

## **Prólogo**

### **De la Química al Ambiente.**

Desde el año 5000 a.c. con la descubrimiento del oro, hasta la teoría atómica y su aplicación a la primer bomba atómica, transcurrieron 7000 años de historia, marcados por éxitos y fracasos, desde las ideas más fantasiosas hasta los postulados más ingeniosos en los que haya pensado la mente humana. Todos y cada uno de ellos enfocados en tratar de explicar lo que se observaba como consecuencia de lo que ocurría en un mundo ultramicroscópico, donde parte de los hechos estaban en el marco de la Fe y lo inexplicable se convertía en el motor de la búsqueda, en el vértigo de la aventura y en el desafío permanente de ampliar el conocimiento.

La química es la ciencia que estudia la materia: su composición, estructura, propiedades, reacciones y los cambios energéticos asociados a dichas reacciones. Un gran número de estas propiedades se han logrado medir cuantitativamente y sólo unas pocas se han considerado como fundamentales. Fue Lavoisier, quien primero estableció la importancia de cuantificar las magnitudes, un proceso que en la actualidad es de sentido común.

En los tiempos actuales el impulso primario de la curiosidad humana sigue intacta y las inquietudes parecieran formar parte de su naturaleza. Día a día trabaja en develar la información oculta de todo el universo que lo rodea, con la ambición de explicar los elementos que dieron sentido a la historia pasada, los fenómenos observados en el presente y la proyección del futuro, como una forma de mitigar el miedo a lo desconocido.

Esto ha llevado al desarrollo de innumerables derivaciones y especificidades en el campo científico de las ciencias exactas. El hombre se ha visto como la maquina química mas compleja y a partir de ello han surgido disciplinas como la bioquímica, la farmacología, la medicina; ha entendido y atendido la necesidad de progreso, de bienes y servicios, de satisfacer sus necesidades más urgentes, y a partir de ello centralizó su esfuerzo en lo que se conoció como era o revolución industrial, que cambio el rito y estilo de vida desde lo social hasta lo económico.

Toda esta revolución de ideas y progreso se produjo en el marco de una mirada antropocéntrica, donde el hombre extiende su acción y su poder intelectual como dueño total y absoluto de su hábitat. Esto llevó a un enfoque de la química hacia el desarrollo de nuevas metodologías de síntesis, de nuevos materiales y su producción a gran escala, y la exploración y explotación de recursos naturales, este proceso fue acompañado y retroalimentado por nuevas herramientas de la Física y de las Matemáticas que nacían de la mano de las necesidades productivas. Avanzado

este proceso de evolución socioeconómico, se empiezan a observar cambios inesperados en algunos procesos naturales y diversos problemas de salud en varios asentamientos poblaciones. Es en esta instancia donde el hombre se enfrenta al nuevo desafío: explicar los fenómenos desde un mundo microscópico, pero ahora aplicados a un espacio físico que excede al laboratorio, a un espacio industrial o a su propio ser. El objeto de estudio debió extenderse al planeta entero, redefinir su posición en el universo y elaborar una metodología de trabajo que le permita aplicar herramientas de investigación construidas a lo largo de la historia, en esta nueva rama de la ciencia para detectar los problemas ambientales, explicar sus fenómenos, proponer soluciones y estrategias para evitarlos, nace así *la química ambiental*.

Esto ubica a la química, en el mundo moderno, como una ciencia que debe ejercerse sin descuidar ni su entorno, ni las interacciones con los otros elementos y organismos de la naturaleza y a su vez acotar el impacto de estos fenómenos sobre la calidad de vida del hombre. De alguna manera una visión antropocéntrica moderna, el cuidado del medio para la sustentabilidad de la vida humana.

En el siguiente trabajo de tesis se utilizan herramientas de la química experimental, especialmente del análisis químico cuali y cuantitativo, de metodologías de calculo computacionales aplicados, del campo de la estadística y de la química, con la intención de poder explicar la relación entre algunos eventos ambientales y la actividad antrópica y aportar nuevas herramientas que permitan predecir y evaluar en forma rápida y especifica problemas ambientales a través de medidas experimentales sencillas.

Lic. MARINO Damián.

## **RESUMEN**

En el primer capítulo se presentan conceptos generales de ambiente, ecosistema, métodos de análisis instrumental, métodos de trabajo de la química teórica y distintos programas computacionales, reconocidos por organismos oficiales, para la predicción tanto de propiedades fisicoquímicas como biológicas.

En el capítulo II se analizan las distintas fuentes emisoras que influyen sobre la concentración de HAPs en la atmósfera por aplicación de metodologías derivadas del análisis estadístico multivariado. A partir de esta información se desarrolla un modelo predictivo de actividad mutagénica, aplicable a muestras de material particulado en aire, en función de las distribuciones de concentraciones de los HAPs asociados a las partículas.

En el capítulo III, se desarrolla una técnica de identificación y cuantificación de hormonas esteroides andrógenas por HPLC, detección Masa, contenidas en el plasma de peces, y su potencial aplicación como sensores no específicos de contaminación. Además las distintas moléculas son estudiadas desde el punto de vista teórico-computacional y las distribuciones de los iones formados en la cámara de ionización del espectrómetro de masas son utilizadas como descriptores empíricos para la elaboración de modelos QSAR/QSPR.

En el capítulo IV, se aplican los análisis multivariados para la identificación de iones predominantes, sobre un banco de datos generados en un espectrómetro de masas, a partir de bilis provenientes de peces expuestos a cipermetrina. En función de los resultados obtenidos se proponen los metabolitos encontrados, como biomarcadores específicos de exposición.

En el capítulo V, se presentan las conclusiones generales respecto a las bondades de las distintas herramientas teórico-experimentales y su aplicación al diagnóstico ambiental.