

5-CONCLUSIONES GENERALES

La aplicación de herramientas computacionales sobre distintos conjuntos moleculares, ya sea desde la estadística multivariada, las redes neuronales artificiales, o la optimización de las posiciones en el espacio de los distintos átomos, ayudan notablemente en la interpretación de resultados experimentales. Esto es favorecido por la utilización de conjuntos completos de datos, tal como se presenta en el caso de los HAPs, donde la información contenida en las distintas distribuciones de concentración, especialmente la relación mutua entre los distintos hidrocarburos es muy importante a la hora de identificar los compuestos prevalentes y su relación con las fuentes emisoras. Las distribuciones, en sí mismas, representan una característica propia de la muestra, una identidad. Esta situación también se da para el caso de los perfiles metabólicos biliares de peces u hormonas esteroides, donde la exposición a un xenobiótico, produce, más allá de los compuestos propios de biotransformación excretora, una alteración en las distribuciones de concentración para distintas moléculas endógenas y este comportamiento puede ser utilizado como característica de identidad: expuesto/ no expuesto. En este sentido, el comportamiento macroscópico observado, de los organismos estudiados, bacterias y peces, están en función de las características de las moléculas involucradas y su concentración en el ambiente.

Una información integral, respecto a las observaciones experimentales y su relación con las características microscópicas de las moléculas, es de especial interés a la hora de diseñar modelos que relacionen cuantitativamente las propiedades medidas, tanto fisicoquímicas como biológicas, con la información molecular. Estos modelos desarrollados y validados son en sí mismo muy valiosos por sus potenciales predictivos, por el ahorro económico que significa realizar trabajo experimental sobre un conjunto reducido de muestras, las de mayor interés o solamente aquellas donde el modelo no predice dentro de un nivel de confianza aceptable. Este es el caso del modelo de predicción mutagénica desarrollado en el capítulo II, donde la sola medida de la concentración de algunos HAPs en el ambiente permite establecer el estado mutagénico de la muestra, con un importante ahorro tanto de tiempo como económico. El potencial predictivo del espectrómetro de masas, a la hora de estudiar propiedades fisicoquímicas o biológicas, tiene una particular importancia en la evaluación de respuestas biológicas, ya que un modelado previo de las moléculas a investigar permite tener una orientación de los intervalos de concentración (ejemplo: LC50) o del tipo de respuesta esperada y en función de ello diseñar un experimento que maximice la calidad de los resultados, con el menor sacrificio de organismos.

Esta combinación química experimental-computacional-teórica, es de especial interés en el diagnóstico ambiental, ya que facilita la exploración de causas y efectos de distintas sustancias sobre el ambiente, ha permitido identificar fuentes emisoras, comportamientos fisicoquímicos, concentraciones de moléculas endógenas en peces, para ser usadas como indicadores de contaminación no específica, y la determinación de metabolitos de respuesta específica, como lo es el caso de la cipermetrina. Es necesario remarcar que las metodologías aplicadas en este trabajo de tesis pueden ser extendidas a otras moléculas o familia de ellas, en distintos organismos y ambientes.