

ÍNDICE

Carátula	i
Dedicatoria	ii
Agradecimiento	iii
Agradecimiento especial.	iv
Prólogo	vi
Resumen	vii
ÍNDICE	viii

CAPÍTULO I: Conceptos Generales. Medioambiente. Diagnóstico Ambiental. Una aproximación desde la Química.

1-INTRODUCCIÓN GENERAL.	1
1.1-Concepto de medioambiente.	1
1.2-Ecosistema.	2
1.3-Propiedades fisicoquímicas. Interacciones entre compartimentos.	3
1.4-Contaminantes ambientales.	4
1.4.1-Biomarcadores.	5
1.5-Etapas analíticas involucradas en las mediciones ambientales.	6
1.5.1-Muestreo.	6
1.5.2-Análisis.	7
1.5.2.1-Análisis Instrumental Moderno.	9
1.5.3-Interpretación de resultados	10
1.5.3.1-Métodos integrados de análisis de datos.	10
1.6-Fisicoquímica y sus alcances.	14
1.6.1-Fisicoquímica moderna. Fisicoquímica Teórica y las computadoras.	14
1.6.2-Fisicoquímica Computacional.	15
1.7-Relaciones propiedad-actividad-estructura.	16
1.7.1-Breve reseña histórica	18
1.7.2-Indices topológicos.	18
1.7.3-Conceptos elementales en la teoría de grafos.	20
1.7.4-Grafos moleculares.	21
1.7.5-Descriptores cuánticos.	22
1.7.6-Estrategia general de trabajo en el desarrollo de un modelo QSPR/QSAR.	23
1.7.7-Estudios por Fragmentos moleculares.	24
1.8-Aplicaciones de los modelos QSAR/QSPR/QSTR.	25
1.8.1- Aplicaciones oficiales.	26
1.9-Objetivos e Hipótesis Generales de Trabajo.	29

CAPÍTULO II: Hidrocarburos Aromáticos Policíclicos

2-INTRODUCCIÓN	30
2.1-Aerosoles. Características. Transporte de partículas.	30
2.1.1-Fuentes.	30
2.1.2-Partículas y aerosol atmosférico.	31
2.1.3-Partículas. Calidad de aire y Salud.	34

2.1.4-Composición.	37
2.2-Hidrocarburos Aromáticos Policíclicos. Características y Propiedades.	39
2.3-Presencia en el ambiente. Origen y destino.	41
2.3.1-Fuentes características	41
2.3.2-Mecanismos de generación por síntesis química.	42
2.3.3-Equilibrios gas/partícula.	44
2.3.4-Characterización de fuentes. Perfiles característicos.	45
2.3.5-Reacciones de los HAPs en la atmósfera.	46
2.3.6-Efectos sobre la Salud.	49
2.3.7-Estrategias de Cuantificación de HAPs. Formas de expresión.	53
2.3.8-Objetivos e Hipótesis de trabajo.	55
2.4-METODOLOGÍA	56
2.4.1-Characterísticas de las muestras que integran el banco de datos.	56
2.4.2-Reglas metodológicas.	57
2.4.3-Estudio de las distribuciones de concentraciones.	58
2.4.3.1-Análisis de Componentes Principales.	58
2.4.3.2-Análisis de Discriminantes Descriptivo.	59
2.4.3.4-Análisis por Redes Neuronales Artificiales (RNA).	60
2.4.4-Estudio de las respuestas biológicas.	61
2.4.5-Characterización topológica y molecular de los HAPs estudiados.	61
Relaciones con sus propiedades fisicoquímicas.	
2.4.5.1-Elaboración de modelos predictivos.	62
2.5-RESULTADOS Y DISCUSIÓN.	64
2.5.1-Análisis de discriminantes descriptivos.	64
2.5.1.1-Ciudad de La Plata.	64
2.5.1.2-Ciudad de Leipzig.	65
2.5.1.3-Importancia de las distintas fracciones de tamaño de partículas sobre el PM10.	68
2.5.1.4- Aplicación de redes neuronales a la discriminación de sitios.	71
2.5.2-Análisis de Componentes Principales	74
2.5.2.1-Número de factores a extraer.	74
2.5.2.2-Interpretación de las componentes.	76
2.5.2.3-Characterización de las fuentes emisoras.	77
2.5.2.3.1-Ciudad de La Plata.	77
2.5.2.3.2-Ciudad de Leipzig.	82
2.5.2.3.3-Comparaciones de resultados devueltos por Redes Neuronales y por ACP.	85
2.5.2.3.4-Comparaciones respecto a otras ciudades del mundo evaluadas con la misma metodología de ACP	86
2.5.3-Consideraciones generales del método	89
2.5.3.1-Influencia del dispositivo de muestreo.	89
2.5.3.2- Ventajas y Limitaciones.	93
2.5.4-Relaciones propiedad-estructura de los HAPs de la EPA.	95
2.5.5-Análisis multivariado y RNA aplicados al conjunto de datos del Test de Ames.	96
2.5.6-Modelo predictivo de propiedades mutagénicas.	98

2.5.6.1-Compuestos relevantes en el modelado.	98
2.5.6.2-Elaboración de modelos ponderados por sitios de origen.	100
2.5.6.3-Elaboración de modelos ponderados por sitios de origen y por grado de actividad antrópica.	101
2.5.6.4-Modelos finales. Aplicaciones.	103
2.6- CONCLUSIONES.	106

CAPÍTULO III: Esteroides 11- Δ 4-Oxigenados en Peces

3.1-INTRODUCCIÓN	108
<i>3.1.1-Características moleculares</i>	108
<i>3.1.2-Hormonas esteroides. Características y biosíntesis.</i>	109
<i>3.1.3-Presencia de andrógenos en peces. Aplicaciones</i>	110
<i>3.1.4- Métodos de cuantificación de Hormonas Esteroides.</i>	112
3.1.4.1- Método de RIA.	112
3.1.4.2- Método de ELISA.	113
3.1.4.3-Método aplicado en peces.	114
<i>3.1.5- Herramientas de la química analítica aplicadas a las ciencias biológicas.</i>	115
<i>3.1.6-Objetivos e Hipótesis de trabajo.</i>	116
3.2-METODOLOGÍA	117
<i>3.2.1-Caracterización espectrométrica de los esteroides. Cuantificación.</i>	117
3.2.1.1-Reactivos empleados en el trabajo.	117
3.2.1.2-Equipamiento.	117
3.2.1.3-Optimización de las condiciones de separación y detección.	118
3.2.1.4-Validación cuantitativa de la técnica.	118
<i>3.2.2-Aplicación de la metodología desarrollada sobre peces de laboratorio y de campo.</i>	120
<i>3.2.3-Modelado molecular de los esteroides andrógenos.</i>	120
3.3-RESULTADOS Y DISCUSIÓN.	121
<i>3.3.1-Caracterización de las distintas moléculas por espectrometría de masas.</i>	121
<i>3.3.2-Características de los iones formados.</i>	125
<i>3.3.3-Validación analítica de la técnica de HPLC-MS.</i>	127
3.3.3.1-Linealidad.	128
3.3.3.2-Presición y exactitud.	128
3.3.3.3-LD y LC.	129
3.3.3.4-Recuperación.	130
3.3.3.5-Aplicación a muestras de peces.	131
<i>3.3.4-Modelado molecular de las distintas HE.</i>	132
<i>3.3.5-Relaciones entre la energía molecular y la espectrometría de masas.</i>	133
3.4-CONCLUSIONES	137

CAPÍTULO IV: Metabolitos de Cipermetrina en Peces

4.1-INTRODUCCIÓN	138
<i>4.1.1-Características de la molécula. Importancia toxicológica.</i>	138
<i>4.1.2-Relevancia ambiental de cipermetrina en nuestro país. Estudios</i>	139

<i>regionales</i>	
4.1.3-Antecedentes ecotoxicológicos.	140
4.1.4-Antecedentes químicos y computacionales aplicados a estudios metabólicos.	141
4.1.5-Objetivos e Hipótesis de trabajo.	143
4.2-METODOLOGÍA	144
4.2.1-Caracterización espectrométrica de la Cipermetrina	144
4.2.1.1-Reactivos empleados en el trabajo.	144
4.2.1.2-Equipamiento.	144
4.2.1.3-Optimización de las condiciones de separación y detección.	145
4.2.2-Exposición de Peces a Cipermetrina.	145
4.2.2.1-Transporte de Cipermetrina en peces expuestos.	145
4.2.2.2-Metabolitos de cipermetrina en bilis.	146
4.2.3-Aplicaciones de herramientas computacionales para la identificación de metabolitos.	146
4.3-RESULTADOS Y DISCUSIÓN	148
4.3.1-Caracterización de las cipermetrina por espectrometría de masas.	148
4.3.2-Validación de la técnica analítica de cuantificación.	152
4.3.3-Seguimiento de la cipermetrina en los distintos órganos de los peces.	153
4.2.4-Caracterización de metabolitos de cipermetrina en bilis de pejerreyes.	156
4.2.5-Propuesta analítica de los metabolitos detectados.	163
4.3-CONCLUSIONES	165
CAPÍTULO V: CONCLUSIONES GENERALES	166
6-BIBLIOGRAFÍA	167
7-ANEXOS	
7.1-Anexo I: Tabla con código de colores para la interpretación de fuentes emisoras	202
7.2-Anexo II: Descriptores moleculares y propiedades fisicoquímicas	203
7.3-Anexo III: Cromatogramas característicos de Esteroides en Peces y Metabolitos de Cipermetrina en peces. Salidas Instrumentales.	204