	0	Sitra 2015, 5 min
[Chol][val]	3,58	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	5	0	0	0	0	0	0	Sitra 2015, 15 min
[Chol][val]	3,52	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	5	0	0	0	0	0	0	Sitra 2015, 30 min
[Chol][sig]	3,18	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	5	0	0	0	0	0	0	Sitra 2015, 5 min
[Chol][sig]	3,18	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	5	0	0	0	0	0	0	Sitra 2015, 15 min
[Chol][sig]	3,16	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	5	0	0	0	0	0	0	Sitra 2015, 30 min
[Chol][neod]	2,75	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	5	0	0	0	0	0	0	Ratamaki 2017, 5 min
[Chol][neod]	2,72	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	5	0	0	0	0	0	0	Ratamaki 2017, 15 min
[Chol][dec]	2,00	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	5	0	0	0	0	0	0	Ratamaki 2017, 5 min
[Chol][dec]	2,00	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	5	0	0	0	0	0	0	Ratamaki 2017, 15 min
[Chol][isost]	2,11	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	5	0	0	0	0	0	0	Ratamaki 2017, 5 min
[Chol][isost]	1,87	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	5	0	0	0	0	0	0	Ratamaki 2017, 15 min
[N _{000-20H}][HCO ₂]	3,82	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	2	0	0	0	0	0	0	Petric, 2013, 15

ANEXO I. DATOS DE TOXICIDAD PARA V. FISHERI Y DESCRIPTORES DE LÍQUIDOS IÓNICOS

Abrev.	LC50 μ M	n° C más larga unida a N del catión	n° C más corta unida a N del catión	n° C sustitución alquímica en C del catión	n° de O en S*, S* no tiene porque ser cadena larga	n° de Cl en S*	n° de Si en S*	n° de N en S*	n° de azufres en S*	n° de OH en S*	n° de CN en S*	n° de Cy6 en S*	SP/N/S/G	n° de dobles enlaces cadenas más larga unida a N	n° de COO- en S*	n° de fenil a C del catión	n° de CONh en S*	n° C de cadea ciclica unida a N del catión	piridil unida a N del catión	Ref.
[N ₀₀₂ OH-2OH][HCO ₂]	3,72	0	0	0	0	0	0	0	0	2	0	0	4	0	0	0	0	0	0	Petric, 2013, 15
[N ₀₀₂ OH-2OH][CCO ₂]	4,03	0	0	0	0	0	0	0	0	2	0	0	4	0	0	0	0	0	0	Petric, 2013, 15
[N ₀₀₂ OH-2OH][C ₂ CO ₂]	3,56	0	0	0	0	0	0	0	0	2	0	0	4	0	0	0	0	0	0	Petric, 2013, 15
[N ₀₀₂ OH-2OH][C ₃ CO ₂]	3,62	0	0	0	0	0	0	0	0	2	0	0	4	0	0	0	0	0	0	Petric, 2013, 15
[N ₀₀₂ OH-2OH][C ₃ CO ₂]	3,64	0	0	0	0	0	0	0	0	2	0	0	4	0	0	0	0	0	0	Petric, 2013, 15
[N ₀₀₂ OH-2OH][C ₄ CO ₂]	3,23	0	0	0	0	0	0	0	0	2	0	0	4	0	0	0	0	0	0	Petric, 2013, 15
[N ₀₂₀ H ₂ OH-2OH][C ₃ CO ₂]	3,32	0	0	0	0	0	0	0	0	3	0	0	6	0	0	0	0	0	0	Petric, 2013, 15
[N ₀₂₀ H ₂ OH-2OH][C ₄ CO ₂]	3,26	0	0	0	0	0	0	0	0	3	0	0	6	0	0	0	0	0	0	Petric, 2013, 15
[N _{000-2OH}][C ₃ CO ₂]	4,18	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	2	0	0	0	0	0	0	Petric, 2013, 15
[N _{000-2c}][NO ₃]	4,32	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	2	0	0	0	0	0	0	Motalban, 2016, 15
[N _{4,4,4,4}][Cl]	3,39	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	16	0	0	0	0	0	0	Costa, 2015, 15
[N _{4,4,4,4}][I]	3,27	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	16	0	0	0	0	0	0	Koutias, 2019,5
[N _{4,4,4,4}][I]	2,93	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	16	0	0	0	0	0	0	Koutias, 2019, 15
[N _{4,4,4,4}][PF6]	2,45	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	16	0	0	0	0	0	0	Koutias, 2019, 15
[N _{4,4,4,4}][PF6]		0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	16	0	0	0	0	0	0	Koutias, 2019, 15
[N888-1][c6:0]	2,14	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	25	0	0	0	0	0	0	Oulego, 2019, 15
[N888-1][c8:0]	2,06	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	25	0	0	0	0	0	0	Oulego, 2019, 15
[N888-1][c12:0]	1,98	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	25	0	0	0	0	0	0	Oulego, 2019, 15
[N888-1][c16:0]	1,86	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	25	0	0	0	0	0	0	Oulego, 2019, 15
[N888-1][c18:0]	1,80	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	25	0	0	0	0	0	0	Oulego, 2019, 15

ANEXO I. DATOS DE TOXICIDAD PARA V. FISHERI Y DESCRIPTORES DE LÍQUIDOS IÓNICOS

Abrev.	LC50 µM	n° C más larga unida a N del catión	n° C más corta unida a N del catión	n° C sustitución alquímica en C del catión	n° de O en S*, S* no tiene porque ser cadena larga	n° de Cl en S*	n° de Si en S*	n° de N en S*	n° de azufres en S*	n° de OH en S*	n° de CN en S*	n° de Cy6 en S*	SP/N/S/G	n° de dobles enlaces cadenas más larga unida a N	n° de COO- en S*	n° de fenil a C del catión	n° de CONh en S*	n° C de cadea ciclica unida a N del catión	piridil unida a N del catión	Ref.
[N ₈₈₈₋₁][C18:1]	1,25	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	25	0	0	0	0	0	0	Oulego, 2019, 15
[N ₁₁₁₋₁₂][Br]	-0,11	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	15	0	0	0	0	0	0	Garcia, 2001, 30
[N ₁₁₁₋₁₄][Br]	-0,08	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	15	0	0	0	0	0	0	Garcia, 2001, 30
[N ₁₁₁₋₁₆][Br]	0,24	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	17	0	0	0	0	0	0	Garcia, 2001, 30
[N ₁₁₁₋₁₆][Cl]	0,40	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	19	0	0	0	0	0	0	Merck, 2010
[N _{112-1EOCO}][NTf ₂]	3,32	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	19	0	0	0	0	0	0	Merck, 2010
[N _{112-2MO}][NTf ₂]	3,35	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	7	0	1	0	0	0	0	Merck, 2010
[N ₁₁₂₄][NTf ₂]	3,21	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	7	0	0	0	0	0	0	Stolte, 2007,30
[N _{118-1C10ox}][Cl]	-0,09	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	8	0	0	0	0	0	0	Nalecz-Jawecki, 2003,15
[N _{11-12-1Ph}][Br]	-0,33	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	21	0	0	0	0	0	0	Garcia, 2001,30
[N _{11-12-1Ph}][Cl]	-0,23	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	15	0	0	0	0	0	0	Merck, 2010
[N _{11-12-1C8O}][Cl]	0,39	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	15	0	0	0	0	0	0	Nalecz-Jawecki, 2003,15
[N _{11-12-1C9O}][Cl]	0,38	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	23	0	0	0	0	0	0	Nalecz-Jawecki, 2003,15
[N _{11-12-1C10O}][Cl]	0,60	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	24	0	0	0	0	0	0	Nalecz-Jawecki, 2003,15
[N _{11-14-1Ph}][Br]	-0,39	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	25	0	0	0	0	0	0	Garcia, 2001, 30
[N _{11-16-1Ph}][Br]	0,11	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	17	0	0	0	0	0	0	Garcia, 2001, 30
[N _{11-16-1Ph}][Cl]	-0,31	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	19	0	0	0	0	0	0	Merck, 2010
[N _{11-Ph-1C8O}][Cl]	-0,70	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	19	0	0	0	0	0	0	Nalecz-Jawecki, 2003, 15
[N _{11-Ph-1C10O}][Cl]	-0,62	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	1	12	0	0	0	0	0	0	Nalecz-Jawecki, 2003, 15
[N _{11-Ph-1C12O}][Cl]	-0,38	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	1	14	0	0	0	0	0	0	Nalecz-Jawecki, 2003, 15

ANEXO I. DATOS DE TOXICIDAD PARA V. FISHERI Y DESCRIPTORES DE LÍQUIDOS IÓNICOS

Abrev.	LC50 μ M	n° C más larga unida a N del catión	n° C más corta unida a N del catión	n° C sustitución alquilica en C del catión	n° de O en S ⁺ , S ⁺ no tiene porque ser cadena larga	n° de Cl en S ⁺	n° de Si en S ⁺	n° de N en S ⁺	n° de azufres en S ⁺	n° de OH en S ⁺	n° de CN en S ⁺	n° de Cy6 en S ⁺	SP/N/S/G	n° de dobles enlaces cadenas más larga unida a N	n° de COO- en S ⁺	n° de fenil a C del catión	n° de CONh en S ⁺	n° C de cadea ciclica unida a N del catión	piridil unida a N del catión	Ref.	
[N2220][CH ₃ SO ₄]	5,41	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	1	16	0	0	0	0	0	0	0	Ratamaki, 2019, 15
[N2226][Br]	2,46	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	6	0	0	0	0	0	0	0	Couling, 2005
[N4444][Br]	3,27	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	12	0	0	0	0	0	0	0	Couling, 2005
[C ₄ mPyrr][SbF ₆]	1,69	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	16	0	0	0	0	0	0	0	Montalbán, 2018
[C ₃ mPyrr][PF ₆]	4,01	8	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Sonia, 2012, 15
[C ₃ mPyrr][NTf ₂]	3,29	4	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Sonia, 2012, 15
[C ₄ mPyrr][NTf ₂]	2,54	4	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Stolten, 2007, 30
[C ₄ mPyrr][NTf ₂]	2,72	4	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Viboud, 2012
[C ₄ mPyrr][(C ₂ F ₅) ₃ PF ₃]	1,70	4	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Merck, 2010
[C ₄ mPyrr][Br]	4,40	4	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Viboud, 2012
[C ₄ mPyrr][Br]	4,00	4	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Wang, 2015, 15 min
[C ₄ mPyrr][N(CN) ₂]	4,26	4	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Viboud, 2012
[C ₄ mPyrr][N(CN) ₂]	4,34	4	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Hernández, 2015, 10
[C ₄ mPyrr][CF ₃ SO ₃]	3,98	4	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Viboud, 2012
[C ₆ mPyrr][Cl]	2,99	4	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Luis, 2007, 15
[C ₆ mPyrr][NTf ₂]	2,40	6	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Merck, 2010
[C ₆ mPyrr][Br]	3,19	6	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Viboud, 2012
[C ₆ mPyrr][Br]	2,95	6	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Wang, 2015, 15 min
[C ₆ mPyrr][Cl]	2,17	6	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Viboud, 2012
[C ₈ mPyrr][NTf ₂]	1,58	8	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Viboud, 2012

ANEXO I. DATOS DE TOXICIDAD PARA V. FISHERI Y DESCRIPTORES DE LÍQUIDOS IÓNICOS

Abrev.	LC50 μ M	n° C más larga unida a N del catión	n° C más corta unida a N del catión	n° C sustitución alquilica en C del catión	n° de O en S ⁺ , S ⁺ no tiene porque ser cadena larga	n° de Cl en S ⁺	n° de Si en S ⁺	n° de N en S ⁺	n° de azufres en S ⁺	n° de OH en S ⁺	n° de CN en S ⁺	n° de Cy6 en S ⁺	SP/N/S/G	n° de dobles enlaces cadenas más larga unida a N	n° de COO- en S ⁺	n° de fenil a C del catión	n° de CONh en S ⁺	n° C de cadea ciclica unida a N del catión	piridil unida a N del catión	Ref.
[C ₈ mPyrr][NTf ₂]	1,53	8	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Montalban, 2018,15
[C ₈ mPyrr][SbF ₆]	1,69	8	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Montalban, 2018,15
[C ₈ mPyrr][Br]	2,26	8	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Viboud, 2012
[C ₈ mPyrr][Br]	2,15	8	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Wang, 2015, 15 min
[C ₈ -3mPyrr][Br]	1,66	8	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Montalban, 2018,15
[EO-OC ₂ mPyrr][NTf ₂]	3,23	8	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Merck, 2010
[EOC ₂ mPyrr][NTf ₂]	2,97	4	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	Merck, 2010
[OHC ₃ mPyrr][NTf ₂]	3,91	4	1	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Merck, 2010
[C ₄ -C ₃ CNPyrr][Br]	5,33	3	1	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Viboud, 2012
[C ₂ mMorp][Br]	5,21	4	4	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	Pretti, 2011,30
[C ₄ mMorp][Br]	4,87	2	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Pretti, 2011,30
[C ₄ mMorp][NTf ₂]	2,49	4	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Stolte, 2007,30
[C ₄ mMorp][Br]	5,45	4	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Viboud, 2012
[C ₄ mMorp][N(CN) ₂]	4,89	4	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Viboud, 2012
[C ₄ mMorp][CF ₃ SO ₃]	4,40	4	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Viboud, 2012
[C ₆ mMorp][Br]	3,94	4	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Pretti, 2011,30
[C ₈ mMorp][Br]	2,56	6	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Viboud, 2012
[C ₈ mMorp][Br]	2,38	8	4	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Pretti, 2011,30
[C ₁₀ mMorp][Br]	1,30	8	4	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Pretti, 2011,30
[EOC ₁ mMorp][NTf ₂]	3,38	10	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Cho

ANEXO I. DATOS DE TOXICIDAD PARA V. FISHERI Y DESCRIPTORES DE LÍQUIDOS IÓNICOS

Abrev.	LC50 µM	n° C más larga unida a N del catión	n° C más corta unida a N del catión	n° C sustitución alquilica en C del catión	n° de O en S*, S* no tiene porque ser cadena larga	n° de Cl en S*	n° de Si en S*	n° de N en S*	n° de azufres en S*	n° de OH en S*	n° de CN en S*	n° de Cy6 en S*	SP/N/S/G	n° de dobles enlaces cadenas más larga unida a N	n° de COO- en S*	n° de fenil a C del catión	n° de CONh en S*	n° C de cadea ciclica unida a N del catión	piridil unida a N del catión	Ref.
[4,5][oac]	4,64	3	1	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Ramataki, 2019,15
[5,5][oac]	4,08	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	4	0	Ramataki, 2019,15
[5,6][oac]	4,02	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	5	0	Ramataki, 2019,15
[C ₃ mPip][PF6]	3,59	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	6	0	Sonia, 2012,15
[C ₃ mPip][NTf2]	3,01	3	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Sonia, 2012,15
[C ₄ mPip][Br]	3,84	3	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Wang, 2015, 15 min
[C ₄ mPip][Br]	4,22	4	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Viboud, 2012
[C ₄ mPip][Br]	4,27	4	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Stolte, 2007,30
[C ₄ mPip][NTf2]	2,56	4	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Stolte, 2007,30
[C ₆ mPip][Br]	2,76	4	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Wang, 2015, 15 min
[C ₆ mPip][Br]	2,94	6	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Viboud, 2012
[C ₆ mPip][Br]	1,91	6	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Wang, 2015, 15 min
[C ₆ mPip][Br]	2,00	8	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Viboud, 2012
[C ₈ ePip][Br]	3,66	8	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Wang, 2015, 15 min
[C ₈ ePip][Br]	3,96	4	2	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Viboud, 2012
[C ₈ ePip][Br]	1,79	4	2	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Wang, 2015, 15 min
[C ₈ ePip][Br]	1,80	8	2	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Viboud, 2012
[C ₈ ePip][I]	2,20	8	2	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Viboud, 2012
[C ₈ ePip][SCN]	1,50	8	2	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Viboud, 2012
[C ₄ TROP][Br]	5,36	8	2	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Viboud, 2012

ANEXO I. DATOS DE TOXICIDAD PARA V. FISHERI Y DESCRIPTORES DE LÍQUIDOS IÓNICOS

Abrev.	LC50 μ M	n° C más larga unida a N del catión	n° C más corta unida a N del catión	n° C sustitución alquilica en C del catión	n° de O en S ⁺ , S ⁺ no tiene porque ser cadena larga	n° de Cl en S ⁺	n° de Si en S ⁺	n° de N en S ⁺	n° de azufres en S ⁺	n° de OH en S ⁺	n° de CN en S ⁺	n° de Cy6 en S ⁺	SP/N/S/G	n° de dobles enlaces cadenas más larga unida a N	n° de COO- en S ⁺	n° de fenil a C del catión	n° de CONh en S ⁺	n° C de cadea ciclica unida a N del catión	piridil unida a N del catión	Ref.
[C ₄ TROP][I]	4,74	4	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Viboud, 2012
[C ₄ TROP][NTf ₂]	2,61	4	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Viboud, 2012
[C ₄ TROP][SCN]	4,07	4	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Viboud, 2012
[C ₆ TROP][NTf ₂]	2,17	4	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Jafari, 2019
[C ₆ TROP][N(CN) ₂]	2,52	8	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Viboud, 2012
[C ₆ TROP][BF ₄]	2,77	8	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Viboud, 2012
[Bu ₃ NC ₄][Sac]	3,11	8	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Parajo, 2019,15
[Bu ₃ NC ₄][Sac]	2,92	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	17	0	1	0	0	0	0	Parajo, 2019,30
[Bu ₃ NC ₂][Sac]	2,36	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	17	0	1	0	0	0	0	Parajo, 2019,15
[Bu ₃ NC ₂][Sac]	2,18	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	15	0	1	0	0	0	0	Parajo, 2019,30
[Me ₃ NC ₂ OC ₁₂][doc]	0,69	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	15	0	1	0	0	0	0	Parajo, 2019,15
[Me ₃ NC ₂ OC ₁₂][doc]	0,65	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	16	0	1	0	0	0	0	Parajo, 2019,30
[Me ₃ NC ₂ OC ₁₂][SCN]	0,35	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	16	0	1	0	0	0	0	Parajo, 2019,15
[Me ₃ NC ₂ OC ₁₂][SCN]	0,25	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	16	0	1	0	0	0	0	Parajo, 2019,30
[Me ₃ NC ₂ OC ₁₄][doc]	0,28	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	16	0	1	0	0	0	0	Parajo, 2019,15
[Me ₃ NC ₂ OC ₁₄][doc]	0,27	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	18	0	1	0	0	0	0	Parajo, 2019,30
[Me ₃ NC ₂ OC ₁₄][SCN]	0,47	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	18	0	1	0	0	0	0	Parajo, 2019,15
[Me ₃ NC ₂ OC ₁₄][SCN]	0,38	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	18	0	1	0	0	0	0	Parajo, 2019,30
[Bu ₃ pC ₂][Sac]	1,54	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	15	0	1	0	0	0	0	Parajo, 2019,15
[Bu ₃ pC ₂][Sac]	1,47	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	15	0	1	0	0	0	0	Parajo, 2019,30

ANEXO I. DATOS DE TOXICIDAD PARA V. FISHERI Y DESCRIPTORES DE LÍQUIDOS IÓNICOS

Abrev.	LC50 µM	n° C más larga unida a N del catión	n° C más corta unida a N del catión	n° C sustitución alquímica en C del catión	n° de O en S*, S* no tiene porque ser cadena larga	n° de Cl en S*	n° de Si en S*	n° de N en S*	n° de azufres en S*	n° de OH en S*	n° de CN en S*	n° de Cy6 en S*	SP/N/S/G	n° de dobles enlaces cadenas más larga unida a N	n° de COO- en S*	n° de fenil a C del catión	n° de CONh en S*	n° C de cadea ciclica unida a N del catión	piridil unida a N del catión	Ref.
[Bu ₃ pC ₄][Sac]	2,12	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	17	0	1	0	0	0	0	Parajo, 2019,15
[Bu ₃ pC ₄][Sac]	1,82	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	17	0	1	0	0	0	0	Parajo, 2019,30
[P ₂₄₄₄][dC ₂ -PO ₄]	3,07	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	14	0	0	0	0	0	0	Couling, 2005,15
[P ₂₄₄₄][diC ₃ -PO ₄]	3,07	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	14	0	0	0	0	0	0	Couling, 2005
[P ₄₄₄₄][Br]	2,71	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	16	0	0	0	0	0	0	Couling, 2005,15
[P ₄₄₄₄][Br]	2,71	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	16	0	0	0	0	0	0	Venture, 2012, 15
[P ₁₄₄₄][Tosilate]	2,64	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	13	0	0	0	0	0	0	Venture, 2012, 15
[P ₁₄₄₄][Tosilate]	2,44	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	13	0	0	0	0	0	0	Hernández, 2015, 10
[P ₄₄₄₁][CH ₃ SO ₃]	2,86	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	13	0	0	0	0	0	0	Venture, 2012, 15
[P ₄₄₄₁][CH ₃ SO ₃]	2,64	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	13	0	0	0	0	0	0	Hernández, 2015, 10
[P ₆₆₆₋₁₄][Br]	3,41	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	32	0	0	0	0	0	0	Couling, 2005,15
[P ₆₆₆₋₁₄][Br]	1,05	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	32	0	0	0	0	0	0	Ventura, 2012, 15
[P ₆₆₆₋₁₄][Cl]	1,14	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	32	0	0	0	0	0	0	Ventura, 2012, 15
[P ₆₆₆₋₁₄][CH ₃ SO ₃]	1,11	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	32	0	0	0	0	0	0	Ventura, 2012, 15
[P ₆₆₆₋₁₄][(C ₂ F ₅) ₃ PF ₃]	1,70	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	32	0	0	0	0	0	0	Merck, 2010
[P ₈₈₈₋₁][oac]	0,28	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	25	0	0	0	0	0	0	Rantamäki, 2019, 15
[C ₂ mDABCO][Br]	5,58	2	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Pretti, 2011,30
[C ₄ mDABCO][Br]	4,87	4	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Pretti, 2011,30
[C ₆ mDABCO][Br]	3,69	6	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Pretti, 2011,30
[C ₈ mDABCO][Br]	2,35	8	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Pretti, 2011,30

ANEXO I. DATOS DE TOXICIDAD PARA V. FISHERI Y DESCRIPTORES DE LÍQUIDOS IÓNICOS

Abrev.	LC50 µM	n° C más larga unida a N del catión	n° C más corta unida a N del catión	n° C sustitución alquímica en C del catión	n° de O en S*, S* no tiene porque ser cadena larga	n° de Cl en S*	n° de Si en S*	n° de N en S*	n° de azufres en S*	n° de OH en S*	n° de CN en S*	n° de Cy6 en S*	SP/N/S/G	n° de dobles enlaces cadenas más larga unida a N	n° de COO- en S*	n° de fenil a C del catión	n° de CONh en S*	n° C de cadea ciclica unida a N del catión	piridil unida a N del catión	Ref.
[C ₁₀ mDABCO][Br]	1,26	10	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Pretti, 2011,30
[G ₁₁₁₁][CH ₃ SO ₃]	3,96	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	4	0	0	0	0	0	0	Ratamaki, 2019,15
[G ₁₁₁₁][CF ₃ COO]	0,47	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	4	0	0	0	0	0	0	Luis P, 2010,15
[G ₁₁₁₁][1COO]	3,17	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	4	0	0	0	0	0	0	Luis P, 2010,15
[G ₁₁₁₁][CF ₃ SO ₃]	3,52	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	4	0	0	0	0	0	0	Luis P, 2010,15
[G ₁₁₁₁][Cap]	2,29	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	4	0	0	0	0	0	0	Luis P, 2010,15
[G ₁₁₁₁][Isost]	1,97	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	4	0	0	0	0	0	0	Ratamaki, 2017, 5 min
[G ₁₁₁₁][Isost]	1,79	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	4	0	0	0	0	0	0	Ratamaki, 2017, 15min
[G ₁₁₁₁][neod]	2,85	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	4	0	0	0	0	0	0	Ratamaki, 2017, 5 min
[G ₁₁₁₁][neod]	2,81	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	4	0	0	0	0	0	0	Ratamaki, 2017, 15min
[TMGC ₄][I]	1,94	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	12	0	0	0	0	0	0	Venture et al., 2012,15
[TMGC ₇][I]	0,93	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	18	0	0	0	0	0	0	Venture et al., 2012,15
[TMGC ₁₂][I]	1,43	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	28	0	0	0	0	0	0	Venture et al., 2012,15
[(di-h)2DMG][Cl]	0,92	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	26	0	0	0	0	0	0	Venture et al., 2012,15
[(C ₃₀)4DMG][Cl]	2,44	0	0	0	4	0	0	0	0	0	0	0	14	0	0	0	0	0	0	Venture et al., 2012,15
[(C ₃₀)4DMG][Isost]	1,99	0	0	0	4	0	0	0	0	0	0	0	14	0	0	0	0	0	0	Ratamaki, 2017, 5 min
[(C ₃₀)4DMG][Isost]	1,82	0	0	0	4	0	0	0	0	0	0	0	14	0	0	0	0	0	0	Ratamaki, 2017, 15min
[(C ₃₀)4DMG][neod]	2,86	0	0	0	4	0	0	0	0	0	0	0	14	0	0	0	0	0	0	Ratamaki, 2017, 5 min
[(C ₃₀)4DMG][neod]	2,84	0	0	0	4	0	0	0	0	0	0	0	14	0	0	0	0	0	0	Ratamaki, 2017, 15min
[C ₄ QUINU][Br]	4,45	4	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Viboud, 2012

ANEXO I. DATOS DE TOXICIDAD PARA V. FISHERI Y DESCRIPTORES DE LÍQUIDOS IÓNICOS

Abrev.	LC50 μ M	n° C más larga unida a N del catión	n° C más corta unida a N del catión	n° C sustitución alquímica en C del catión	n° de O en S ⁺ , S ⁺ no tiene porque ser cadena larga	n° de Cl en S ⁺	n° de Si en S ⁺	n° de N en S ⁺	n° de azufres en S ⁺	n° de OH en S ⁺	n° de CN en S ⁺	n° de Cy6 en S ⁺	SP/N/S/G	n° de dobles enlaces cadenas más larga unida a N	n° de COO- en S ⁺	n° de fenil a C del catión	n° de CONh en S ⁺	n° C de cadea ciclica unida a N del catión	piridil unida a N del catión	Ref.
[C ₈ QUINU][Br]	2,32	8	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Viboud, 2012
[C ₈ QUINU][N(CN) ₂]	2,26	8	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Viboud, 2012
[MeI][1COO]	2,39	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Luis P, 2010,15
[MeI][CF ₃ COO]	2,24	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Luis P, 2010,15
[MeI][CF ₃ SO ₃]	2,45	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Luis P, 2010,15
[S ₂₂₂][NTf ₂]	3,26	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	6	0	0	0	0	0	0	Merck, 2010
[DBNH][OMs]	4,02	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Rantamäki, 2019, 15
[DBUH][OMs]	3,77	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Rantamäki, 2019, 15
5[MTBNH][OMs]	3,96	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Rantamäki, 2019, 15
7[MTBNH][OMs]	3,96	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Rantamäki, 2019, 15
[MTBDH][OMs]	3,86	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Rantamäki, 2019, 15

ANEXO II. DATOS DE TOXICIDAD PARA D. MAGNA Y DESCRIPTORES DE LÍQUIDOS IÓNICOS

Abrev,	LC50 (µM)	Br	Cl	NTf ₂	BF ₄	N(CN) ₂	PF ₆	dC ₂ PO ₄	1OSO ₃	CF ₃ OSO ₃	N ₁₁₁ O OH	Sach	1 COO	2COO	3COO	AcSO	Bic	Bit	DHCit	Sal	[C ₄ F ₉ SO ₃]	[C ₄ F ₉ CO ₂]	Dh Cit	I	NO ₃	Ref,	
[C ₂ mim] [NO ₃]	2,59	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	Zang, 2017, 24h	
[C ₂ mim] [NO ₃]	2,44	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	Zang, 2017, 48h	
[C ₂ mim] [Cl]	3,33	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Mao, 2020, 28h	
[C ₂ mim] [C ₄ F ₉ SO ₃]	2,91	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	Veiria, 2019, 48h	
[C ₂ mim] [C ₄ F ₉ CO ₂]	3,03	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	Veiria, 2019, 48h	
[C ₂ ohmim] [C ₄ F ₉ SO ₃]	3,46	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	Veiria, 2019, 48h	
[C ₂ OHmim] [C ₄ F ₉ CO ₂]	3,44	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	Veiria, 2019, 48h	
[C ₂ mim] [Br]	2,59	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Wag, 2015, 48h	
[C ₂ mim] [BF ₄]	3,13	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Costa, 2017	
[C ₂ mim] [NTf ₂]	2,68	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Costa, 2017	
[C ₁ C ₂ mim] [BF ₄]	2,98	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Cho	
[C ₁ C ₂ mim] [N(CN) ₂]	3,00	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Cho	
[C ₃ mim] [NTf ₂]	2,56	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Ventura, 2010, 48h	
[C ₃ mim] [NTf ₂]	2,44	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Ventura, 2010, 21d	
[C ₄ mim] [NO ₃]	1,39	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	Zang, 2017, 24h	
[C ₄ mim] [NO ₃]	1,39	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	Zang, 2017, 24h	
[C ₄ mim] [NO ₃]	1,09	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	Zang, 2017, 48h	
[C ₄ mim] [PF ₆]	1,95	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Garcia, 2005, 24h
[C ₄ mim] [PF ₆]	1,93	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Well, 2006, 48h
[C ₄ mim] [PF ₆]	2,04	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Perales, 2016, 24h

ANEXO II. DATOS DE TOXICIDAD PARA D. MAGNA Y DESCRIPTORES DE LÍQUIDOS IÓNICOS

Abrev,	LC50 (µM)	Br	Cl	NTf ₂	BF ₄	N(CN) ₂	PF ₆	dC ₂ PO ₄	1OSO ₃	CF ₃ OSO ₃	N ₁₁₁ O OH	Sach	1 COO	2COO	3COO	AcSO	Bic	Bit	DHCit	Sal	[C ₄ F ₉ SO ₃]	[C ₄ F ₉ CO ₂]	Dh Cit	I	NO ₃	Ref,	
[C ₄ mim] [PF ₆]	1,85	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Bernot, 2005, 48h
[C ₄ mim] [Cl]	1,57	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Well, 2006, 48h
[C ₄ mim] [Cl]	1,85	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Garcia, 2005, 24h
[C ₄ mim] [Cl]	1,93	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Bernot, 2005, 48h
[C ₄ mim] [BF ₄]	1,68	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Bernot, 2005, 48h
[C ₄ mim] [BF ₄]	1,79	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Garcia, 2005, 24h
[C ₄ mim] [BF ₄]	1,70	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Samori, 2010, 48h
[C ₄ mim] [BF ₄]	1,36	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Samori, 2007, 48h
[C ₄ mim] [Br]	1,78	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Garcia, 2005, 24
[C ₄ mim] [Br]	1,42	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Wag, 2015, 48h
[C ₄ mim] [Br]	1,57	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Bernot, 2005, 48h
[C ₄ mim] [Br]	1,84	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Yu, 2009, 48h
[C ₄ mim] [Br]	2,14	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Koutias, 2019, 24h
[C ₄ mim] [Br]	2,07	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Koutias, 2019, 48h
[C ₄ mim] [MeSO ₄]	1,75	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Koutias, 2019, 24h
[C ₄ mim] [MeSO ₄]	1,67	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Koutias, 2019, 48h
[C ₄ mim] [NTf ₂]	1,65	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Pretti 2009, 48h
[MOC ₂ mim] [BF ₄]	2,98	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Samori, 2007, 48h
[MOC ₂ mim] [BF ₄]	1,90	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Samori, 2010, 48h

ANEXO II. DATOS DE TOXICIDAD PARA D. MAGNA Y DESCRIPTORES DE LÍQUIDOS IÓNICOS

Abrev,	LC50 (µM)	Br	Cl	NTf ₂	BF ₄	N(CN) ₂	PF ₆	dC ₂ PO ₄	1OSO ₃	CF ₃ OSO ₃	N ₁₁₁ O OH	Sach	1 COO	2COO	3COO	AcSO	Bic	Bit	DHCit	Sal	[C ₄ F ₉ SO ₃]	[C ₄ F ₉ CO ₂]	Dh Cit	I	NO ₃	Ref,	
[MOC ₂ mim][BF ₄]	2,97	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Samori, 2010, 48h
[MOC ₂ mim][BF ₄]	3,06	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Samori, 2010, 48h
[MOC ₂ mim][N(CN) ₂]	3,00	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Samori, 2007, 48h
[MOC ₂ mim][N(CN) ₂]	2,89	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Samori, 2010, 48h
[MOC ₂ mim][N(CN) ₂]	2,97	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Samori, 2010, 48h
[MOC ₂ mim][N(CN) ₂]	2,81	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Samori, 2010, 48h
[MOC ₂ mim][N(CN) ₂]	2,99	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Samori, 2010, 48h
[C ₄ mim][N(CN) ₂]	1,70	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Samori, 2010, 48 h
[C ₄ -23mim][Br]	1,88	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Wag, 2015, 48h
[C ₆ mim][NO ₃]	0,48	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	Zang, 2017, 24h	
[C ₆ mim][NO ₃]	0,19	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	Zang, 2017, 48h	
[C ₆ mim][BF ₄]	1,13	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Garcia 2001, 24h
[C ₆ mim][Cl]	1,09	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Garcia 2001, 24h
[C ₆ mim][Br]	0,78	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Coulig 2005, 48h
[C ₆ mim][Br]	0,99	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Wag, 2015, 48h
[C ₆ mim][Br]	1,06	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Yu, 2009, 48h
[C ₆ -23mim][Br]	0,81	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Coulig 2005, 48h
[C ₆ -23mim][Br]	0,86	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Wag, 2015, 48h
[C ₈ mim][NO ₃]	0,17	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	Zang, 2017, 24h	

ANEXO II. DATOS DE TOXICIDAD PARA D. MAGNA Y DESCRIPTORES DE LÍQUIDOS IÓNICOS

Abrev,	LC50 (µM)	Br	Cl	NTf ₂	BF ₄	N(CN) ₂	PF ₆	dC ₂ PO ₄	1OSO ₃	CF ₃ OSO ₃	N ₁₁₁ O OH	Sach	1 COO	2COO	3COO	AcSO	Bic	Bit	DHCit	Sal	[C ₄ F ₉ SO ₃]	[C ₄ F ₉ CO ₂]	Dh Cit	I	NO ₃	Ref.
[C ₈ mim][NO ₃]	0,02	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	Zang, 2017, 48h
[C ₈ mim][Br]	-1,33	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Coulig 2005, 48h
[C ₈ mim][Br]	-0,95	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Wag, 2015, 48h
[C ₈ mim][Br]	0,54	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Yu 2009, 48h
[C ₈ -23mim][Br]	-1,29	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Wag, 2015, 48h
[C ₈ mim][BF ₄]	0,66	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Garcia 2001, 24h
[C ₈ mim][Cl]	0,54	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Garcia 2001, 24h
[C ₁₀ mim][NO ₃]	-0,91	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	Zang, 2017, 24h
[C ₁₀ mim][NO ₃]	-1,02	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	Zang, 2017, 48h
[C ₁₀ mim][Br]	-0,31	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Yu, 2009, 48h
[C ₁₂ mim][NO ₃]	-1,35	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	Zang, 2017, 24h
[C ₁₂ mim][NO ₃]	-1,42	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	Zang, 2017, 48h
[C ₁₂ mim][Br]	-0,82	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Yu, 2009, 48h
[C ₁₂ mim][Cl]	1,49	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Mano, 2020, 28h
[im(CH ₂ COOCs) ₂][Cl]	0,26	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Trust, 2020, 48h
[im(CH ₂ COOCs) ₂][Cl]	0,71	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Trust, 2020, 48h
[C ₁₂ mim][Cl]	-1,82	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Wells, 2006, 48h
[C ₁₂ mim][Cl]	1,49	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Mao, 2020, 28h
[C ₁₆ mim][Cl]	-2,00	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Wells 2006, 48h
[C ₁₈ mim][Cl]	-2,34	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Wells 2006,

ANEXO II. DATOS DE TOXICIDAD PARA D. MAGNA Y DESCRIPTORES DE LÍQUIDOS IÓNICOS

Abrev,	LC50 (µM)	Br	Cl	NTf ₂	BF ₄	N(CN) ₂	PF ₆	dC ₂ PO ₄	1OSO ₃	CF ₃ OSO ₃	N ₁₁₁ O OH	Sach	1 COO	2COO	3COO	AcSO	Bic	Bit	DHCit	Sal	[C ₄ F ₉ SO ₃]	[C ₄ F ₉ CO ₂]	Dh Cit	I	NO ₃	Ref,	
																											48h
[MOC ₂ mim][BF ₄]	2,98	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Samori , 2007
[MOC ₂ mim][N(CN) ₂]	2,88	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Samori 2010
[12ClC ₂ mim][Cl]	0,04	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	xxx
[13OHC ₃ mim][Cl]	2,53	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Pretti, 2009, 48h
[32OHC ₃ mim][Cl]	2,53	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	xxx
[TMSimim][Br]	1,85	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Pretti, 2009, 48h
[Py][CF ₃ SO ₃]	1,72	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Koutinas , 2020, 24h
[Py][CF ₃ SO ₃]	1,64	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Koutinas , 2020, 48h
[C ₂ mpy][C ₄ F ₉ CO ₂]	2,50	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	Veiria, 2019, 48h
[C ₄ Py][Br]	1,72	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Errazquin, 2021
[C ₄ Py][Br]	1,72	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Wag, 2015, 48h
[C ₄ Py][Cl]	2,07	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Wells, 2006, 48h
[C ₃₁ Py][NTf ₂]	2,38	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Sonia, 2012, 48h
[C ₄ Py][NTf ₂]	0,62	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Pretti, 2009, 48h
[C ₄ -3mPy][Br]	1,76	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Coulig 2005, 48h
[C ₄ -3mPy][Br]	1,66	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Wag, 2015, 48h
[C ₄ -35mPy][Br]	1,99	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Coulig 2005, 48h
[C ₄ -35mPy][Br]	2,03	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Wag, 2015, 48h
[C ₄ -235mPy][Br]	1,95	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Wag, 2015, 48h

ANEXO II. DATOS DE TOXICIDAD PARA D. MAGNA Y DESCRIPTORES DE LÍQUIDOS IÓNICOS

Abrev,	LC50 (µM)	Br	Cl	NTf ₂	BF ₄	N(CN) ₂	PF ₆	dC ₂ PO ₄	1OSO ₃	CF ₃ OSO ₃	N ₁₁₁ O OH	Sach	1 COO	2COO	3COO	AcSO	Bic	Bit	DHCit	Sal	[C ₄ F ₉ SO ₃]	[C ₄ F ₉ CO ₂]	Dh Cit	I	NO ₃	Ref,	
[C ₆ Py] [Br]	1,07	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Coulig 2005, 48h
[C ₆ Py] [Br]	1,16	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Wag, 2015, 48h
[C ₆ -3mPy] [Br]	0,59	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Coulig 2005, 48h
[C ₆ -3mPy] [Br]	0,63	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Wag, 2015, 48h
[C ₆ -4C ₁ NPY] [Br]	-0,28	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	coulig 2005, 48h
[C ₆ -4C ₁ NPY] [Br]	-0,20	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	xxx
[C ₆ -3C ₁ -4C ₁ NPY] [Br]	0,21	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Coulig 2005, 48h
[C ₈ Py] [Br]	-0,20	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Wag, 2015, 48h
[C ₈ -3mPy] [Br]	0,57	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Wag, 2015, 48h
[C ₈ -3mPy] [Br]	0,40	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Coulig 2005, 48h
[C ₈ -235mPy] [Br]	-0,21	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Wag, 2015, 48h
[N11] [N ₁₁₁ OOH]	3,28	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Costa, 2017
[N ₁₁₂ OHPH] [Cl]	3,00	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Silva, 2019
[N ₁₁₂ OHPH] [Cl]	3,00	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Santos, 2015, 48h
[N ₂₂₂₁] [1OSO ₃]	2,63	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	xxx
[Bu ₃ NC ₂] [Br]	1,98	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Errazquin, 2021, 24h
[Bu ₃ NC ₄] [Br]	2,40	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Errazquin, 2021, 24h
[Bu ₃ NC ₂] [Br]	1,76	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Errazquin, 2021, 24h
[Bu ₃ NC ₄] [Br]	2,00	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Errazquin, 2021, 24h
[N ₁₁₁] [NTf ₂]	1,61	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Cho

ANEXO II. DATOS DE TOXICIDAD PARA D. MAGNA Y DESCRIPTORES DE LÍQUIDOS IÓNICOS

Abrev,	LC50 (µM)	Br	Cl	NTf ₂	BF ₄	N(CN) ₂	PF ₆	dC ₂ PO ₄	1OSO ₃	CF ₃ OSO ₃	N ₁₁₁ O OH	Sach	1 COO	2COO	3COO	AcSO	Bic	Bit	DHCit	Sal	[C ₄ F ₉ SO ₃]	[C ₄ F ₉ CO ₂]	Dh Cit	I	NO ₃	Ref,	
[N ₁₁₁] [1OSO ₃]	1,82	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Cho
[N ₄₄₄] [BF ₄]	1,83	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Costa, 2017
[N ₄₄₄] [PF ₆]	1,78	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Koutias, 2019, 24h
[N ₄₄₄] [PF ₆]	1,72	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Koutias, 2019, 48h
[N ₄₄₄][Br]	1,47	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Coulig 2005, 48h
[N ₄₄₄][I]	0,87	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	Koutias, 2019, 24h
[N ₄₄₄][I]	0,78	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	Koutias, 2019, 48h
[N ₈₈₈] [NTf ₂]	-0,51	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Wells, 2006, 48h
[N ₁₂₁₁][Br]	0,09	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Garcia 2001, 24h
[N _{12Ph11}] [Br]	-0,47	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Garcia 2001, 24h
[N ₁₄₁₁][Br]	-0,38	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Garcia 2001, 24h
[N _{14Ph11}] [Cl]	-0,45	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Garcia 2001, 24h
[N ₁₆₁₁][Br]	-0,45	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Garcia 2001, 24h
[N _{16Ph11}] [Cl]	-0,26	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Garcia 2001, 24h
AMMOENG 130 39C ₂ OH[Cl]	-0,05	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Pretti, 2009, 48h
[CamPyrr] [BF ₄]	2,78	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Costa, 2017
[CamPyrr] [NTf ₂]	1,94	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Pretti, 2009, 48h
[CamPyrr] [NTf ₂]	2,59	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Sonia, 2012, 48h
[CamPyrr] [NTf ₂]	2,48	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Sonia, 2012, 21d
[CamPyrr] [1OSO ₃]	2,60	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Cho

ANEXO II. DATOS DE TOXICIDAD PARA D. MAGNA Y DESCRIPTORES DE LÍQUIDOS IÓNICOS

Abrev,	LC50 (µM)	Br	Cl	NTf ₂	BF ₄	N(CN) ₂	PF ₆	dC ₂ PO ₄	1OSO ₃	CF ₃ OSO ₃	N ₁₁₁ O OH	Sach	1 COO	2COO	3COO	AcSO	Bic	Bit	DHCit	Sal	[C ₄ F ₉ SO ₃]	[C ₄ F ₉ CO ₂]	Dh Cit	I	NO ₃	Ref.	
[CamPyrr] [Br]	2,27	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Wag, 2015, 48h
[CamPyrr] [Br]	1,31	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Wag, 2015, 48h
[CamPyrr] [Br]	0,01	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Wag, 2015, 48h
[C ₄ mPip] [Br]	1,80	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Wag, 2015, 48h
[C ₄ C ₂ Pip] [Br]	2,06	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Wag, 2015, 48h
[C ₂ C ₂ Pip] [Br]	-0,18	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Wag, 2015, 48h
[CamPip] [Br]	1,04	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Wag, 2015, 48h
[CamPip] [Br]	-0,41	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Wag, 2015, 48h
[C ₃ mPip] [NTf ₂]	2,44	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Sonia, 2012, 48h
[P ₂₄₄₄] [dC ₂ -PO ₄]	1,46	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Wells, 2006,48 h
[P ₄₄₄₄][Br]	0,95	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Coullig 2005, 48h
[P ₄₄₄₄][Br]	1,20	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	xxx
[P ₆₆₆₋₁₄][Cl]	-0,86	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Costa, 2017
[P ₆₆₆₋₁₄][Cl]	-0,86	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Wells, 2006, 48h
[P ₆₆₆₋₁₄] [N(CN) ₂]	-0,51	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Costa, 2017
[Chol] [Sach]	3,63	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Nockem a, 2007, 48h
[Chol] [AcSO]	3,74	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Nockem a, 2007, 48h
[Chol] [Cl]	3,63	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Mano, 2020, 28h
[Chol] [Cl]	3,70	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Santos, 2015, 48h
[Chol] [1COO]	3,63	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Santos, 2015, 48h

ANEXO II. DATOS DE TOXICIDAD PARA D. MAGNA Y DESCRIPTORES DE LÍQUIDOS IÓNICOS

Abrev,	LC50 (µM)	Br	Cl	NTf ₂	BF ₄	N(CN) ₂	PF ₆	dC ₂ PO ₄	1OSO ₃	CF ₃ OSO ₃	N ₁₁₁ O OH	Sach	1 COO	2COO	3COO	AcSO	Bic	Bit	DHCit	Sal	[C ₄ F ₉ SO ₃]	[C ₄ F ₉ CO ₂]	Dh Cit	I	NO ₃	Ref,	
[Chol] [1COO]	3,63	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Costa, 2017
[Chol] [2COO]	3,58	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Santos, 2015, 48
[Chol] [3COO]	3,53	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Santos, 2015, 48h
[Chol][Bic]	3,71	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Santos, 2015, 48h
[Chol][Bit]	3,21	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	Santos, 2015, 48h
[Chol][Bic]	3,71	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Costa, 2017
[Chol][Bit]	3,21	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	Costa, 2017
[Chol] [DHCit]	3,29	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	Mano, 2020, 28
[Chol] [DHCit]	3,17	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	Santos, 2015, 48h
[Chol] [DHphost]	3,53	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	Santos, 2015, 48h
[Chol] [Sal]	3,65	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	Costa, 2017
[Chol] [Sal]	3,65	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	Santos, 2015, 48h
[Chol] [C ₄ F ₉ SO ₃]	3,69	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	Veiria, 2019, 48h
[Chol] [C ₄ F ₉ CO ₂]	3,74	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	Veiria, 2019, 48h
[C ₁ OChol] [1OSO ₃]	1,69	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Cho
[C ₁ OChol] [NTf ₂]	1,68	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Cho

ANEXO II. DATOS DE TOXICIDAD PARA D. MAGNA Y DESCRIPTORES DE LÍQUIDOS IÓNICOS

Abrev,	LC50 μ M	Im	Py	N	Pyrr	Pip	P	Chol	Ref,
[C ₂ mim][NO ₃]	2,59	1	0	0	0	0	0	0	Zang, 2017, 24h
[C ₂ mim][NO ₃]	2,44	1	0	0	0	0	0	0	Zang, 2017, 48h
[C ₂ mim] [Cl]	3,33	1	0	0	0	0	0	0	Mao, 2020, 28h
[C ₂ mim] [C ₄ F ₉ SO ₃]	2,91	1	0	0	0	0	0	0	Veiria, 2019, 48h
[C ₂ mim] [C ₄ F ₉ CO ₂]	3,03	1	0	0	0	0	0	0	Veiria, 2019, 48h
[C ₂ ohmim] [C ₄ F ₉ SO ₃]	3,46	1	0	0	0	0	0	0	Veiria, 2019, 48h
[C ₂ OHmim] [C ₄ F ₉ CO ₂]	3,44	1	0	0	0	0	0	0	Veiria, 2019, 48h
[C ₂ mim] [Br]	2,59	1	0	0	0	0	0	0	Wag, 2015, 48h
[C ₂ mim] [BF ₄]	3,13	1	0	0	0	0	0	0	Costa, 2017
[C ₂ mim] [NTf ₂]	2,68	1	0	0	0	0	0	0	Costa, 2017
[C ₁ C ₂ mim] [BF ₄]	2,98	1	0	0	0	0	0	0	Cho
[C ₁ C ₂ mim] [N(CN) ₂]	3,00	1	0	0	0	0	0	0	Cho
[C ₃ mim] [NTf ₂]	2,56	1	0	0	0	0	0	0	Venture, 2010, 48h
[C ₃ mim] [NTf ₂]	2,44	1	0	0	0	0	0	0	Venture, 2010, 21d
[C ₄ mim] [NO ₃]	1,39	1	0	0	0	0	0	0	Zang, 2017, 24h
[C ₄ mim] [NO ₃]	1,39	1	0	0	0	0	0	0	Zang, 2017, 24h
[C ₄ mim] [NO ₃]	1,09	1	0	0	0	0	0	0	Zang, 2017,48h
[C ₄ mim] [PF ₆]	1,95	1	0	0	0	0	0	0	Garcia, 2005, 24h
[C ₄ mim] [PF ₆]	1,93	1	0	0	0	0	0	0	Well, 2006, 48h
[C ₄ mim] [PF ₆]	2,04	1	0	0	0	0	0	0	Perales, 2016,24h
[C ₄ mim] [PF ₆]	1,85	1	0	0	0	0	0	0	Bernot, 2005, 48h
[C ₄ mim] [Cl]	1,57	1	0	0	0	0	0	0	Well, 2006, 48h
[C ₄ mim] [Cl]	1,85	1	0	0	0	0	0	0	Garcia, 2005, 24h
[C ₄ mim] [Cl]	1,93	1	0	0	0	0	0	0	Bernot, 2005, 48h

ANEXO II. DATOS DE TOXICIDAD PARA D. MAGNA Y DESCRIPTORES DE LÍQUIDOS IÓNICOS

Abrev,	LC50 μ M	Im	Py	N	Pyrr	Pip	P	Chol	Ref,
[C ₄ mim] [BF ₄]	1,68	1	0	0	0	0	0	0	Bernot, 2005, 48h
[C ₄ mim] [BF ₄]	1,79	1	0	0	0	0	0	0	Garcia, 2005, 24h
[C ₄ mim] [BF ₄]	1,70	1	0	0	0	0	0	0	Samori, 2010, 48h
[C ₄ mim] [BF ₄]	1,36	1	0	0	0	0	0	0	Samori, 2007, 48h
[C ₄ mim] [Br]	1,78	1	0	0	0	0	0	0	Garcia, 2005, 24h
[C ₄ mim] [Br]	1,42	1	0	0	0	0	0	0	Wag, 2015,48h
[C ₄ mim] [Br]	1,57	1	0	0	0	0	0	0	Bernot, 2005, 48h
[C ₄ mim] [Br]	1,84	1	0	0	0	0	0	0	Yu, 2009, 48h
[C ₄ mim] [Br]	2,14	1	0	0	0	0	0	0	Koutias, 2019, 24h
[C ₄ mim] [Br]	2,07	1	0	0	0	0	0	0	Koutias, 2019, 48h
[C ₄ mim] [MeSO ₄]	1,75	1	0	0	0	0	0	0	Koutias, 2019, 24h
[C ₄ mim] [MeSO ₄]	1,67	1	0	0	0	0	0	0	Koutias, 2019, 48h
[C ₄ mim] [NTf ₂]	1,65	1	0	0	0	0	0	0	Pretti 2009,48h
[MOC ₂ mim][BF ₄]	2,98	1	0	0	0	0	0	0	Samori, 2007, 48h
[MOC ₂ mim] [BF ₄]	1,90	1	0	0	0	0	0	0	Samori, 2010, 48h
[MOC ₂ mim][BF ₄]	2,97	1	0	0	0	0	0	0	Samori, 2010, 48h
[MOC ₂ mim][BF ₄]	3,06	1	0	0	0	0	0	0	Samori, 2010, 48h
[MOC ₂ mim][N(CN) ₂]	3,00	1	0	0	0	0	0	0	Samori, 2007, 48h
[MOC ₂ mim][N(CN) ₂]	2,89	1	0	0	0	0	0	0	Samori, 2010, 48h
[MOC ₂ mim][N(CN) ₂]	2,97	1	0	0	0	0	0	0	Samori, 2010, 48h
[MOC ₂ mim][N(CN) ₂]	2,81	1	0	0	0	0	0	0	Samori, 2010, 48h
[MOC ₂ mim][N(CN) ₂]	2,99	1	0	0	0	0	0	0	Samori, 2010, 48h
[C ₄ mim] [N(CN) ₂]	1,70	1	0	0	0	0	0	0	Samori, 2010,48 h
[C ₄ -23mim] [Br]	1,88	1	0	0	0	0	0	0	Wag, 2015, 48h

ANEXO II. DATOS DE TOXICIDAD PARA D. MAGNA Y DESCRIPTORES DE LÍQUIDOS IÓNICOS

Abrev,	LC50 μ M	Im	Py	N	Pyrr	Pip	P	Chol	Ref,
[C ₆ mim] [NO ₃]	0,48	1	0	0	0	0	0	0	Zang, 2017, 24h
[C ₆ mim] [NO ₃]	0,19	1	0	0	0	0	0	0	Zang, 2017, 48h
[C ₆ mim] [BF ₄]	1,13	1	0	0	0	0	0	0	Garcia 2001, 24h
[C ₆ mim] [Cl]	1,09	1	0	0	0	0	0	0	Garcia 2001, 24h
[C ₆ mim] [Br]	0,78	1	0	0	0	0	0	0	Coulig 2005, 48h
[C ₆ mim] [Br]	0,99	1	0	0	0	0	0	0	Wag, 2015, 48h
[C ₆ mim] [Br]	1,06	1	0	0	0	0	0	0	Yu, 2009, 48h
[C ₆ -23mim] [Br]	0,81	1	0	0	0	0	0	0	Coulig 2005, 48h
[C ₆ -23mim] [Br]	0,86	1	0	0	0	0	0	0	Wag, 2015, 48h
[C ₈ mim] [NO ₃]	0,17	1	0	0	0	0	0	0	Zang, 2017,24h
[C ₈ mim] [NO ₃]	0,02	1	0	0	0	0	0	0	Zang, 2017, 48h
[C ₈ mim] [Br]	-1,33	1	0	0	0	0	0	0	Coulig 2005, 48h
[C ₈ mim] [Br]	-0,95	1	0	0	0	0	0	0	Wag, 2015, 48h
[C ₈ mim] [Br]	0,54	1	0	0	0	0	0	0	Yu 2009, 48h
[C ₈ -23mim] [Br]	-1,29	1	0	0	0	0	0	0	Wag, 2015, 48h
[C ₈ mim] [BF ₄]	0,66	1	0	0	0	0	0	0	Garcia 2001, 24h
[C ₈ mim] [Cl]	0,54	1	0	0	0	0	0	0	Garcia 2001, 24h
[C ₁₀ mim] [NO ₃]	-0,91	1	0	0	0	0	0	0	Zang, 2017, 24h
[C ₁₀ mim] [NO ₃]	-1,02	1	0	0	0	0	0	0	Zang, 2017,48h
[C ₁₀ mim] [Br]	-0,31	1	0	0	0	0	0	0	Yu, 2009, 48h
[C ₁₂ mim] [NO ₃]	-1,35	1	0	0	0	0	0	0	Zang, 2017, 24h
[C ₁₂ mim] [NO ₃]	-1,42	1	0	0	0	0	0	0	Zang, 2017, 48h
[C ₁₂ mim] [Br]	-0,82	1	0	0	0	0	0	0	Yu, 2009, 48h
[C ₁₂ mim] [Cl]	1,49	1	0	0	0	0	0	0	Mano, 2020, 28h

ANEXO II. DATOS DE TOXICIDAD PARA D. MAGNA Y DESCRIPTORES DE LÍQUIDOS IÓNICOS

Abrev,	LC50 μ M	Im	Py	N	Pyrr	Pip	P	Chol	Ref,
[im (CH ₂ COOC ₈) ₂][Cl]	0,26	1	0	0	0	0	0	0	Trust, 2020, 48h
[im (CH ₂ COOC ₈) ₂][Cl]	0,71	1	0	0	0	0	0	0	Trust, 2020, 48h
[C ₁₂ mim][Cl]	-1,82	1	0	0	0	0	0	0	Wells, 2006, 48h
[C ₁₂ mim][Cl]	1,49	1	0	0	0	0	0	0	Mao, 2020, 28h
[C ₁₆ mim][Cl]	-2,00	1	0	0	0	0	0	0	Wells 2006,48h
[C ₁₈ mim][Cl]	-2,34	1	0	0	0	0	0	0	Wells, 2006, 48h
[MOC ₂ mim][BF ₄]	2,98	1	0	0	0	0	0	0	Samori , 2007
[MOC ₂ mim][N(CN) ₂]	2,88	1	0	0	0	0	0	0	Samori 2010
[12ClC ₂ mim][Cl]	0,04	1	0	0	0	0	0	0	xxx
[13OHC ₃ mim][Cl]	2,53	1	0	0	0	0	0	0	Pretti, 2009, 48h
[32OHC ₃ im][Cl]	2,53	1	0	0	0	0	0	0	xxx
[TMSimim][Br]	1,85	1	0	0	0	0	0	0	Pretti, 2009, 48h
[Py][CF ₃ SO ₃]	1,72	0	1	0	0	0	0	0	Koutinas, 2020, 24h
[Py][CF ₃ SO ₃]	1,64	0	1	0	0	0	0	0	Koutinas, 2020, 48h
[C ₂ mpy][C ₄ F ₉ CO ₂]	2,50	0	1	0	0	0	0	0	Veiria, 2019,48h
[C ₄ Py][Br]	1,72	0	1	0	0	0	0	0	Errazquin, 2021
[C ₄ Py][Br]	1,72	0	1	0	0	0	0	0	Wag, 2015, 48h
[C ₄ Py][Cl]	2,07	0	1	0	0	0	0	0	Wells, 2006,48h
[C ₃₁ Py][NTf ₂]	2,38	0	1	0	0	0	0	0	Sonia, 2012, 48h
[C ₄ Py][NTf ₂]	0,62	0	1	0	0	0	0	0	Pretti, 2009, 48h
[C ₄ -3mPy][Br]	1,76	0	1	0	0	0	0	0	Coulig 2005, 48h
[C ₄ -3mPy][Br]	1,66	0	1	0	0	0	0	0	Wag, 2015, 48h
[C ₄ -35mPy][Br]	1,99	0	1	0	0	0	0	0	Coulig 2005, 48h
[C ₄ -35mPy][Br]	2,03	0	1	0	0	0	0	0	Wag, 2015, 48h

ANEXO II. DATOS DE TOXICIDAD PARA D. MAGNA Y DESCRIPTORES DE LÍQUIDOS IÓNICOS

Abrev,	LC50 μ M	Im	Py	N	Pyrr	Pip	P	Chol	Ref,
[C ₄ -235mPy] [Br]	1,95	0	1	0	0	0	0	0	Wag, 2015, 48h
[C ₆ Py] [Br]	1,07	0	1	0	0	0	0	0	Coulig 2005, 48h
[C ₆ Py] [Br]	1,16	0	1	0	0	0	0	0	Wag, 2015, 48h
[C ₆ -3mPy] [Br]	0,59	0	1	0	0	0	0	0	Coulig 2005, 48h
[C ₆ -3mPy] [Br]	0,63	0	1	0	0	0	0	0	Wag, 2015, 48h
[C ₆ -4C ₁ NPY] [Br]	-0,28	0	1	0	0	0	0	0	coulig 2005, 48h
[C ₆ -4C ₁ NPY] [Br]	-0,20	0	1	0	0	0	0	0	xxx
[C ₆ -3C ₁ -4C ₁ NPY] [Br]	0,21	0	1	0	0	0	0	0	Coulig 2005, 48h
[C ₆ Py] [Br]	-0,20	0	1	0	0	0	0	0	Wag, 2015, 48h
[C ₆ -3mPy] [Br]	0,57	0	1	0	0	0	0	0	Wag, 2015, 48h
[C ₆ -3mPy] [Br]	0,40	0	1	0	0	0	0	0	Coulig 2005, 48h
[C ₈ -235mPy] [Br]	-0,21	0	1	0	0	0	0	0	Wag, 2015, 48h
[N ₁₁] [N ₁₁ :OOH]	3,28	0	0	1	0	0	0	0	Costa, 2017
[N ₁₁₂ OHPH] [Cl]	3,00	0	0	1	0	0	0	0	Silva, 2019
[N ₁₁₂ OHPH] [Cl]	3,00	0	0	1	0	0	0	0	Santos, 2015, 48h
[N ₂₂₂] [1OSO ₃]	2,63	0	0	1	0	0	0	0	xxx
[Bu ₃ NC ₂] [Br]	1,98	0	0	1	0	0	0	0	Errazquin, 2021, 24h
[Bu ₃ NC ₄] [Br]	2,40	0	0	1	0	0	0	0	Errazquin, 2021, 24h
[Bu ₃ NC ₂] [Br]	1,76	0	0	0	0	0	1	0	Errazquin, 2021, 24h
[Bu ₃ NC ₄] [Br]	2,00	0	0	0	0	0	1	0	Errazquin, 2021, 24h
[N ₄₁₁₁] [NTf ₂]	1,61	0	0	1	0	0	0	0	Cho
[N ₄₁₁₁] [1OSO ₃]	1,82	0	0	1	0	0	0	0	Cho
[N ₄₄₄₄] [BF ₄]	1,83	0	0	1	0	0	0	0	Costa, 2017
[N ₄₄₄₄] [PF ₆]	1,78	0	0	1	0	0	0	0	Koutias, 2019, 24h

ANEXO II. DATOS DE TOXICIDAD PARA D. MAGNA Y DESCRIPTORES DE LÍQUIDOS IÓNICOS

Abrev,	LC50 μ M	Im	Py	N	Pyrr	Pip	P	Chol	Ref,
[N ₄₄₄₄] [PF ₆]	1,72	0	0	1	0	0	0	0	Koutias, 2019, 48h
[N ₄₄₄₄] [Br]	1,47	0	0	1	0	0	0	0	Coulig 2005, 48h
[N ₄₄₄₄] [I]	0,87	0	0	1	0	0	0	0	Koutias, 2019, 24h
[N ₄₄₄₄] [I]	0,78	0	0	1	0	0	0	0	Koutias, 2019, 48h
[N ₆₈₈₁] [NTf ₂]	-0,51	0	0	1	0	0	0	0	Wells, 2006,48h
[N ₁₂₁₁₁] [Br]	0,09	0	0	1	0	0	0	0	Garcia 2001, 24h
[N _{12Ph₁₁}] [Br]	-0,47	0	0	1	0	0	0	0	Garcia 2001, 24h
[N ₁₄₁₁₁] [Br]	-0,38	0	0	1	0	0	0	0	Garcia 2001, 24h
[N _{14Ph₁₁}] [Cl]	-0,45	0	0	1	0	0	0	0	Garcia 2001, 24h
[N ₁₆₁₁₁] [Br]	-0,45	0	0	1	0	0	0	0	Garcia 2001, 24h
[N _{16Ph₁₁}] [Cl]	-0,26	0	0	1	0	0	0	0	Garcia 2001, 24h
AMMOENG 130 39C ₂ OH[Cl]	-0,05	0	0	1	0	0	0	0	Pretti, 2009, 48h
[C _{4m} Pyrr] [BF ₄]	2,78	0	0	0	1	0	0	0	Costa, 2017
[C _{4m} Pyrr] [NTf ₂]	1,94	0	0	0	1	0	0	0	Pretti, 2009, 48h
[C _{3m} Pyrr] [NTf ₂]	2,59	0	0	0	1	0	0	0	Sonia, 2012, 48h
[C _{3m} Pyrr] [NTf ₂]	2,48	0	0	0	1	0	0	0	Sonia, 2012, 21d
[C _{4m} Pyrr] [1OSO ₃]	2,60	0	0	0	1	0	0	0	Cho
[C _{4m} Pyrr] [Br]	2,27	0	0	0	1	0	0	0	Wag, 2015, 48h
[C _{6m} Pyrr] [Br]	1,31	0	0	0	1	0	0	0	Wag, 2015, 48h
[C _{8m} Pyrr] [Br]	0,01	0	0	0	1	0	0	0	Wag, 2015, 48h
[C _{4m} Pip] [Br]	1,80	0	0	0	0	1	0	0	Wag, 2015, 48h
[C _{4C₂} Pip] [Br]	2,06	0	0	0	0	1	0	0	Wag, 2015, 48h
[C _{8C₂} Pip] [Br]	-0,18	0	0	0	0	1	0	0	Wag, 2015, 48h
[C _{6m} Pip] [Br]	1,04	0	0	0	0	1	0	0	Wag, 2015, 48h

ANEXO II. DATOS DE TOXICIDAD PARA D. MAGNA Y DESCRIPTORES DE LÍQUIDOS IÓNICOS

Abrev,	LC50 μ M	Im	Py	N	Pyrr	Pip	P	Chol	Ref,
[C ₈ mPip] [Br]	-0,41	0	0	0	0	1	0	0	Wag, 2015, 48h
[C ₃ mPip] [NTf ₂]	2,44	0	0	0	0	1	0	0	Sonia, 2012, 48h
[P ₂₄₄₄] [dC ₂ -PO ₄]	1,46	0	0	0	0	0	1	0	Wells, 2006,48h
[P ₄₄₄₄][Br]	0,95	0	0	0	0	0	1	0	Coulig 2005, 48h
[P ₄₄₄₄][Br]	1,20	0	0	0	0	0	1	0	xxx
[P ₆₆₆₋₁₄][Cl]	-0,86	0	0	0	0	0	1	0	Costa, 2017
[P ₆₆₆₋₁₄][Cl]	-0,86	0	0	0	0	0	1	0	Wells, 2006, 48h
[P ₆₆₆₋₁₄] [N(CN) ₂]	-0,51	0	0	0	0	0	1	0	Costa, 2017
[Chol] [Sach]	3,63	0	0	0	0	0	0	1	Nockema, 2007,48h
[Chol] [AcSO]	3,74	0	0	0	0	0	0	1	Nockema, 2007,48h
[Chol] [Cl]	3,63	0	0	0	0	0	0	1	Mano, 2020, 28
[Chol] [Cl]	3,70	0	0	0	0	0	0	1	Santos, 2015, 48h
[Chol] [1COO]	3,63	0	0	0	0	0	0	1	Santos, 2015, 48h
[Chol] [1COO]	3,63	0	0	0	0	0	0	1	Costa, 2017
[Chol] [2COO]	3,58	0	0	0	0	0	0	1	Santos, 2015, 48h
[Chol] [3COO]	3,53	0	0	0	0	0	0	1	Santos, 2015, 48h
[Chol][Bic]	3,71	0	0	0	0	0	0	1	Santos, 2015, 48h
[Chol][Bit]	3,21	0	0	0	0	0	0	1	Santos, 2015, 48h
[Chol][Bic]	3,71	0	0	0	0	0	0	1	Costa, 2017
[Chol][Bit]	3,21	0	0	0	0	0	0	1	Costa, 2017
[Chol] [DHCit]	3,29	0	0	0	0	0	0	1	Mano, 2020,28
[Chol] [DHCit]	3,17	0	0	0	0	0	0	1	Santos, 2015, 48h
[Chol] [DHphost]	3,53	0	0	0	0	0	0	1	Santos, 2015, 48h
[Chol] [Sal]	3,65	0	0	0	0	0	0	1	Costa, 2017

ANEXO II. DATOS DE TOXICIDAD PARA D. MAGNA Y DESCRIPTORES DE LÍQUIDOS IÓNICOS

Abrev,	LC50 μ M	Im	Py	N	Pyrr	Pip	P	Chol	Ref,
[Chol] [Sal]	3,65	0	0	0	0	0	0	1	Santos, 2015,48h
[Chol] [C ₄ F ₉ SO ₃]	3,69	0	0	0	0	0	0	1	Veiria, 2019, 48h
[Chol] [C ₄ F ₉ CO ₂]	3,74	0	0	0	0	0	0	1	Veiria, 2019, 48h
[C ₁ OChol] [1OSO ₃]	1,69	0	0	0	0	0	0	1	Cho
[C ₁ OChol] [NTf ₂]	1,68	0	0	0	0	0	0	1	Cho

ANEXO II. DATOS DE TOXICIDAD PARA D. MAGNA Y DESCRIPTORES DE LÍQUIDOS IÓNICOS

Abrev.	LC50 (µM)	nº C más larga unida a N del catión	nº C más larga unida a N del catión	nºC sustitución alquímica en C del catión	nº O en S	nº Cl en S	nº de Si en S	nº N en S	nº azufres en S	nº de OH en S	nº CN en S	nº de Cy6 en S	SP/N/S/G	nº de dobles enlaces cadenas más larga unida a N	nº de COO en cadena unida a N	Ref.
[C ₂ mim][NO ₃]	2,59	2	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Zang, 2017, 24h
[C ₂ mim][NO ₃]	2,44	2	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Zang, 2017, 48h
[C ₂ mim][Cl]	3,33	2	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Mao, 2020, 28h
[C ₂ mim][C ₄ F ₉ SO ₃]	2,91	2	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Veiria, 2019, 48h
[C ₂ mim][C ₄ F ₉ CO ₂]	3,03	2	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Veiria, 2019, 48h
[C ₂ OHmim][C ₄ F ₉ SO ₃]	3,46	2	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Veiria, 2019, 48h
[C ₂ OHmim][C ₄ F ₉ CO ₂]	3,44	2	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Veiria, 2019, 48h
[C ₂ mim][Br]	2,59	2	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Wag, 2015, 48h
[C ₂ mim][BF ₄]	3,13	2	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Costa, 2017
[C ₂ mim][NTf ₂]	2,68	2	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Costa, 2017
[C ₁ C ₂ mim][BF ₄]	2,98	3	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Cho
[C ₁ C ₂ mim][N(CN) ₂]	3,00	3	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Cho
[C ₃ mim][NTf ₂]	2,56	3	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Ventura, 2010, 48h
[C ₃ mim][NTf ₂]	2,44	3	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Ventura, 2010, 21d
[C ₄ mim][NO ₃]	1,39	4	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Zang, 2017, 24h
[C ₄ mim][NO ₃]	1,39	4	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Zang, 2017, 24h
[C ₄ mim][NO ₃]	1,09	4	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Zang, 2017, 48h
[C ₄ mim][PF ₆]	1,95	4	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Garcia, 2005, 24h
[C ₄ mim][PF ₆]	1,93	4	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Well, 2006, 48h
[C ₄ mim][PF ₆]	2,04	4	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Perales, 2016, 24h
[C ₄ mim][PF ₆]	1,85	4	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Bernot, 2005, 48h
[C ₄ mim][Cl]	1,57	4	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Well, 2006, 48h
[C ₄ mim][Cl]	1,85	4	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Garcia, 2005, 24h

ANEXO II. DATOS DE TOXICIDAD PARA D. MAGNA Y DESCRIPTORES DE LÍQUIDOS IÓNICOS

Abrev.	LC50 (µM)	nº C más larga unida a N del catión	nº C más larga unida a N del catión	nºC sustitución alquímica en C del catión	nº O en S	nº Cl en S	nº de Si en S	nº N en S	nº azufres en S	nº de OH en S	nº CN en S	nº de Cy6 en S	SP/N/S/G	nº de dobles enlaces cadenas más larga unida a N	nº de COO en cadena unida a N	Ref.
[C ₄ mim][Cl]	1,93	4	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Bernot, 2005, 48h
[C ₄ mim][BF ₄]	1,68	4	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Bernot, 2005, 48h
[C ₄ mim][BF ₄]	1,79	4	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Garcia, 2005, 24h
[C ₄ mim][BF ₄]	1,70	4	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Samori, 2010, 48h
[C ₄ mim][BF ₄]	1,36	4	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Samori, 2007, 48h
[C ₄ mim][Br]	1,78	4	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Garcia, 2005, 24h
[C ₄ mim][Br]	1,42	4	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Wag, 2015, 48h
[C ₄ mim][Br]	1,57	4	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Bernot, 2005, 48h
[C ₄ mim][Br]	1,84	4	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Yu, 2009, 48h
[C ₄ mim][Br]	2,14	4	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Koutias, 2019, 24h
[C ₄ mim][Br]	2,07	4	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Koutias, 2019, 48h
[C ₄ mim][MeSO ₃]	1,75	4	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Koutias, 2019, 24h
[C ₄ mim][MeSO ₃]	1,67	4	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Koutias, 2019, 48h
[C ₄ mim][NTf ₂]	1,65	4	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Pretti 2009, 48h
[MOC ₂ mim][BF ₄]	2,98	3	1	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Samori, 2007, 48h
[MOC ₂ mim][BF ₄]	1,90	3	1	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Samori, 2010, 48h
[MOC ₂ mim][BF ₄]	2,97	3	1	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Samori, 2010, 48h
[MOC ₂ mim][BF ₄]	3,06	3	1	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Samori, 2010, 48h
[MOC ₂ mim][N(CN) ₂]	3,00	5	1	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Samori, 2007, 48h
[MOC ₂ mim][N(CN) ₂]	2,89	5	1	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Samori, 2010, 48h
[MOC ₂ mim][N(CN) ₂]	2,97	7	1	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Samori, 2010, 48h
[MOC ₂ mim][N(CN) ₂]	2,81	7	1	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Samori, 2010, 48h
[MOC ₂ mim][N(CN) ₂]	2,99	9	1	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Samori, 2010, 48h
[C ₄ mim][N(CN) ₂]	1,70	4	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Samori, 2010, 48h
[C ₄ -23mim][Br]	1,88	4	1	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Wag, 2015, 48h

ANEXO II. DATOS DE TOXICIDAD PARA D. MAGNA Y DESCRIPTORES DE LÍQUIDOS IÓNICOS

Abrev,	LC50 (µM)	nº C más larga unida a N del catión	nº C más larga unida a N del catión	nºC sustitución alquímica en C del catión	nº O en S	nº Cl en S	nº de Si en S	nº N en S	nº azufres en S	nº de OH en S	nº CN en S	nº de Cy6 en S	SP/N/S/G	nº de dobles enlaces cadenas más larga unida a N	nº de COO en cadena unida a N	Ref,
[C ₆ mim] [NO ₃]	0,48	6	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Zang, 2017, 24h
[C ₆ mim] [NO ₃]	0,19	6	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Zang, 2017, 48h
[C ₆ mim] [BF ₄]	1,13	6	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Garcia 2001, 24h
[C ₆ mim] [Cl]	1,09	6	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Garcia 2001, 24h
[C ₆ mim] [Br]	0,78	6	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Coulig 2005, 48h
[C ₆ mim] [Br]	0,99	6	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Wag, 2015, 48h
[C ₆ mim] [Br]	1,06	6	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Yu, 2009, 48h
[C ₆ -23mim] [Br]	0,81	6	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Coulig 2005, 48h
[C ₆ -23mim] [Br]	0,86	6	1	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Wag, 2015, 48h
[C ₈ mim] [NO ₃]	0,17	6	1	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Zang, 2017, 24h
[C ₈ mim] [NO ₃]	0,02	8	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Zang, 2017, 48h
[C ₈ mim] [Br]	-1,33	8	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Coulig 2005, 48h
[C ₈ mim] [Br]	-0,95	8	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Wag, 2015, 48h
[C ₈ mim] [Br]	0,54	8	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Yu 2009, 48h
[C ₈ -23mim] [Br]	-1,29	8	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Wag, 2015, 48h
[C ₈ mim] [BF ₄]	0,66	8	1	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Garcia 2001, 24h
[C ₈ mim] [Cl]	0,54	8	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Garcia 2001, 24h
[C ₁₀ mim] [NO ₃]	-0,91	8	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Zang, 2017, 24h
[C ₁₀ mim] [NO ₃]	-1,02	10	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Zang, 2017, 48h
[C ₁₀ mim] [Br]	-0,31	10	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Yu, 2009, 48h
[C ₁₂ mim] [NO ₃]	-1,35	10	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Zang, 2017, 24h
[C ₁₂ mim] [NO ₃]	-1,42	12	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Zang, 2017, 48h
[C ₁₂ mim] [Br]	-0,82	12	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Yu, 2009, 48h
[C ₁₂ mim] [Cl]	1,49	12	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Mano, 2020, 28h
[im]	0,26	12	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Trust, 2020, 48h

ANEXO II. DATOS DE TOXICIDAD PARA D. MAGNA Y DESCRIPTORES DE LÍQUIDOS IÓNICOS

Abrev.	LC50 (µM)	n° C más larga unida a N del catión	n° C más larga unida a N del catión	n°C sustitución alquímica en C del catión	n° O en S	n° Cl en S	n° de Si en S	n° N en S	n° azufres en S	n° de OH en S	n° CN en S	n° de Cy6 en S	SP/N/S/G	n° de dobles enlaces cadenas más larga unida a N	n° de COO en cadena unida a N	Ref.
(CH ₂ COOC ₉) ₂ [Cl]																
[im (CH ₂ COOC ₉) ₂][Cl]	0,71	9	9	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	2	Trust, 2020, 48h
[C ₁₂ mim][Cl]	-1,82	13	2	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	2	Wells, 2006, 48h
[C ₁₂ mim][Cl]	1,49	12	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Mao, 2020, 28h
[C ₁₆ mim][Cl]	-2,00	12	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Wells 2006, 48h
[C ₁₈ mim][Cl]	-2,34	16	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Wells 2006, 48h
[MOC ₂ mim][BF ₄]	2,98	18	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Samori, 2007
[MOC ₂ mim][N(CN) ₂]	2,88	3	1	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Samori 2010
[12ClC ₂ mim][Cl]	0,04	3	1	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	xxx
[13OHC ₂ mim][Cl]	2,53	2	1	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Pretti, 2009, 48h
[32OHC ₃ mim][Cl]	2,53	3	1	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	xxx
[TMSimim][Br]	1,85	3	1	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	Pretti, 2009, 48h
[Py][CF ₃ SO ₃]	1,72	4	1	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	Koutinas, 2020, 24h
[Py][CF ₃ SO ₃]	1,64	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Koutinas, 2020, 48h
[C ₂ mpy][C ₄ F ₉ CO ₂]	2,50	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Veiria, 2019, 48h
[C ₄ Py][Br]	1,72	2	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Errazquin, 2021
[C ₄ Py][Br]	1,72	4	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Wag, 2015, 48h
[C ₄ Py][Cl]	2,07	4	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Wells, 2006, 48h
[C ₃₁ Py][NTf ₂]	2,38	4	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Sonia, 2012, 48h
[C ₄ Py][NTf ₂]	0,62	3	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Pretti, 2009, 48h
[C ₄ -3mPy][Br]	1,76	4	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Coulig 2005, 48h
[C ₄ -3mPy][Br]	1,66	4	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Wag, 2015, 48h
[C ₄ -35mPy][Br]	1,99	4	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Coulig 2005, 48h

ANEXO II. DATOS DE TOXICIDAD PARA D. MAGNA Y DESCRIPTORES DE LÍQUIDOS IÓNICOS

Abrev.	LC50 (µM)	n° C más larga unida a N del catión	n° C más larga unida a N del catión	n°C sustitución alquímica en C del catión	n° O en S	n° Cl en S	n° de Si en S	n° N en S	n° azufres en S	n° de OH en S	n° CN en S	n° de Cy6 en S	SP/N/S/G	n° de dobles enlaces cadenas más larga unida a N	n° de COO en cadena unida a N	Ref.
[C ₄ -35mPy][Br]	2,03	4	0	2	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Wag, 2015, 48h
[C ₄ -235mPy][Br]	1,95	4	0	2	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Wag, 2015, 48h
[C ₆ Py][Br]	1,07	4	0	3	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Coulig 2005, 48h
[C ₆ Py][Br]	1,16	6	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Wag, 2015, 48h
[C ₆ -3mPy][Br]	0,59	6	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Coulig 2005, 48h
[C ₆ -3mPy][Br]	0,63	6	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Wag, 2015, 48h
[C ₆ -4C ₁ NPy][Br]	-0,28	6	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	coulig 2005, 48h
[C ₆ -4C ₁ NPy][Br]	-0,20	6	0	2	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	xxx
[C ₆ -3C ₁ -4C ₁ NPy][Br]	0,21	6	0	2	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	Coulig 2005, 48h
[C ₈ Py][Br]	-0,20	6	0	3	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	Wag, 2015, 48h
[C ₈ -3mPy][Br]	0,57	8	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Wag, 2015, 48h
[C ₈ -3mPy][Br]	0,40	8	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Coulig 2005, 48h
[C ₈ -235mPy][Br]	-0,21	8	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Wag, 2015, 48h
[N ₁₁][N ₁₁ OOH]	3,28	8	0	3	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Costa, 2017
[N ₁₂ OHPH][Cl]	3,00	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	2	0	0	Silva, 2019
[N ₁₂ OHPH][Cl]	3,00	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	1	5	0	0	Santos, 2015, 48h
[N ₂₂₂₁][1OSO ₃]	2,63	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	1	5	0	0	xxx
[Bu ₃ NC ₂][Br]	1,98	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	7	0	0	Errazquin, 2021, 24h
[Bu ₃ NC ₄][Br]	2,40	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	15	0	1	Errazquin, 2021, 24h
[Bu ₃ NC ₂][Br]	1,76	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	17	0	1	Errazquin, 2021, 24h
[Bu ₃ NC ₄][Br]	2,00	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	15	0	1	Errazquin, 2021, 24h
[N ₄₁₁₁][NTf ₂]	1,61	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	17	0	1	Cho
[N ₄₁₁₁][1OSO ₃]	1,82	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	7	0	0	Cho
[N ₄₄₄₄][BF ₄]	1,83	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	7	0	0	Costa, 2017
[N ₄₄₄₄][PF ₆]	1,78	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	16	0	0	Koutias, 2019, 24h

ANEXO II. DATOS DE TOXICIDAD PARA D. MAGNA Y DESCRIPTORES DE LÍQUIDOS IÓNICOS

Abrev.	LC50 (µM)	nº C más larga unida a N del catión	nº C más larga unida a N del catión	nºC sustitución alquímica en C del catión	nº O en S	nº Cl en S	nº de Si en S	nº N en S	nº azufres en S	nº de OH en S	nº CN en S	nº de Cy6 en S	SP/N/S/G	nº de dobles enlaces cadenas más larga unida a N	nº de COO en cadena unida a N	Ref.
[N ₄₄₄₄] [PF ₆]	1,72	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	16	0	0	Koutias, 2019, 48h
[N ₄₄₄₄][Br]	1,47	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	16	0	0	Coulig 2005, 48h
[N ₄₄₄₄][I]	0,87	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	16	0	0	Koutias, 2019, 24h
[N ₄₄₄₄][I]	0,78	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	16	0	0	Koutias, 2019, 48h
[N ₈₈₈₁] [NTf ₂]	-0,51	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	16	0	0	Wells, 2006, 48h
[N ₁₂₁₁₁] [Br]	0,09	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	25	0	0	Garcia 2001, 24h
[N _{12Ph11}] [Br]	-0,47	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	15	0	0	Garcia 2001, 24h
[N ₁₄₁₁₁][Br]	-0,38	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	15	0	0	Garcia 2001, 24h
[N _{14Ph11}] [Cl]	-0,45	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	17	0	0	Garcia 2001, 24h
[N ₁₆₁₁₁] [Br]	-0,45	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	17	0	0	Garcia 2001, 24h
[N _{16Ph11}] [Cl]	-0,26	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	19	0	0	Garcia 2001, 24h
AMMOENG 130 39C ₂ OH[Cl]	-0,05	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	19	0	0	Pretti, 2009, 48h
[C _{4m} Pyrr] [BF ₄]	2,78	0	0	0	0	0	0	0	0	2	0	0	39	0	0	Costa, 2017
[C _{4m} Pyrr] [NTf ₂]	1,94	4	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Pretti, 2009, 48h
[C _{3m} Pyrr] [NTf ₂]	2,59	4	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Sonia, 2012, 48h
[C _{3m} Pyrr] [NTf ₂]	2,48	3	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Sonia, 2012, 21d
[C _{4m} Pyrr] [TfSO ₃]	2,60	3	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Cho
[C _{4m} Pyrr] [Br]	2,27	4	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Wag, 2015, 48h
[C _{6m} Pyrr] [Br]	1,31	4	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Wag, 2015, 48h
[C _{8m} Pyrr] [Br]	0,01	6	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Wag, 2015, 48h
[C _{4m} Pip] [Br]	1,80	8	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Wag, 2015, 48h
[C ₄ C ₂ Pip] [Br]	2,06	4	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Wag, 2015, 48h
[C ₆ C ₂ Pip] [Br]	-0,18	4	2	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Wag, 2015, 48h
[C _{8m} Pip] [Br]	1,04	8	2	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Wag, 2015, 48h

ANEXO II. DATOS DE TOXICIDAD PARA D. MAGNA Y DESCRIPTORES DE LÍQUIDOS IÓNICOS

Abrev.	LC50 (µM)	n° C más larga unida a N del catión	n° C más larga unida a N del catión	n°C sustitución alquímica en C del catión	n° O en S	n° Cl en S	n° de Si en S	n° N en S	n° azufres en S	n° de OH en S	n° CN en S	n° de Cy6 en S	SP/N/S/G	n° de dobles enlaces cadenas más larga unida a N	n° de COO en cadena unida a N	Ref.
[C ₃ mPip] [Br]	-0,41	6	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Wag, 2015, 48h
[C ₃ mPip] [NTf ₂]	2,44	8	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Sonia, 2012, 48h
[P ₂₄₄₄] [dC ₂ -PO ₃]	1,46	3	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Wells, 2006,48h
[P ₄₄₄₄][Br]	0,95	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	14	0	0	Coulig 2005, 48h
[P ₄₄₄₄][Br]	1,20	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	16	0	0	xxx
[P ₆₆₆₋₁₄][Cl]	-0,86	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	16	0	0	Costa, 2017
[P ₆₆₆₋₁₄][Cl]	-0,86	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	32	0	0	Wells, 2006, 48h
[P ₆₆₆₋₁₄] [N(CN) ₂]	-0,51	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	32	0	0	Costa, 2017
[Chol] [Sach]	3,63	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	32	0	0	Nockema, 2007, 48h
[Chol] [AcSO]	3,74	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Nockema, 2007, 48h
[Chol] [Cl]	3,63	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Mano, 2020, 28h
[Chol] [Cl]	3,70	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Santos, 2015, 48h
[Chol] [1COO]	3,63	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Santos, 2015, 48h
[Chol] [1COO]	3,63	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Costa, 2017
[Chol] [2COO]	3,58	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Santos, 2015, 48h
[Chol] [3COO]	3,53	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Santos, 2015, 48h
[Chol][Bic]	3,71	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Santos, 2015, 48h
[Chol][Bit]	3,21	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Santos, 2015, 48h
[Chol][Bic]	3,71	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Costa, 2017
[Chol][Bit]	3,21	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Costa, 2017
[Chol] [DHCl]	3,29	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Mano, 2020, 28h
[Chol] [DHCl]	3,17	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Santos, 2015, 48h
[Chol] [DHphost]	3,53	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Santos, 2015, 48h
[Chol] [Sal]	3,65	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Costa, 2017
[Chol] [Sal]	3,65	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Santos, 2015,

ANEXO II. DATOS DE TOXICIDAD PARA D. MAGNA Y DESCRIPTORES DE LÍQUIDOS IÓNICOS

Abrev,	LC50 (µM)	n° C más larga unida a N del catión	n° C más larga unida a N del catión	n°C sustitución alquímica en C del catión	n° O en S	n° Cl en S	n° de Si en S	n° N en S	n° azufres en S	n° de OH en S	n° CN en S	n° de Cy6 en S	SP/N/S/G	n° de dobles enlaces cadenas más larga unida a N	n° de COO en cadena unida a N	Ref,
																48h
[Chol] [C ₄ F ₉ SO ₃]	3,69	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Veiria, 2019, 48h
[Chol] [C ₄ F ₉ CO ₂]	3,74	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Veiria, 2019, 48h
[C ₇ OChol] [1OSO ₃]	1,69	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	Cho
[C ₇ OChol] [NTf ₂]	1,68	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	Cho

ANEXO III. DATOS DE TOXICIDAD PARA P. SUBCAPITATA Y DESCRIPTORES DE LÍQUIDOS IÓNICOS

Abrev.	LC50 (µM)	Br	Cl	I	NTf ₂	BF ₄	PF ₆	SbF ₆	CF ₃ SO ₄	C ₈ H ₁₇ SO ₄	HCO ₂	CCO ₂	C ₂ C O ₂	C ₃ C O ₂	IC ₃ CO ₂	C ₄ C O ₂	HCO ₃	Bit	DH Cit	DH phosphate	Sal	Doc	Sac	Tiocy anate	3-OH-2-naphthoate	2-(hexylthio)acetate	Me SO ₄	Theob	Theo p	Xan	Ur	NO ₃	Ref.			
[C ₁ mim][Cl]	2,84	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Cho	
[C ₂ mim][Cl]	3,26	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Mano, 2020, 96h	
[C ₃ mim][NTf ₂]	1,55	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Ventura, 2013, 92h	
[C ₃ mim][NTf ₂]	1,55	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Ventura, 2010, 96H	
[C ₄ mim][PF ₆]	2,20	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0		
[C ₄ mim][CF ₃ SO ₄]	3,34	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Cho, 2009, 96h
[C ₄ mim][C ₈ H ₁₇ SO ₄]	3,35	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Cho, 2009, 96h
[C ₄ mim][PF ₆]	3,12	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Cho, 2009, 96h
[C ₄ mim][Cl]	2,34	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	xxx	
[C ₄ mim][Cl]	1,90	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Petric, 2013, 72h
[C ₄ mim][Cl]	3,46	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Cho, 2009, 96h
[C ₄ mim][Cl]	3,08	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Koutinas 2019, 72h
[C ₄ mim][Cl]	2,90	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Koutinas 2019, 72h
[C ₄ mim][MeSO ₄]	2,61	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	Koutinas 2019, 72h

ANEXO III. DATOS DE TOXICIDAD PARA P. SUBCAPITATA Y DESCRIPTORES DE LÍQUIDOS IÓNICOS

Abrev.	LC50 (µM)	Br	Cl	I	NTf ₂	BF ₄	PF ₆	SbF ₆	CF ₃ SO ₄	C ₈ H ₁₇ SO ₄	HCO ₂	CCO ₂	C ₂ C O ₂	C ₃ C O ₂	IC ₃ CO ₂	C ₄ C O ₂	HCO ₃	Bit	DH Cit	DH phosphate	Sal	Doc	Sac	Tiocy anate	3-OH-2-naphthoate	2-(hexylthio)acetate	Me SO ₄	Theob	Theo p	Xan	Ur	NO ₃	Ref.			
[C ₄ mim][MeSO ₄]	2,42	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	Koutinas 2019, 96h		
[C ₃ mim][Br]	3,46	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Cho, 2007, 48h	
[C ₃ mim][Br]	3,29	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Cho, 2007, 72h	
[C ₃ mim][Br]	3,14	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Cho, 2007, 96h	
[C ₄ mim][Br]	3,46	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Cho, 2007, 48h	
[C ₄ mim][Br]	3,36	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Cho, 2007, 72h	
[C ₄ mim][Br]	3,02	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Cho, 2007, 96h	
[C ₄ mim][Br]	3,46	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Cho, 2008, 48h
[C ₄ mim][Br]	3,36	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Cho, 2008, 72h
[C ₄ mim][Br]	3,02	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Cho, 2008, 96h
[C ₄ mim][Br]	3,33	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Cho, 2009, 96h
[C ₄ mim][Br]	4,38	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Pham, 2008, 10min
[C ₄ mim][NTf ₂]	1,80	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Erazquin 2021,

ANEXO III. DATOS DE TOXICIDAD PARA P. SUBCAPITATA Y DESCRIPTORES DE LÍQUIDOS IÓNICOS

Abrev.	LC50 (µM)	Br	Cl	I	NTf ₂	BF ₄	PF ₆	SbF ₆	CF ₃ SO ₄	C ₈ H ₁₇ SO ₄	HCO ₂	CCO ₂	C ₂ C O ₂	C ₃ C O ₂	IC ₃ CO ₂	C ₄ C O ₂	HCO ₃	Bit	DH Cit	DH phosphate	Sal	Doc	Sac	Tiocy anate	3-OH-2-naphthoate	2-(hexylthio)acetate	Me SO ₄	Theob	Theo p	Xan	Ur	NO ₃	Ref.		
[C ₄ mim] [NTf ₂]	1,80	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Preti, 2009, 72h	
[C ₄ mim] [BF ₄]	3,57	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Cho
[C ₄ mim] [BF ₄]	3,40	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Cho, 2009, 96h
[C ₄ mim] [SbF ₆]	2,13	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Cho
[C ₄ mim] [SbF ₆]	2,13	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Cho, 2009, 96h
[C ₄ mim] [Br]	2,57	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Cho, 2007, 48h
[C ₄ mim] [Br]	2,54	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Cho, 2007, 72h
[C ₄ mim] [Br]	2,46	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Cho, 2007, 96h
[C ₄ mim] [Br]	4,28	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Pham, 2008, 10min
[C ₄ mim] [Br]	1,65	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Cho, 2007, 48h
[C ₄ mim] [Br]	1,63	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Cho, 2007, 72h
[C ₄ mim] [Br]	1,57	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Cho, 2007, 96h
[C ₄ mim] [Br]	3,54	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Pham, 2008, 10min
[C ₄ mim] [Cl]	0,70	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Peric, 2013, 72h

ANEXO III. DATOS DE TOXICIDAD PARA P. SUBCAPITATA Y DESCRIPTORES DE LÍQUIDOS IÓNICOS

Abrev.	LC50 (µM)	Br	Cl	I	NTf ₂	BF ₄	PF ₆	SbF ₆	CF ₃ SO ₄	C ₈ H ₁₇ SO ₄	HCO ₂	CCO ₂	C ₂ C O ₂	C ₃ C O ₂	IC ₃ CO ₂	C ₄ C O ₂	HCO ₃	Bit	DH Cit	DH phosphate	Sal	Doc	Sac	Tiocy anate	3-OH-2-naphthoate	2-(hexylthio)acetate	Me SO ₄	Theob	Theo p	Xan	Ur	NO ₃	Ref.		
[C ₁₂ mim][Cl]	-1,15	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Mano, 2020, 96h	
[12CIC ₂ mim][Cl]	2,66	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	xxx	
[12CIC ₂ mim][Cl]	2,66	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Preti, 2009, 72h	
[12CIC ₂ mim][Cl]	2,62	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Preti, 2009, 72h	
[12CIC ₂ mim][Cl]	2,62	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	xxx	
[12CIC ₂ mim][NTf ₂]	2,22	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Cho	
[1Clmim][NTf ₂]	2,22	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	xxx	
[12CIC ₂ mim][NTf ₂]	2,22	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Preti, 2009, 72h	
[13CIC ₃ mim][Cl]	2,23	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Cho	
[13OHC ₃ mim][Cl]	2,23	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Preti, 2009, 72h	
[12OHC ₂ mim][NTf ₂]	2,14	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Cho	
[12OHC ₂ mim][NTf ₂]	2,14	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Preti, 2009, 72h	
[32OHC ₂ mim][NTf ₂]	2,14	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0		
[32OHC ₂ mim][Cl]	2,23	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	
[TMSimim][Br]	1,63	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Preti, 2009, 72h	

ANEXO III. DATOS DE TOXICIDAD PARA P. SUBCAPITATA Y DESCRIPTORES DE LÍQUIDOS IÓNICOS

Abrev.	LC50 (µM)	Br	Cl	I	NTf ₂	BF ₄	PF ₆	SbF ₆	CF ₃ SO ₄	C ₈ H ₁₇ SO ₄	HCO ₂	CCO ₂	C ₂ C O ₂	C ₃ C O ₂	IC ₃ CO ₂	C ₄ C O ₂	HCO ₃	Bit	DH Cit	DH phosphate	Sal	Doc	Sac	Tiocy anate	3-OH-2-naphthoate	2-(hexylthio)acetate	Me SO ₄	Theob	Theo p	Xan	Ur	NO ₃	Ref.	
[ImidC ₂ Phe][Br]	2,35	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Kusuma, 2021, 72h
[ImidC ₄ Phe][Br]	0,40	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Kusuma, 2021, 72h
[ImidC ₆ Phe][Br]	-0,44	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Kusuma, 2021, 72h
[ImidC ₈ Phe][Br]	-0,82	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Kusuma, 2021, 72h
[ImidC ₁₀ Phe][Br]	-0,70	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Kusuma, 2021, 72h
[ImidC ₁₂ Phe][Br]	-0,74	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Kusuma, 2021, 72h
[ImidC ₁₄ Phe][Br]	-1,10	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Kusuma, 2021, 72h
[ImidC ₁₆ Phe][Br]	-0,77	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Kusuma, 2021, 72h
[C ₃ Py][Br]	4,7	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	xxx
[C ₄ Py][NTf ₂]	1,23	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Preti, 2009, 72h
[C ₄ Py][Cl]	2,23	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Peric, 2013, 72h
[C ₃ -3mPip][NTf ₂]	1,52	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Soia, 2012, 96h
[C ₃ -3mPip][NTf ₂]	1,52	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Ventura, 2013, 96h

ANEXO III. DATOS DE TOXICIDAD PARA P. SUBCAPITATA Y DESCRIPTORES DE LÍQUIDOS IÓNICOS

Abrev.	LC50 (µM)	Br	Cl	I	NTf ₂	BF ₄	PF ₆	SbF ₆	CF ₃ SO ₄	C ₈ H ₁₇ SO ₄	HCO ₂	CCO ₂	C ₂ C O ₂	C ₃ C O ₂	IC ₃ CO ₂	C ₄ C O ₂	HCO ₃	Bit	DH Cit	DH phosphate	Sal	Doc	Sac	Tiocy anate	3-OH-2-naphthoate	2-(hexylthio) acetate	Me SO ₄	Theob	Theo p	Xan	Ur	NO ₃	Ref.	
[C ₃ -3mPy][NTf ₂]	0,86	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Soia, 2012, 96h
[C ₃ -3mPy][NTf ₂]	0,86	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Ventura, 2013, 96h
[Py][CF ₃ SO ₃]	2,88	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Koutinas 2019, 72h
[Py][CF ₃ SO ₃]	2,46	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Koutinas 2019, 96h
[C ₃ -3mPy][Br]	4,73	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Pham, 2008, 10min
[C ₄ -3mPy][Br]	4,03	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Pham, 2008, 10min
[C ₄ -3mPy][Br]	3,46	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Cho, 2008, 48h
[C ₄ -3mPy][Br]	3,70	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Cho, 2008, 72h
[C ₄ -3mPy][Br]	3,69	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Cho, 2008, 96h
[C ₆ -3mPy][Br]	3,17	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Pham, 2008, 10min
[C ₆ -3mPy][Cl]	2,84	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Preli, 2009, 72h
[C ₈ -1mPy][Br]	1,77	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Costa, 2017
[C ₈ -3mPy][Br]	1,74	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Pham, 2008, 10min
[C ₈ -4mPy][Br]	1,43	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Costa, 2017

ANEXO III. DATOS DE TOXICIDAD PARA P. SUBCAPITATA Y DESCRIPTORES DE LÍQUIDOS IÓNICOS

Abrev.	LC50 (µM)	Br	Cl	I	NTf ₂	BF ₄	PF ₆	SbF ₆	CF ₃ SO ₄	C ₈ H ₁₇ SO ₄	HCO ₂	CCO ₂	C ₂ C O ₂	C ₃ C O ₂	IC ₃ CO ₂	C ₄ C O ₂	HCO ₃	Bit	DH Cit	DH phosphate	Sal	Doc	Sac	Tiocy anate	3-OH-2-naphthoate	2-(hexylthio)acetate	Me SO ₄	Theob	Theo p	Xan	Ur	NO ₃	Ref.	
[PyC ₂ Phe][Br]	3,03	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Kusuma, 2021, 72h
[PyC ₄ Phe][Br]	1,75	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Kusuma, 2021, 72h
[PyC ₆ Phe][Br]	0,62	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Kusuma, 2021, 72h
[PyC ₈ Phe][Br]	0,21	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Kusuma, 2021, 72h
[PyC ₁₀ Phe][Br]	-0,15	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Kusuma, 2021, 72h
[PyC ₁₂ Phe][Br]	-0,74	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Kusuma, 2021, 72h
[PyC ₁₄ Phe][Br]	-0,89	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Kusuma, 2021, 72h
[PyC ₁₆ Phe][Br]	-0,72	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Kusuma, 2021, 72h
[N ₀₀₀ -2OH][HCO ₂]	4,36	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Peric, 2013, 72h
[N ₀₀ 2OH-2OH][HCO ₂]	3,81	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Peric, 2013, 72h
[N ₀₀ 2OH-2OH][CCO ₂]	3,72	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Peric, 2013, 72h
[N ₀₀ 2OH-2OH][C ₂ CO ₂]	4,16	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Peric, 2013, 72h
[N ₀₀ 2OH-2OH][C ₃ CO ₂]	3,18	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Peric, 2013, 72h

ANEXO III. DATOS DE TOXICIDAD PARA P. SUBCAPITATA Y DESCRIPTORES DE LÍQUIDOS IÓNICOS

Abrev.	LC50 (µM)	Br	Cl	I	NTf ₂	BF ₄	PF ₆	SbF ₆	CF ₃ SO ₄	C ₈ H ₁₇ SO ₄	HCO ₂	CCO ₂	C ₂ C O ₂	C ₃ C O ₂	IC ₃ CO ₂	C ₄ C O ₂	HCO ₃	Bit	DH Cit	DH phosphate	Sal	Doc	Sac	Tiocy anate	3-OH-2-naphthoate	2-(hexylthio)acetate	Me SO ₄	Theob	Theop	Xan	Ur	NO ₃	Ref.		
[N ₀₀ 2OH-2OH] [C ₃ CO ₂]	3,82	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Peric, 2013, 72h	
[N ₀₀ 2OH-2OH] [C ₄ CO ₂]	3,44	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Peric, 2013, 72h	
[N ₀ 2OH2O H-2OH] [C ₃ CO ₂]	3,73	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Peric, 2013, 72h	
[N ₀ 2OH2O H-2OH] [C ₄ CO ₂]	3,48	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Peric, 2013, 72h	
[N ₀₀₀ -2OH] [C ₃ CO ₂]	2,85	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Peric, 2013, 72h	
[N ₄₄₄₄] [Br]	3,67	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Errazquin 2021	
[N ₄₄₄₄] [Br]	2,97	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Cho, 2008, 48h	
[N ₄₄₄₄] [Br]	3,68	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Cho, 2008, 72h	
[N ₄₄₄₄] [Br]	3,35	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Cho, 2008, 96h	
[N ₄₄₄₄] [I]	1,28	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Koutinas 2019, 72h
[N ₄₄₄₄] [I]	1,13	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Koutinas 2019, 96h
[N ₄₄₄₄] [Theob]	0,94	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	Carreira, 2021, 96h
[N ₄₄₄₄] [Theop]	0,78	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	Carreira, 2021, 96h
[N ₄₄₄₄] [Xan]	0,35	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	Carreira, 2021,

ANEXO III. DATOS DE TOXICIDAD PARA P. SUBCAPITATA Y DESCRIPTORES DE LÍQUIDOS IÓNICOS

Abrev.	LC50 (µM)	Br	Cl	I	NTf ₂	BF ₄	PF ₆	SbF ₆	CF ₃ SO ₄	C ₈ H ₁₇ SO ₄	HCO ₂	CCO ₂	C ₂ C O ₂	C ₃ C O ₂	IC ₃ CO ₂	C ₄ C O ₂	HCO ₃	Bit	DH Cit	DH phosphate	Sal	Doc	Sac	Tiocy anate	3-OH-2-naphthoate	2-(hexylthio)acetate	Me SO ₄	Theob	Theo p	Xan	Ur	NO ₃	Ref.			
																																		96h		
[N444q][Ur]	0,82	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	Carreira, 2021, 96h		
[N444q][Cl]	0,97	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Carreira, 2021, 96h		
[N ₁₁ 2OHPh][Cl]	2,95	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Santos, 2015, 72 h		
[Chol][Cl]	2,72	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Mano, 2020, 96 h		
[Chol][Cl]	2,70	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Santos, 2015, 72 h		
[Chol][1COO]	2,88	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Santos, 2015, 72 h	
[Chol][2COO]	2,43	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Santos, 2015, 72 h	
[Chol][3COO]	2,64	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Santos, 2015, 72 h	
[Chol][Bic]	3,15	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Santos, 2015, 72 h	
[Chol][Bit]	2,02	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Santos, 2015, 72 h	
[Chol][DHCit]	2,47	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Santos, 2015, 72 h	
[Chol][DHCit]	2,47	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Mano, 2020, 96 h	
[Chol][DHphost]	2,81	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Santos, 2015,

ANEXO III. DATOS DE TOXICIDAD PARA P. SUBCAPITATA Y DESCRIPTORES DE LÍQUIDOS IÓNICOS

Abrev.	LC50 (µM)	Br	Cl	I	NTf ₂	BF ₄	PF ₆	SbF ₆	CF ₃ SO ₄	C ₈ H ₁₇ SO ₄	HCO ₂	CCO ₂	C ₂ C O ₂	C ₃ C O ₂	IC ₃ CO ₂	C ₄ C O ₂	HCO ₃	Bit	DH Cit	DH phosphate	Sal	Doc	Sac	Tiocy anate	3-OH-2-naphthoate	2-(hexylthio)acetate	Me SO ₄	Theob	Theo p	Xan	Ur	NO ₃	Ref.	
																																		72 h
[Chol][Sal]	3,10	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Santos, 2015, 72 h
[coliC ₂ Phe][Br]	3,38	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Kusuma, 2021, 72h
[coliC ₃ Phe][Br]	1,94	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Kusuma, 2021, 72h
[coliC ₄ Phe][Br]	0,64	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Kusuma, 2021, 72h
[coliC ₅ Phe][Br]	-0,04	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Kusuma, 2021, 72h
[coliC ₁₀ Phe][Br]	-0,37	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Kusuma, 2021, 72h
[coliC ₁₂ Phe][Br]	-0,72	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Kusuma, 2021, 72h
[coliC ₁₄ Phe][Br]	-0,85	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Kusuma, 2021, 72h
[coliC ₁₆ Phe][Br]	-0,74	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Kusuma, 2021, 72h
[N ₁₈₈₈][C ₆ SAC]	-1,04	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	Pretzer, 2017, 72h
[N ₁₈₈₈][Cl]	-0,76	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Pretzer, 2017, 72h
[Bu3NC2][Br]	2,60	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Errazquin, 2021, 72h

ANEXO III. DATOS DE TOXICIDAD PARA P. SUBCAPITATA Y DESCRIPTORES DE LÍQUIDOS IÓNICOS

Abrev.	LC50 (µM)	Br	Cl	I	NTf ₂	BF ₄	PF ₆	SbF ₆	CF ₃ SO ₄	C ₈ H ₁₇ SO ₄	HCO ₂	CCO ₂	C ₂ C O ₂	C ₃ C O ₂	IC ₃ CO ₂	C ₄ C O ₂	HCO ₃	Bit	DH Cit	DH phosphate	Sal	Doc	Sac	Tiocy anate	3-OH-2-naphthoate	2-(hexylthio)acetate	Me SO ₄	Theob	Theo p	Xan	Ur	NO ₃	Ref.		
[Bu3NC4][Br]	2,37	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Errazquin, 2021, 72h	
[Bu3PC2][Br]	2,34	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Errazquin, 2021, 72h	
[Bu3PC4][Br]	1,94	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Errazquin, 2021, 72h	
AMMOENG 130 [Cl]	0,14	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	XXX	
[P1888][HNA]	-0,30	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	Philip, 2020, 72h	
[C4mPyrr][Br]	3,67	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Cho, 2008, 48h	
[C4mPyrr][Br]	3,97	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Cho, 2008, 72h	
[C4mPyrr][Br]	4,09	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Cho, 2008, 96h	
11[C4mPyrr][Br]	3,97	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Costa, 2017	
[C3mPyrr][NTf2]	1,65	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Ventura, 2013, 92h
[C3mPyrr][NTf2]	1,65	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Soia, 2012, 96h
[C6mPyrr][Cl]	2,73	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Cho
[C8mPyrr][Br]	1,68	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Cho
[P4444][Br]	3,00	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Errazquin 2021
[P4444][Br]	1,90	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Cho, 2008,

ANEXO III. DATOS DE TOXICIDAD PARA P. SUBCAPITATA Y DESCRIPTORES DE LÍQUIDOS IÓNICOS

Abrev.	LC50 (µM)	Br	Cl	I	NTf ₂	BF ₄	PF ₆	SbF ₆	CF ₃ SO ₄	C ₈ H ₁₇ SO ₄	HCO ₂	CCO ₂	C ₂ C O ₂	C ₃ C O ₂	IC ₃ CO ₂	C ₄ C O ₂	HCO ₃	Bit	DH Cit	DH phosphate	Sal	Doc	Sac	Tiocy anate	3-OH-2-naphthoate	2-(hexylthio)acetate	Me SO ₄	Theob	Theo p	Xan	Ur	NO ₃	Ref.		
																																		48h	
[P ₄₄₄₄][Br]	2,19	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Cho, 2008, 72h	
[P ₄₄₄₄][Br]	2,35	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Cho, 2008, 96h	
[P ₁₈₈₈][HNA]	-0,17	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	Philip, 2020, 72h	
[P ₆₆₆₁₄][HNA]	-0,15	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	Philip, 2020, 72h	
[P ₁₈₈₈][C ₆ SAC]	-1,15	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	Pretzer, 2017, 72h	
[P ₆₆₆₁₄][Cl]	-0,72	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Pretzer, 2017, 72h	
[Cho][PF ₆]	2,18	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Errazquin 2021	
[Cho][PF ₆]	2,18	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Preti, 2009, 72 h	
[S ₂₂₂][Br]	2,34	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Errazquin 2021	
[S ₂₂₂][Br]	2,34	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Preti, 2009, 72 h	
[ETHT][Br]	2,48	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Preti, 2009, 72 h	
[Bu ₃ NC ₄][Sac]	1,42	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Parajo, 2019, 72h
[Bu ₃ NC ₂][Sac]	1,02	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Parajo, 2019, 72h

ANEXO III. DATOS DE TOXICIDAD PARA P. SUBCAPITATA Y DESCRIPTORES DE LÍQUIDOS IÓNICOS

Abrev.	LC50 (µM)	Br	Cl	I	NTf ₂	BF ₄	PF ₆	SbF ₆	CF ₃ SO ₄	C ₈ H ₁₇ SO ₄	HCO ₂	CCO ₂	C ₂ C O ₂	C ₃ C O ₂	IC ₃ CO ₂	C ₄ C O ₂	HCO ₃	Bit	DH Cit	DH phosphate	Sal	Doc	Sac	Tiocy anate	3-OH-2-naphthoate	2-(hexylthio)acetate	Me SO ₄	Theob	Theo p	Xan	Ur	NO ₃	Ref.			
[Me ₃ NC ₂ O C ₁₂][doc]	-0,09	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Parajo, 2019, 72h	
[Me ₃ NC ₂ O C ₁₂][SCN]	-0,11	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Parajo, 2019, 72h
[Me ₃ NC ₂ O C ₁₄][doc]	0,00	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Parajo, 2019, 72h
[Me ₃ NC ₂ O C ₁₄][SCN]	0,16	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Parajo, 2019, 72h
[Bu ₃ pC ₂][Sac]	-0,04	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Parajo, 2019, 72h
[Bu ₃ pC ₄][Sac]	0,42	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Parajo, 2019, 72h

ANEXO III. DATOS DE TOXICIDAD PARA P. SUBCAPITATA Y DESCRIPTORES DE LÍQUIDOS IÓNICOS

Abrev.	LC50 μ M	Im	Py	N	Pyrr	P	S	QUINO	Pip	Ref.
[C ₁ mim][Cl]	2,84	1	0	0	0	0	0	0	0	Cho
[C ₂ mim][Cl]	3,26	1	0	0	0	0	0	0	0	Mano, 2020, 96h
[C ₃ mim][NTf ₂]	1,55	1	0	0	0	0	0	0	0	Ventura, 2013, 92h
[C ₃ mim][NTf ₂]	1,55	1	0	0	0	0	0	0	0	Ventura, 2010, 96h
[C ₄ mim][PF ₆]	2,20	1	0	0	0	0	0	0	0	
[C ₄ mim][CF ₃ SO ₄]	3,34	1	0	0	0	0	0	0	0	Cho, 2009, 96h
[C ₄ mim][C ₈ H ₁₇ SO ₄]	3,35	1	0	0	0	0	0	0	0	Cho, 2009, 96h
[C ₄ mim][PF ₆]	3,12	1	0	0	0	0	0	0	0	Cho, 2009, 96h
[C ₄ mim][Cl]	2,34	1	0	0	0	0	0	0	0	xxx
[C ₄ mim][Cl]	1,90	1	0	0	0	0	0	0	0	Petric, 2013, 72h
[C ₄ mim][Cl]	3,46	1	0	0	0	0	0	0	0	Cho, 2009, 96h
[C ₄ mim][Cl]	3,08	1	0	0	0	0	0	0	0	Koutinas, 2019, 72h
[C ₄ mim][Cl]	2,90	1	0	0	0	0	0	0	0	Koutinas 2019, 72h
[C ₄ mim][MeSO ₄]	2,61	1	0	0	0	0	0	0	0	Koutinas 2019, 72h
[C ₄ mim][MeSO ₄]	2,42	1	0	0	0	0	0	0	0	Koutinas, 2019, 96h
[C ₃ mim][Br]	3,46	1	0	0	0	0	0	0	0	Cho, 2007, 48h
[C ₃ mim][Br]	3,29	1	0	0	0	0	0	0	0	Cho, 2007, 72h
[C ₃ mim][Br]	3,14	1	0	0	0	0	0	0	0	Cho, 2007, 96h
[C ₄ mim][Br]	3,46	1	0	0	0	0	0	0	0	Cho, 2007, 48h
[C ₄ mim][Br]	3,36	1	0	0	0	0	0	0	0	Cho, 2007, 72h
[C ₄ mim][Br]	3,02	1	0	0	0	0	0	0	0	Cho, 2007, 96h
[C ₄ mim][Br]	3,46	1	0	0	0	0	0	0	0	Cho, 2008, 48h
[C ₄ mim][Br]	3,36	1	0	0	0	0	0	0	0	Cho, 2008, 72h

ANEXO III. DATOS DE TOXICIDAD PARA *P. SUBCAPITATA* Y DESCRIPTORES DE LÍQUIDOS IÓNICOS

Abrev.	LC50 μ M	Im	Py	N	Pyrr	P	S	QUINO	Pip	Ref.
[C4mim] [Br]	3,02	1	0	0	0	0	0	0	0	Cho, 2008, 96h
[C4mim] [Br]	3,33	1	0	0	0	0	0	0	0	Cho, 2009, 96h
[C4mim] [Br]	4,38	1	0	0	0	0	0	0	0	Pham, 2008, 10min
[C4mim] [NTf ₂]	1,80	1	0	0	0	0	0	0	0	Errazquin 2021,
[C4mim] [NTf ₂]	1,80	1	0	0	0	0	0	0	0	Preti, 2009, 72h
[C4mim] [BF4]	3,57	1	0	0	0	0	0	0	0	Cho
[C4mim] [BF4]	3,40	1	0	0	0	0	0	0	0	Cho, 2009, 96h
[C4mim] [Sb ₆]	2,13	1	0	0	0	0	0	0	0	Cho
[C4mim] [Sb ₆]	2,13	1	0	0	0	0	0	0	0	Cho, 2009, 96h
[C6mim] [Br]	2,57	1	0	0	0	0	0	0	0	Cho, 2007, 48h
[C6mim] [Br]	2,54	1	0	0	0	0	0	0	0	Cho, 2007, 72h
[C6mim] [Br]	2,46	1	0	0	0	0	0	0	0	Cho, 2007, 96h
[C6mim] [Br]	4,28	1	0	0	0	0	0	0	0	Pham, 2008, 10min
[C6mim] [Br]	1,65	1	0	0	0	0	0	0	0	Cho, 2007, 48h
[C6mim] [Br]	1,63	1	0	0	0	0	0	0	0	Cho, 2007, 72h
[C6mim] [Br]	1,57	1	0	0	0	0	0	0	0	Cho, 2007, 96h
[C8mim] [Br]	3,54	1	0	0	0	0	0	0	0	Pham, 2008, 10min
[C8mim] [Cl]	0,70	1	0	0	0	0	0	0	0	Peric, 2013, 72h
[C ₁₂ mim] [Cl]	-1,15	1	0	0	0	0	0	0	0	Mano, 2020, 96h
[12ClC2im][Cl]	2,66	1	0	0	0	0	0	0	0	xxx
[12ClC2im][Cl]	2,66	1	0	0	0	0	0	0	0	Preti, 2009, 72h
[12ClC ₂ im][Cl]	2,62	1	0	0	0	0	0	0	0	Preti, 2009, 72h

ANEXO III. DATOS DE TOXICIDAD PARA *P. SUBCAPITATA* Y DESCRIPTORES DE LÍQUIDOS IÓNICOS

Abrev.	LC50 μ M	Im	Py	N	Pyrr	P	S	QUINO	Pip	Ref.
[12CIC ₂ mim][Cl]	2,62	1	0	0	0	0	0	0	0	xxx
[12CIC ₂ mim] [NTf ₂]	2,22	1	0	0	0	0	0	0	0	Cho
[1Clmim][NTf ₂]	2,22	1	0	0	0	0	0	0	0	xxx
[12CIC ₂ mim] [NTf ₂]	2,22	1	0	0	0	0	0	0	0	Preti, 2009, 72h
[13CIC ₃ mim] [Cl]	2,23	1	0	0	0	0	0	0	0	Cho
[13OHC ₃ mim] [Cl]	2,23	1	0	0	0	0	0	0	0	Preti, 2009, 72h
12[OHC ₂ mim] [NTf ₂]	2,14	1	0	0	0	0	0	0	0	Cho
12[OHC ₂ mim] [NTf ₂]	2,14	1	0	0	0	0	0	0	0	Preti, 2009, 72h
[32OHC ₂ mim] [NTf ₂]	2,14	1	0	0	0	0	0	0	0	
[32OHC ₂ mim][Cl]	2,23	1	0	0	0	0	0	0	0	
[TMSimim][Br]	1,63	1	0	0	0	0	0	0	0	Preti, 2009, 72h
[ImidC ₂ Phe][Br]	2,35	1	0	0	0	0	0	0	0	Kusuma, 2021, 72h
[ImidC ₄ Phe][Br]	0,40	1	0	0	0	0	0	0	0	Kusuma, 2021, 72h
[ImidC ₆ Phe][Br]	-0,44	1	0	0	0	0	0	0	0	Kusuma, 2021, 72h
[ImidC ₈ Phe][Br]	-0,82	1	0	0	0	0	0	0	0	Kusuma, 2021, 72h
[ImidC ₁₀ Phe][Br]	-0,70	1	0	0	0	0	0	0	0	Kusuma, 2021, 72h
[ImidC ₁₂ Phe][Br]	-0,74	1	0	0	0	0	0	0	0	Kusuma, 2021, 72h
[ImidC ₁₄ Phe][Br]	-1,10	1	0	0	0	0	0	0	0	Kusuma, 2021, 72h
[ImidC ₁₆ Phe][Br]	-0,77	1	0	0	0	0	0	0	0	Kusuma, 2021, 72h
[C ₃ Py][Br]	4,7	0	1	0	0	0	0	0	0	xxx
[C ₄ Py] [NTf ₂]	1,23	0	1	0	0	0	0	0	0	Preti, 2009, 72h
[C ₄ Py] [Cl]	2,23	0	1	0	0	0	0	0	0	Peric, 2013, 72h
[C ₃ -3mPip] [NTf ₂]	1,52	0	0	0	0	0	0	0	1	Soia, 2012, 96h
[C ₃ -3mPip] [NTf ₂]	1,52	0	0	0	0	0	0	0	1	Ventura, 2013, 96h

ANEXO III. DATOS DE TOXICIDAD PARA P. SUBCAPITATA Y DESCRIPTORES DE LÍQUIDOS IÓNICOS

Abrev.	LC50 µM	Im	Py	N	Pyrr	P	S	QUINO	Pip	Ref.
[C ₃ -3mPy] [NTf ₂]	0,86	0	1	0	0	0	0	0	0	Soia, 2012, 96h
[C ₃ -3mPy] [NTf ₂]	0,86	0	1	0	0	0	0	0	0	Ventura, 2013, 96h
[Py] [CF ₃ SO ₃]	2,88	0	1	0	0	0	0	0	0	Koutinas 2019, 72h
[Py] [CF ₃ SO ₃]	2,46	0	1	0	0	0	0	0	0	Koutinas 2019, 96h
[C ₃ -3mPy] [Br]	4,73	0	1	0	0	0	0	0	0	Pham, 2008, 10min
[C ₄ -3mPy] [Br]	4,03	0	1	0	0	0	0	0	0	Pham, 2008, 10min
[C ₄ -3mPy][Br]	3,46	0	1	0	0	0	0	0	0	Cho, 2008, 48h
[C ₄ -3mPy][Br]	3,70	0	1	0	0	0	0	0	0	Cho, 2008, 72h
[C ₄ -3mPy][Br]	3,69	0	1	0	0	0	0	0	0	Cho, 2008, 96h
[C ₆ -3mPy] [Br]	3,17	0	1	0	0	0	0	0	0	Pham, 2008, 10min
[C ₆ -3mPy] [Cl]	2,84	0	1	0	0	0	0	0	0	Preti, 2009, 72h
[C ₈ -1mPy] [Br]	1,77	0	1	0	0	0	0	0	0	Costa, 2017
[C ₈ -3mPy] [Br]	1,74	0	1	0	0	0	0	0	0	Pham, 2008, 10min
[C ₈ -4mPy] [Br]	1,43	0	1	0	0	0	0	0	0	Costa, 2017
[PyC ₂ Phe][Br]	3,03	0	1	0	0	0	0	0	0	Kusuma, 2021, 72h
[PyC ₄ Phe] [Br]	1,75	0	1	0	0	0	0	0	0	Kusuma, 2021, 72h
[PyC ₆ Phe] [Br]	0,62	0	1	0	0	0	0	0	0	Kusuma, 2021, 72h
[PyC ₈ Phe] [Br]	0,21	0	1	0	0	0	0	0	0	Kusuma, 2021, 72h
[PyC ₁₀ Phe] [Br]	-0,15	0	1	0	0	0	0	0	0	Kusuma, 2021, 72h
[PyC ₁₂ Phe] [Br]	-0,74	0	1	0	0	0	0	0	0	Kusuma, 2021, 72h

ANEXO III. DATOS DE TOXICIDAD PARA P. SUBCAPITATA Y DESCRIPTORES DE LÍQUIDOS IÓNICOS

Abrev.	LC50 µM	Im	Py	N	Pyrr	P	S	QUINO	Pip	Ref.
[PyC ₁₄ Phe][Br]	-0,89	0	1	0	0	0	0	0	0	Kusuma, 2021, 72h
[PyC ₁₆ Phe][Br]	-0,72	0	1	0	0	0	0	0	0	Kusuma, 2021, 72h
[N ₀₀₀ -2OH] [HCO ₂]	4,36	0	0	1	0	0	0	0	0	Peric, 2013, 72h
[N ₀₀ 2OH-2OH] [HCO ₂]	3,81	0	0	1	0	0	0	0	0	Peric, 2013, 72h
[N ₀₀ 2OH-2OH] [CCO ₂]	3,72	0	0	1	0	0	0	0	0	Peric, 2013, 72h
[N ₀₀ 2OH-2OH] [C ₂ CO ₂]	4,16	0	0	1	0	0	0	0	0	Peric, 2013, 72h
[N ₀₀ 2OH-2OH] [C ₃ CO ₂]	3,18	0	0	1	0	0	0	0	0	Peric, 2013, 72h
[N ₀₀ 2OH-2OH] [iC ₃ CO ₂]	3,82	0	0	1	0	0	0	0	0	Peric, 2013, 72h
[N ₀₀ 2OH-2OH] [C ₄ CO ₂]	3,44	0	0	1	0	0	0	0	0	Peric, 2013, 72h
[N ₀ 2OH2OH-2OH] [C ₃ CO ₂]	3,73	0	0	1	0	0	0	0	0	Peric, 2013, 72h
[N ₀₂ OH2OH-2OH] [C ₄ CO ₂]	3,48	0	0	1	0	0	0	0	0	Peric, 2013, 72h
[N ₀₀₀ -2OH] [C ₃ CO ₂]	2,85	0	0	1	0	0	0	0	0	Peric, 2013, 72h
[N ₄₄₄₄] [Br]	3,67	0	0	1	0	0	0	0	0	Errazquin 2021
[N ₄₄₄₄] [Br]	2,97	0	0	1	0	0	0	0	0	Cho, 2008, 48h
[N ₄₄₄₄] [Br]	3,68	0	0	1	0	0	0	0	0	Cho, 2008, 72h
[N ₄₄₄₄] [Br]	3,35	0	0	1	0	0	0	0	0	Cho, 2008, 96h
[N ₄₄₄₄][I]	1,28	0	0	1	0	0	0	0	0	Koutinas, 2019, 72h
[N ₄₄₄₄][I]	1,13	0	0	1	0	0	0	0	0	Koutinas 2019, 96h
[N ₄₄₄₄] [Theob]	0,94	0	0	1	0	0	0	0	0	Carreira, 2021, 96h
[N ₄₄₄₄] [Theop]	0,78	0	0	1	0	0	0	0	0	Carreira, 2021, 96h
[N ₄₄₄₄] [Xan]	0,35	0	0	1	0	0	0	0	0	Carreira, 2021,

ANEXO III. DATOS DE TOXICIDAD PARA P. SUBCAPITATA Y DESCRIPTORES DE LÍQUIDOS IÓNICOS

Abrev.	LC50 µM	Im	Py	N	Pyrr	P	S	QUINO	Pip	Ref.
										96h
[N ₄₄₄₄][Ur]	0,82	0	0	1	0	0	0	0	0	Carreira, 2021, 96h
[N ₄₄₄₄][Cl]	0,97	0	0	1	0	0	0	0	0	Carreira, 2021, 96h
[N ₁₁ 2OHPh][Cl]	2,95	0	0	1	0	0	0	0	0	Santos, 2015, 72 h
[Chol][Cl]	2,72	0	0	1	0	0	0	0	0	Mano, 2020, 96 h
[Chol][Cl]	2,70	0	0	1	0	0	0	0	0	Santos, 2015, 72 h
[Chol][1COO]	2,88	0	0	1	0	0	0	0	0	Santos, 2015, 72 h
[Chol][2COO]	2,43	0	0	1	0	0	0	0	0	Santos, 2015, 72 h
[Chol][3COO]	2,64	0	0	1	0	0	0	0	0	Santos, 2015, 72 h
[Chol][Bic]	3,15	0	0	1	0	0	0	0	0	Santos, 2015, 72 h
[Chol][Bit]	2,02	0	0	1	0	0	0	0	0	Santos, 2015, 72 h
[Chol][DHCit]	2,47	0	0	1	0	0	0	0	0	Santos, 2015, 72 h
[Chol][DHCit]	2,47	0	0	1	0	0	0	0	0	Mano, 2020, 96 h
[Chol][DHphost]	2,81	0	0	1	0	0	0	0	0	Santos, 2015, 72 h
[Chol][Sal]	3,10	0	0	1	0	0	0	0	0	Santos, 2015, 72 h
[coliC ₂ Phe][Br]	3,38	0	0	1	0	0	0	0	0	Kusuma, 2021, 72h
[coliC ₄ Phe][Br]	1,94	0	0	1	0	0	0	0	0	Kusuma, 2021, 72h
[coliC ₆ Phe][Br]	0,64	0	0	1	0	0	0	0	0	Kusuma, 2021, 72h
[coliC ₈ Phe][Br]	-0,04	0	0	1	0	0	0	0	0	Kusuma, 2021, 72h
[coliC ₁₀ Phe][Br]	-0,37	0	0	1	0	0	0	0	0	Kusuma, 2021, 72h
[coliC ₁₂ Phe][Br]	-0,72	0	0	1	0	0	0	0	0	Kusuma, 2021, 72h
[coliC ₁₄ Phe][Br]	-0,85	0	0	1	0	0	0	0	0	Kusuma, 2021, 72h

ANEXO III. DATOS DE TOXICIDAD PARA P. SUBCAPITATA Y DESCRIPTORES DE LÍQUIDOS IÓNICOS

Abrev.	LC50 µM	Im	Py	N	Pyrr	P	S	QUINO	Pip	Ref.
[coliC16Phe][Br]	-0,74	0	0	1	0	0	0	0	0	Kusuma, 2021, 72h
[N1888] [C6SAC]	-1,04	0	0	1	0	0	0	0	0	Pretzer, 2017, 72h
[N1888] [Cl]	-0,76	0	0	1	0	0	0	0	0	Pretzer, 2017, 72h
[Bu3NC2] [Br]	2,60	0	0	1	0	0	0	0	0	Errazquin, 2021, 72h
[Bu3NC4][Br]	2,37	0	0	1	0	0	0	0	0	Errazquin, 2021, 72h
[Bu3PC2] [Br]	2,34	0	0	0	0	1	0	0	0	Errazquin, 2021, 72h
[Bu3PC4] [Br]	1,94	0	0	0	0	1	0	0	0	Errazquin, 2021, 72h
AMMOENG 130 [Cl]	0,14	0	0	1	0	0	0	0	0	XXX
[P1888][HNA]	-0,30	0	0	1	0	0	0	0	0	Philip, 2020, 72h
[C4mPyrr] [Br]	3,67	0	0	0	1	0	0	0	0	Cho, 2008, 48h
[C4mPyrr] [Br]	3,97	0	0	0	1	0	0	0	0	Cho, 2008, 72h
[C4mPyrr] [Br]	4,09	0	0	0	1	0	0	0	0	Cho, 2008, 96h
11[C4mPyrr][Br]	3,97	0	0	0	1	0	0	0	0	Costa, 2017
[C3mPyrr] [NTf2]	1,65	0	0	0	1	0	0	0	0	Ventura, 2013, 92h
[C3mPyrr] [NTf2]	1,65	0	0	0	1	0	0	0	0	Soia, 2012, 96h
[C6mPyrr] [Cl]	2,73	0	0	0	1	0	0	0	0	Cho
[C8mPyrr] [Br]	1,68	0	0	0	1	0	0	0	0	Cho
[P4444][Br]	3,00	0	0	0	0	1	0	0	0	Errazquin 2021
[P4444] [Br]	1,90	0	0	0	0	1	0	0	0	Cho, 2008, 48h
[P4444] [Br]	2,19	0	0	0	0	1	0	0	0	Cho, 2008, 72h
[P4444] [Br]	2,35	0	0	0	0	1	0	0	0	Cho, 2008, 96h

ANEXO III. DATOS DE TOXICIDAD PARA P. SUBCAPITATA Y DESCRIPTORES DE LÍQUIDOS IÓNICOS

Abrev.	LC50 μ M	Im	Py	N	Pyrr	P	S	QUINO	Pip	Ref.
[P ₁₈₈₈] [HNA]	-0,17	0	0	0	0	1	0	0	0	Philip, 2020, 72h
[P ₆₆₆₁₄] [HNA]	-0,15	0	0	0	0	1	0	0	0	Philip, 2020, 72h
[P ₁₈₈₈] [C ₆ SAC]	-1,15	0	0	0	0	1	0	0	0	Pretzer, 2017, 72h
[P ₆₆₆₁₄][Cl]	-0,72	0	0	0	0	1	0	0	0	Pretzer, 2017, 72h
[Chol] [PF ₆]	2,18	0	0	0	0	0	0	1	0	Errazquin 2021
[Chol] [PF ₆]	2,18	0	0	0	0	0	0	1	0	Preti, 2009, 72 h
[S ₂₂₂][Br]	2,34	0	0	0	0	0	1	0	0	Errazquin 2021
[S ₂₂₂][Br]	2,34	0	0	0	0	0	1	0	0	Preti, 2009, 72 h
[ETHT][Br]	2,48	0	0	0	0	0	1	0	0	Preti, 2009, 72 h
[Bu ₃ NC ₄] [Sac]	1,42	0	0	1	0	0	0	0	0	Parajo, 2019, 72h
[Bu ₃ NC ₂] [Sac]	1,02	0	0	1	0	0	0	0	0	Parajo, 2019, 72h
[Me ₃ NC ₂ OC ₁₂][doc]	-0,09	0	0	1	0	0	0	0	0	Parajo, 2019, 72h
[Me ₃ NC ₂ OC ₁₂][SCN]	-0,11	0	0	1	0	0	0	0	0	Parajo, 2019, 72h
[Me ₃ NC ₂ OC ₁₄][doc]	0,00	0	0	1	0	0	0	0	0	Parajo, 2019, 72h
[Me ₃ NC ₂ OC ₁₄][SCN]	0,16	0	0	1	0	0	0	0	0	Parajo, 2019, 72h
[Bu ₃ pC ₂] [Sac]	-0,04	0	0	0	0	1	0	0	0	Parajo, 2019, 72h
[Bu ₃ pC ₄] [Sac]	0,42	0	0	0	0	1	0	0	0	Parajo, 2019, 72h

ANEXO III. DATOS DE TOXICIDAD PARA P. SUBCAPITATA Y DESCRIPTORES DE LÍQUIDOS IÓNICOS

Abrev.	LC50 µM	nº C más larga unida a N del catión	nº C más corta unida a N del catión	nºC sustitución alquílica en C del catión	nº de O en S	nº de Cl en S	nº de Si en S	nº de N en Su	nº de S en S	nº de OH en S	nº de CN en S	nº de Cy6 en S es Benzyl	SP/N/S/G	nº de dobles enlaces cadenas más larga unida a N	SP/N/S/G haciendo ciclo	Nº de COO- en S*	Nº de fenil a C del catión	Nº de CONh en S*	Ref.
[C ₁ mim][Cl]	2,84	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Cho
[C ₂ mim][Cl]	3,26	2	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Mano, 2020, 96h
[C ₃ mim] [NTf ₂]	1,55	3	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Ventura, 2013, 92h
[C ₃ mim] [NTf ₂]	1,55	3	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Ventura, 2010, 96H
[C ₄ mim][PF ₆]	2,20	4	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	
[C ₄ mim][CF ₃ SO ₄]	3,34	4	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Cho, 2009, 96h
[C ₄ mim] [C ₈ H ₁₇ SO ₄]	3,35	4	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Cho, 2009, 96h
[C ₄ mim] [PF ₆]	3,12	4	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Cho, 2009, 96h
[C ₄ mim] [Cl]	2,34	4	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	xxx
[C ₄ mim] [Cl]	1,90	4	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Petric, 2013, 72h
[C ₄ mim] [Cl]	3,46	4	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Cho, 2009, 96h
[C ₄ mim][Cl]	3,08	4	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Koutinas2019 , 72h
[C ₄ mim][Cl]	2,90	4	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Koutinas 2019, 72h
[C ₄ mim] [MeSO ₃]	2,61	4	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Koutinas 2019, 72h
[C ₄ mim] [MeSO ₃]	2,42	4	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Koutinas2019 , 96h
[C ₃ mim] [Br]	3,46	4	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Cho, 2007, 48h
[C ₃ mim] [Br]	3,29	3	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Cho, 2007, 72h
[C ₃ mim] [Br]	3,14	3	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Cho, 2007, 96h
[C ₄ mim] [Br]	3,46	3	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Cho, 2007, 48h

ANEXO III. DATOS DE TOXICIDAD PARA P. SUBCAPITATA Y DESCRIPTORES DE LÍQUIDOS IÓNICOS

Abrev.	LC50 µM	nº C más larga unida a N del catión	nº C más corta unida a N del catión	nºC sustitución alquilica en C del catión	nº de O en S	nº de Cl en S	nº de Si en S	nº de N en Su	nº de S en S	nº de OH en S	nº de CN en S	nº de Cy6 en S es Benzyl	SP/N/S/G	nº de dobles enlaces cadenas más larga unida a N	SP/N/S/G haciendo ciclo	Nº de COO- en S*	Nº de fenil a C del catión	Nº de CONh en S*	Ref.
[C ₄ mim] [Br]	3,36	4	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Cho, 2007, 72h
[C ₄ mim] [Br]	3,02	4	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Cho, 2007, 96h
[C ₄ mim] [Br]	3,46	4	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Cho, 2008, 48h
[C ₄ mim][Br]	3,36	4	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Cho, 2008, 72h
[C ₄ mim] [Br]	3,02	4	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Cho, 2008, 96h
[C ₄ mim] [Br]	3,33	4	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Cho, 2009, 96h
[C ₄ mim] [Br]	4,38	4	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Pham, 2008, 10min
[C ₄ mim] [NTf ₂]	1,80	4	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Erazquin 2021,
[C ₄ mim] [NTf ₂]	1,80	4	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Preti, 2009, 72h
[C ₄ mim] [BF ₄]	3,57	4	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Cho
[C ₄ mim] [BF ₄]	3,40	4	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Cho, 2009, 96h
[C ₄ mim] [SbF ₆]	2,13	4	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Cho
[C ₄ mim] [SbF ₆]	2,13	4	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Cho, 2009, 96h
[C ₆ mim] [Br]	2,57	4	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Cho, 2007, 48h
[C ₆ mim] [Br]	2,54	6	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Cho, 2007, 72h
[C ₆ mim] [Br]	2,46	6	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Cho, 2007, 96h
[C ₆ mim] [Br]	4,28	6	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Pham, 2008, 10min
[C ₈ mim] [Br]	1,65	6	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Cho, 2007, 48h
[C ₈ mim] [Br]	1,63	8	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Cho, 2007, 72h
[C ₈ mim] [Br]	1,57	8	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Cho, 2007, 96h
[C ₈ mim] [Br]	3,54	8	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Pham, 2008, 10min

ANEXO III. DATOS DE TOXICIDAD PARA P. SUBCAPITATA Y DESCRIPTORES DE LÍQUIDOS IÓNICOS

Abrev.	LC50 µM	n° C más larga unida a N del catión	n° C más corta unida a N del catión	n°C sustitución alquilica en C del catión	n° de O en S	n° de Cl en S	n° de Si en S	n° de N en Su	n° de S en S	n° de OH en S	n° de CN en S	n° de Cy6 en S es Benzyl	SP/N/S/G	n° de dobles enlaces cadenas más larga unida a N	SP/N/S/G haciendo ciclo	N° de COO- en S*	N° de fenil a C del catión	N° de CONh en S*	Ref.
[C ₈ mim] [Cl]	0,70	8	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Peric, 2013, 72h
[C ₁₂ mim] [Cl]	-1,15	8	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Mano, 2020, 96h
[12ClC ₂ im][Cl]	2,66	12	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	xxx
[12ClC ₂ im] [Cl]	2,66	2	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Preti, 2009, 72h
[12ClC ₂ im] [Cl]	2,62	2	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Preti, 2009, 72h
[12ClC ₂ mim][Cl]	2,62	2	1	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	xxx
[12ClC ₂ mim] [NTf ₂]	2,22	2	1	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Cho
[1Clmim][NTf ₂]	2,22	2	1	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	xxx
[12ClC ₂ mim] [NTf ₂]	2,22	2	1	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Preti, 2009, 72h
[13ClC ₃ mim] [Cl]	2,23	2	1	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Cho
[13OHC ₃ mim] [Cl]	2,23	3	1	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Preti, 2009, 72h
12[OHC ₂ mim] [NTf ₂]	2,14	3	1	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Cho
12[OHC ₂ mim] [NTf ₂]	2,14	2	1	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	Preti, 2009, 72h
[32OHC ₂ mim] [NTf ₂]	2,14	2	1	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	
[32OHC ₂ mim][Cl]	2,23	2	1	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	
[TMSimim][Br]	1,63	3	1	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	Preti, 2009, 72h
[ImidC ₂ Phe][Br]	2,35	4	1	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Kusuma, 2021, 72h
[ImidC ₄ Phe][Br]	0,40	1	4	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	1	1	Kusuma, 2021, 72h
[ImidC ₆ Phe][Br]	-0,44	1	6	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	1	1	Kusuma, 2021, 72h
[ImidC ₈ Phe][Br]	-0,82	1	8	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	1	1	Kusuma, 2021, 72h

ANEXO III. DATOS DE TOXICIDAD PARA P. SUBCAPITATA Y DESCRIPTORES DE LÍQUIDOS IÓNICOS

Abrev.	LC50 µM	nº C más larga unida a N del catión	nº C más corta unida a N del catión	nºC sustitución alquilica en C del catión	nº de O en S	nº de Cl en S	nº de Si en S	nº de N en Su	nº de S en S	nº de OH en S	nº de CN en S	nº de Cy6 en S es Benzyl	SP/N/S/G	nº de dobles enlaces cadenas más larga unida a N	SP/N/S/G haciendo ciclo	Nº de COO- en S*	Nº de fenil a C del catión	Nº de CONh en S*	Ref.
[ImidC ₁₀ Phe][Br]	-0,70	1	10	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	1	1	Kusuma, 2021, 72h
[ImidC ₁₂ Phe][Br]	-0,74	1	12	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	1	1	Kusuma, 2021, 72h
[ImidC ₁₄ Phe][Br]	-1,10	1	14	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	1	1	Kusuma, 2021, 72h
[ImidC ₁₆ Phe][Br]	-0,77	1	16	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	1	1	Kusuma, 2021, 72h
[C ₃ Py][Br]	4,7	1	18	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	1	1	xxx
[C ₄ Py] [NTf ₂]	1,23	3	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Preti, 2009, 72h
[C ₄ Py] [Cl]	2,23	4	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Peric, 2013, 72h
[C ₃ -3mPip] [NTf ₂]	1,52	4	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Soia, 2012, 96h
[C ₃ -3mPip] [NTf ₂]	1,52	3	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Ventura, 2013, 96h
[C ₃ -3mPy] [NTf ₂]	0,86	3	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Soia, 2012, 96h
[C ₃ -3mPy] [NTf ₂]	0,86	3	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Ventura, 2013, 96h
[Py] [CF ₃ SO ₃]	2,88	3	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Koutinas 2019, 72h
[Py] [CF ₃ SO ₃]	2,46	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Koutinas 2019, 96h
[C ₃ -3mPy] [Br]	4,73	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Pham, 2008, 10min
[C ₄ -3mPy] [Br]	4,03	3	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Pham, 2008, 10min
[C ₄ -3mPy][Br]	3,46	4	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Cho, 2008, 48h
[C ₄ -3mPy][Br]	3,70	4	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Cho, 2008, 72h
[C ₄ -3mPy][Br]	3,69	4	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Cho, 2008, 96h

ANEXO III. DATOS DE TOXICIDAD PARA P. SUBCAPITATA Y DESCRIPTORES DE LÍQUIDOS IÓNICOS

Abrev.	LC50 µM	n° C más larga unida a N del catión	n° C más corta unida a N del catión	n°C sustitución alquilica en C del catión	n° de O en S	n° de Cl en S	n° de Si en S	n° de N en Su	n° de S en S	n° de OH en S	n° de CN en S	n° de Cy6 en S es Benzyl	SP/N/S/G	n° de dobles enlaces cadenas más larga unida a N	SP/N/S/G haciendo ciclo	N° de COO- en S*	N° de fenil a C del catión	N° de CONh en S*	Ref.
[C ₆ -3mPy] [Br]	3,17	4	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Pham, 2008, 10min
[C ₆ -3mPy] [Cl]	2,84	6	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Preti, 2009, 72h
[C ₈ -1mPy] [Br]	1,77	6	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Costa, 2017
[C ₈ -3mPy] [Br]	1,74	8	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Pham, 2008, 10min
[C ₈ -4mPy] [Br]	1,43	8	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Costa, 2017
[PyC ₂ Phe][Br]	3,03	8	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Kusuma, 2021, 72h
[PyC ₄ Phe] [Br]	1,75	4																	Kusuma, 2021, 72h
[PyC ₆ Phe] [Br]	0,62	6	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	1	1	Kusuma, 2021, 72h
[PyC ₈ Phe] [Br]	0,21	8	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	1	1	Kusuma, 2021, 72h
[PyC ₁₀ Phe] [Br]	-0,15	10	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	1	1	Kusuma, 2021, 72h
[PyC ₁₂ Phe] [Br]	-0,74	12	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	1	1	Kusuma, 2021, 72h
[PyC ₁₄ Phe][Br]	-0,89	14	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	1	1	Kusuma, 2021, 72h
[PyC ₁₆ Phe][Br]	-0,72	16	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	1	1	Kusuma, 2021, 72h
[N ₀₀₀ -2OH] [HCO ₂]	4,36	1	18	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	1	1	Peric, 2013, 72h
[N ₀₀₂ OH-2OH] [HCO ₂]	3,81	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	2	0	0	0	0	0	Peric, 2013, 72h
[N ₀₀₂ OH-2OH] [CCO ₂]	3,72	0	0	0	0	0	0	0	0	2	0	0	4	0	0	0	0	0	Peric, 2013, 72h
[N ₀₀₂ OH-2OH] [C ₂ CO ₂]	4,16	0	0	0	0	0	0	0	0	2	0	0	4	0	0	0	0	0	Peric, 2013, 72h
[N ₀₀₂ OH-2OH] [C ₃ CO ₂]	3,18	0	0	0	0	0	0	0	0	2	0	0	4	0	0	0	0	0	Peric, 2013, 72h

ANEXO III. DATOS DE TOXICIDAD PARA P. SUBCAPITATA Y DESCRIPTORES DE LÍQUIDOS IÓNICOS

Abrev.	LC50 µM	nº C más larga unida a N del catión	nº C más corta unida a N del catión	nºC sustitución alquilica en C del catión	nº de O en S	nº de Cl en S	nº de Si en S	nº de N en Su	nº de S en S	nº de OH en S	nº de CN en S	nº de Cy6 en S es Benzyl	SP/N/S/G	nº de dobles enlaces cadenas más larga unida a N	SP/N/S/G haciendo ciclo	Nº de COO- en S*	Nº de fenil a C del catión	Nº de CONh en S*	Ref.
[N ₀₀ 2OH-2OH] [C ₃ CO ₂]	3,82	0	0	0	0	0	0	0	0	2	0	0	4	0	0	0	0	0	Peric, 2013, 72h
[N ₀₀ 2OH-2OH] [C ₄ CO ₂]	3,44	0	0	0	0	0	0	0	0	2	0	0	4	0	0	0	0	0	Peric, 2013, 72h
[N ₀₂ OH2OH-2OH] [C ₃ CO ₂]	3,73	0	0	0	0	0	0	0	0	2	0	0	4	0	0	0	0	0	Peric, 2013, 72h
[N ₀₂ OH2OH-2OH] [C ₄ CO ₂]	3,48	0	0	0	0	0	0	0	0	3	0	0	6	0	0	0	0	0	Peric, 2013, 72h
[N ₀₀₀ -2OH] [C ₃ CO ₂]	2,85	0	0	0	0	0	0	0	0	3	0	0	6	0	0	0	0	0	Peric, 2013, 72h
[N ₄₄₄₄] [Br]	3,67	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	2	0	0	0	0	0	Errazquin 2021
[N ₄₄₄₄] [Br]	2,97	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	16	0	0	0	0	0	Cho, 2008, 48h
[N ₄₄₄₄] [Br]	3,68	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	16	0	0	0	0	0	Cho, 2008, 72h
[N ₄₄₄₄] [Br]	3,35	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	16	0	0	0	0	0	Cho, 2008, 96h
[N ₄₄₄₄][I]	1,28	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	16	0	0	0	0	0	Koutinas2019 , 72h
[N ₄₄₄₄][I]	1,13	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	16	0	0	0	0	0	Koutinas 2019, 96h
[N ₄₄₄₄] [Theob]	0,94	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	16	0	0	0	0	0	Carreira, 2021, 96h
[N ₄₄₄₄] [Theop]	0,78	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	16	0	0	0	0	0	Carreira, 2021, 96h
[N ₄₄₄₄] [Xan]	0,35	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	16	0	0	0	0	0	Carreira, 2021, 96h
[N ₄₄₄₄] [Ur]	0,82	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	16	0	0	0	0	0	Carreira, 2021, 96h
[N ₄₄₄₄] [Cl]	0,97	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	16	0	0	0	0	0	Carreira, 2021, 96h
[N ₁₇ 2OHPh] [Cl]	2,95	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	16	0	0	0	0	0	Santos, 2015, 72 h
[Cho][Cl]	2,72	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	1	4	0	0	0	0	0	Mano, 2020, 96 h

ANEXO III. DATOS DE TOXICIDAD PARA P. SUBCAPITATA Y DESCRIPTORES DE LÍQUIDOS IÓNICOS

Abrev.	LC50 µM	n° C más larga unida a N del catión	n° C más corta unida a N del catión	n°C sustitución alquilica en C del catión	n° de O en S	n° de Cl en S	n° de Si en S	n° de N en Su	n° de S en S	n° de OH en S	n° de CN en S	n° de Cy6 en S es Benzyl	SP/N/S/G	n° de dobles enlaces cadenas más larga unida a N	SP/N/S/G haciendo ciclo	N° de COO- en S*	N° de fenil a C del catión	N° de CONh en S*	Ref.
[Chol][Cl]	2,70	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	5	0	0	0	0	0	Santos, 2015, 72 h
[Chol] [1COO]	2,88	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	5	0	0	0	0	0	Santos, 2015, 72 h
[Chol] [2COO]	2,43	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	5	0	0	0	0	0	Santos, 2015, 72 h
[Chol] [3COO]	2,64	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	5	0	0	0	0	0	Santos, 2015, 72 h
[Chol][Bic]	3,15	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	5	0	0	0	0	0	Santos, 2015, 72 h
[Chol][Bit]	2,02	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	5	0	0	0	0	0	Santos, 2015, 72 h
[Chol] [DHCit]	2,47	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	5	0	0	0	0	0	Santos, 2015, 72 h
[Chol] [DHCit]	2,47	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	5	0	0	0	0	0	Mano, 2020, 96 h
[Chol] [DHphost]	2,81	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	5	0	0	0	0	0	Santos, 2015, 72 h
[Chol][Sal]	3,10	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	5	0	0	0	0	0	Santos, 2015, 72 h
[coliC ₂ Phe] [Br]	3,38	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	5	0	0	0	0	0	Kusuma, 2021, 72h
[coliC ₄ Phe] [Br]	1,94	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	9	1	1	1	Kusuma, 2021, 72h
[coliC ₆ Phe] [Br]	0,64	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	11	1	1	1	Kusuma, 2021, 72h
[coliC ₈ Phe] [Br]	-0,04	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	13	1	1	1	Kusuma, 2021, 72h
[coliC ₁₀ Phe] [Br]	-0,37	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	15	1	1	1	Kusuma, 2021, 72h
[coliC ₁₂ Phe] [Br]	-0,72	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	17	1	1	1	Kusuma, 2021, 72h
[coliC ₁₄ Phe] [Br]	-0,85	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	19	1	1	1	Kusuma, 2021, 72h
[coliC ₁₆ Phe][Br]	-0,74	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	21	1	1	1	Kusuma, 2021, 72h

ANEXO III. DATOS DE TOXICIDAD PARA P. SUBCAPITATA Y DESCRIPTORES DE LÍQUIDOS IÓNICOS

Abrev.	LC50 µM	n° C más larga unida a N del catión	n° C más corta unida a N del catión	n°C sustitución alquilica en C del catión	n° de O en S	n° de Cl en S	n° de Si en S	n° de N en Su	n° de S en S	n° de OH en S	n° de CN en S	n° de Cy6 en S es Benzyl	SP/N/S/G	n° de dobles enlaces cadenas más larga unida a N	SP/N/S/G haciendo ciclo	N° de COO- en S*	N° de fenil a C del catión	N° de CONh en S*	Ref.
[N ₁₈₈₈] [C ₆ SAC]	-1,04	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	23	1	1	1	Pretzer, 2017, 72h
[N ₁₈₈₈] [Cl]	-0,76	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	25	0	0	0	0	0	Pretzer, 2017, 72h
[Bu3NC2] [Br]	2,60	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	25	0	0	0	0	0	Erazquin, 2021, 72h
[Bu3NC4][Br]	2,37	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	15	0	0	1	0	0	Erazquin, 2021, 72h
[Bu3PC2] [Br]	2,34	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	17	0	0	1	0	0	Erazquin, 2021, 72h
[Bu3PC4] [Br]	1,94	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	15	0	0	1	0	0	Erazquin, 2021, 72h
AMMOENG 130 [Cl]	0,14	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	17	0	0	1	0	0	XXX
[P1888][HNA]	-0,30	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	35	0	0	0	0	0	Philip, 2020, 72h
[C4mPyrr] [Br]	3,67	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	25	0	0	0	0	0	Cho, 2008, 48h
[C4mPyrr] [Br]	3,97	4	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Cho, 2008, 72h
[C4mPyrr] [Br]	4,09	4	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Cho, 2008, 96h
11[C4mPyrr][Br]	3,97	4	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Costa, 2017
[C3mPyrr] [NTf2]	1,65	4	1	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Ventura, 2013, 92h
[C3mPyrr] [NTf2]	1,65	3	1	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Soia, 2012, 96h
[C6mPyrr] [Cl]	2,73	3	1	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Cho
[C8mPyrr] [Br]	1,68	6	1	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Cho
[P4444][Br]	3,00	8	1	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Erazquin 2021
[P ₄₄₄₄] [Br]	1,90	0	0	0	0	0	0	0	0	0	16	0	0	0	0	0	0	0	Cho, 2008, 48h
[P ₄₄₄₄] [Br]	2,19	0	0	0	0	0	0	0	0	0	16	0	0	0	0	0	0	0	Cho, 2008, 72h
[P ₄₄₄₄] [Br]	2,35	0	0	0	0	0	0	0	0	0	16	0	0	0	0	0	0	0	Cho,

ANEXO III. DATOS DE TOXICIDAD PARA P. SUBCAPITATA Y DESCRIPTORES DE LÍQUIDOS IÓNICOS

Abrev.	LC50 µM	n° C más larga unida a N del catión	n° C más corta unida a N del catión	n°C sustitución alquilica en C del catión	n° de O en S	n° de Cl en S	n° de Si en S	n° de N en Su	n° de S en S	n° de OH en S	n° de CN en S	n° de Cy6 en S es Benzyl	SP/N/S/G	n° de dobles enlaces cadenas más larga unida a N	SP/N/S/G haciendo ciclo	N° de COO- en S*	N° de fenil a C del catión	N° de CONh en S*	Ref.
																			2008, 96h
[P ₁₈₈₈] [HNA]	-0,17	0	0	0	0	0	0	0	0	0	16	0	0	0	0	0	0	0	Philip, 2020, 72h
[P ₆₆₆₁₄] [HNA]	-0,15	0	0	0	0	0	0	0	0	0	25	0	0	0	0	0	0	0	Philip, 2020, 72h
[P ₁₈₈₈] [C ₆ SAC]	-1,15	0	0	0	0	0	0	0	0	0	32	0	0	0	0	0	0	0	Pretzer, 2017, 72h
[P ₆₆₆₁₄][CI]	-0,72	0	0	0	0	0	0	1	0	0	25	0	0	0	0	0	0	0	Pretzer, 2017, 72h
[Chol] [PF ₆]	2,18	0	0	0	0	0	0	0	0	0	32	0	0	0	0	0	0	0	Errazquin 2021
[Chol] [PF ₆]	2,18	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Preti, 2009, 72 h
[S ₂₂₂][Br]	2,34	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	Errazquin 2021
[S ₂₂₂][Br]	2,34	0	0	0	0	0	0	0	0	0	6	0	0	0	0	0	0	0	Preti, 2009, 72 h
[ETHT][Br]	2,48	0	0	0	0	0	0	0	0	0	6	0	0	0	0	0	0	0	Preti, 2009, 72 h
[Bu ₃ NC ₄] [Sac]	1,42	0	0	0	0	0	0	0	0	0	2	0	4	0	0	0	0	0	Parajo, 2019, 72h
[Bu ₃ NC ₂] [Sac]	1,02	0	0	0	0	0	0	0	0	0	17	0	0	0	0	1	0	0	Parajo, 2019, 72h
[Me ₃ NC ₂ OC ₁₂][doc]	-0,09	0	0	0	0	0	0	0	0	0	15	0	0	0	0	1	0	0	Parajo, 2019, 72h
[Me ₃ NC ₂ OC ₁₂][SCN]	-0,11	0	0	0	0	0	0	0	0	0	16	0	0	0	0	1	0	0	Parajo, 2019, 72h
[Me ₃ NC ₂ OC ₁₄][doc]	0,00	0	0	0	0	0	0	0	0	0	16	0	0	0	0	1	0	0	Parajo, 2019, 72h
[Me ₃ NC ₂ OC ₁₄][SCN]	0,16	0	0	0	0	0	0	0	0	0	18	0	0	0	0	1	0	0	Parajo, 2019, 72h
[Bu ₃ pC ₂] [Sac]	-0,04	0	0	0	0	0	0	0	0	0	18	0	0	0	0	1	0	0	Parajo, 2019, 72h
[Bu ₃ pC ₄] [Sac]	0,42	0	0	0	0	0	0	0	0	0	15	0	0	0	0	1	0	0	Parajo, 2019, 72h