

MENÚ INTERACTIVO

Métodos alternativos en las investigaciones biomédicas

Ver portada

CATÁLOGO 2 | MENÚ DE INFOGRAFÍAS

Haz clic en una imagen o en su título para abrir la infografía.

MÉTODOS IN CHEMICO



INFORMACIÓN GENERAL

NOMBRE COMÚN
Ensayos in chemico.

TIPO DE ALTERNATIVA
Reacciones químicas en sistemas acuosos.

BASE CIENTÍFICA
Interacción con péptidos o moléculas modelo.

EJEMPLO DEL ARTÍCULO
EASA: cribado de alérgenos electrolíticos.

CARACTERÍSTICAS
Formato de 96 pozos; controles; lectura instrumental.

USOS FUNDAMENTALES EN LA INVESTIGACIÓN

SENSIBILIZACIÓN CUTÁNEA
Evaluación de reactividad química.

UNIÓN A PROTEÍNAS
Aproximación al evento molecular inicial.

CRIBADO DE SUSTANCIAS
Comparación de múltiples compuestos.

DBPA Y ADRA
Reactividad con péptidos o derivados de aminoácidos.

ADPA
Información química para subclasificación.

CALIDAD ANALÍTICA
Detección de sesgos e interferencias.

ENFOQUES DEFINIDOS
Integración con otras fuentes de información.

DESARROLLO DE MÉTODOS
Mejora de robustez y reproducibilidad.

IMPORTANCIA EN LA INVESTIGACIÓN

En sensibilización cutánea, examinan reactividad asociada al inicio del proceso. Aportan evidencia para estrategias que evitan o reducen ensayos animales. Por sí solos no reproducen absorción, metabolismo ni la respuesta inmune completa.

DATOS GENERALES

Sistema
EASA de 96 pozos

Reactivo
Sondas NET y FDA

Reactivo EASA
Azoarctina, fluorescencia

Equipos
Reactividad y sensibilidad

Interferencias
Color, fluorescencia y estabilidad

Complemento
Datos celulares y computacionales

ARTÍCULO DE INTERÉS

Petersen et al. (2022)
Ensayo EASA de 96 pozos para sensibilización cutánea.
Escanea el QR para consultar la fuente.
doi:10.3390/toxics10050257

APLICACIONES EN DIVERSAS ÁREAS

Química | Toxicología | Alergología | Metrología | 3R

REFERENCIAS

1. Petersen EJ et al. Development of a 96-Well Electrophoretic Allergen Screening Assay for Skin Sensitization Using a Measurement Science Approach. Toxics. 2022;10:257.
2. OECD. OECD Assessment Framework, Second edition. 2024. doi:10.1787/9789264020709-en.
3. OECD. Guidance No. 497. Defined Approaches for Skin Sensitization. 2020. doi:10.1787/9789264043400-en.

Métodos in chemico

ENSAYOS DE CITOTOXICIDAD IN VITRO



INFORMACIÓN GENERAL

NOMBRE COMÚN
Citotoxicidad en células cultivadas.

TIPO DE ALTERNATIVA
Método in vitro; reemplazo parcial según objetivo.

BASE CIENTÍFICA
Viabilidad, integridad de membrana y actividad metabólica.

ENFOQUES
MTT, ATP, liberación de LDH y fluorescencia.

CARACTERÍSTICAS
Comparación de concentraciones con controles y réplicas.

USOS EN INVESTIGACIÓN Y DOCENCIA

TOXICOLOGÍA
Detectar daño celular inicial.

FARMACOLOGÍA
Comparar concentraciones y respuestas.

BIOMATERIALES
Examinar compatibilidad celular.

ONCOLOGÍA
Explorar sensibilidad de células tumorales.

MECANISMOS
Distinguir metabolismo y membrana.

PRIORIZACIÓN
Seleccionar sustancias para más estudios.

DOCENCIA
Enseñar controles y curvas de respuesta.

BIOTERIO Y 3R
Justificar estudios posteriores con evidencia.

IMPORTANCIA EN LA INVESTIGACIÓN

Permiten detectar efectos celulares antes de planear estudios con roedores. Las líneas establecidas pueden evitar nuevos animales para esa etapa. Una señal metabólica no demuestra por sí sola muerte celular; conviene combinar indicadores independientes.

DATOS GENERALES

Estimulo
Células y sustancia de prueba

Resultado
Viabilidad relativa o curva de respuesta

Modelo / material
Líneas de células, rata o humana

Equipos
Lector de placas y microscopio

Control
Blanco, vehículo o control positivo

Calidad
Verificar interferencia del compuesto

Límite
No reproduce la respuesta sistémica

ARTÍCULO DE INTERÉS

Mosmann (1983)
Ensayo colorimétrico de crecimiento y supervivencia celular.
Escanea el QR para consultar la fuente.

APLICACIONES EN DIVERSAS ÁREAS

Toxicología | Farmacología | Cultivo celular | Bioética | 3R

REFERENCIAS

1. Mosmann T. Rapid colorimetric assay for cellular growth and survival: A tetrazolium method. 1983;65:55-63. doi:10.1006/jbiotec.1983.1000000000000000.
2. Ait M, et al. Quantitative high-throughput screening using quantitative high-throughput screening. Biochem Biophys Res Commun. 2008;369:100-105.
3. Ingleset et al. Quantitative high-throughput screening: A titration-based approach. Proc Natl Acad Sci USA. 2006;103:11473-8. doi:10.1073/pnas.0604480103.

Ensayos de citotoxicidad in vitro

ENSAYOS BIOQUÍMICOS LIBRES DE CÉLULAS



INFORMACIÓN GENERAL

NOMBRE COMÚN
Ensayos enzimáticos y de unión molecular.

TIPO DE ALTERNATIVA
Método in chemico o bioquímico celular.

BASE CIENTÍFICA
Reacciones entre enzimas, sustratos y ligandos.

ENFOQUES
Colorimetría, fluorescencia y luminiscencia.

CARACTERÍSTICAS
Condiciones controladas; controles de señal e interferencia.

USOS EN INVESTIGACIÓN Y DOCENCIA

ENZOLOGÍA
Medir actividad catalítica.

FÁRMACOS
Identificar inhibidores candidatos.

NEUROTOXICOLOGÍA
Estudiar acetilcolinesterasa.

MECANISMOS
Relacionar concentración y actividad.

CRIBADO
Evaluar bibliotecas de moléculas.

CONFIRMACIÓN
Repetir con otro método de detección.

DOCENCIA
Demostrar cinética y controles.

BIOTERIO Y 3R
Disminuir demanda de tejidos frescos.

IMPORTANCIA EN LA INVESTIGACIÓN

Aíslan una reacción para estudiar cómo actúa un compuesto. Las proteínas recombinantes pueden evitar la atención repetida de tejidos de roedores. El origen de los reactivos determina cuánto reemplazo se logra; no equivalen a una respuesta en un animal.

DATOS GENERALES

Estimulo
Enzima o proteína y compuesto

Resultado
Actividad o porcentaje de inhibición

Modelo / material
Reactivos purificados o recombinantes

Equipos
Espectrofotómetro o lector de placas

Control
Blanco y reacción sin inhibidor

Calidad
Controlar pH, tiempo y temperatura

Límite
Ausencia de metabolismo y barreras

ARTÍCULO DE INTERÉS

Elman et al. (1961)
Determinación colorimétrica de acetilcolinesterasa.
Escanea el QR para consultar la fuente.

APLICACIONES EN DIVERSAS ÁREAS

Bioquímica | Farmacología | Toxicología | Docencia | 3R

REFERENCIAS

1. Elman GL et al. A new and rapid colorimetric determination of acetylcholinesterase activity. Biochem Pharmacol. 1961;7:88-95. PMID:13720018.
2. Ingleset et al. Quantitative high-throughput screening: A titration-based approach. Proc Natl Acad Sci USA. 2006;103:11473-8. doi:10.1073/pnas.0604480103.
3. Mosmann T. Rapid colorimetric assay for cellular growth and survival: A tetrazolium method. J Biol Chem. 1983;258:5600-5606. PMID:6200058.

Ensayos bioquímicos libres de células

MODELADO QSAR



INFORMACIÓN GENERAL

NOMBRE COMÚN
Relaciones cuantitativas estructura-actividad.

TIPO DE ALTERNATIVA
Método in silico de predicción.

BASE CIENTÍFICA
Asocia descriptores moleculares y efectos medidos.

ENFOQUES
Regresión, clasificación y aprendizaje automático.

CARACTERÍSTICAS
Requiere datos trazables y dominio de aplicación.

USOS EN INVESTIGACIÓN Y DOCENCIA

TOXICIDAD
Estimar peligros definidos.

QUÍMICA
Relacionar estructura y actividad.

PRIORIZACIÓN
Seleccionar compuestos para ensayos.

SEGURIDAD
Integrar evidencia de diferentes fuentes.

DATOS HISTÓRICOS
Reutilizar resultados documentados.

DISEÑO
Explorar cambios de estructura.

DOCENCIA
Enseñar validación e incertidumbre.

BIOTERIO Y 3R
Evitar ensayos redundantes cuando procede.

IMPORTANCIA EN LA INVESTIGACIÓN

Ayuda a seleccionar sustancias y completar información cuando el modelo es adecuado para el propósito. Los datos históricos de roedores deben identificarse por especie y ensayo. La extracción fuera del dominio aumenta la incertidumbre y requiere evidencia adicional.

DATOS GENERALES

Estimulo
Estructuras y resultados conocidos

Resultado
Propiedad o actividad predicha

Modelo / material
Descriptores moleculares

Equipos
Conjunto externo de validación

Control
Error, sensibilidad y especificidad

Calidad
Dominio de aplicación explícito

Límite
No demuestra causalidad biológica

ARTÍCULO DE INTERÉS

Artículo de investigación (2024)
Análisis del dominio de aplicación en modelos QSAR.
Escanea el QR para consultar la fuente.

APLICACIONES EN DIVERSAS ÁREAS

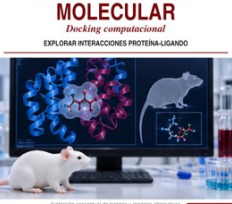
Química | Toxicología | Bioinformática | Validación | 3R

REFERENCIAS

1. Reinhardt T. QSAR models. In: QSAR models. 2024. PMID:3831144.
2. OECD. QSAR Assessment Framework, Second edition. 2024. doi:10.1787/9789264043400-en.
3. May A, et al. DeepChem: Toxicity Prediction using Deep Learning. Front Environ Sci. 2016;4:30. doi:10.3389/fenv.2015.00080.

Modelado QSAR

ACOPLAMIENTO MOLECULAR



INFORMACIÓN GENERAL

NOMBRE COMÚN
Acoplamiento molecular o docking.

TIPO DE ALTERNATIVA
Método in silico de cribado estructural.

BASE CIENTÍFICA
Busca poses compatibles en un sitio de unión.

ENFOQUES
Preparación de estructuras, limpieza y puntuación.

CARACTERÍSTICAS
Las puntuaciones orientan; no prueban eficacia.

USOS EN INVESTIGACIÓN Y DOCENCIA

FÁRMACOS
Proponer moléculas candidatas.

MECANISMOS
Explorar contactos con la diana.

SELECTIVIDAD
Comparar proteínas relacionadas.

TOXICOLOGÍA
Plantear posibles interacciones.

OPTIMIZACIÓN
Orientar cambios en ligandos.

COMPARACIÓN
Revisar diferencias entre especies.

DOCENCIA
Visualizar estructura y reconocimiento.

BIOTERIO Y 3R
Priorizar hipótesis antes de estudios in vivo.

IMPORTANCIA EN LA INVESTIGACIÓN

Permite formular hipótesis antes de ensayos celulares o animales. Al usar una proteína de rata o ratón se deben indicar especie, estructura y calidad. La flexibilidad, el agua y la preparación del sistema pueden cambiar las predicciones.

DATOS GENERALES

Estimulo
Proteína 3D y ligandos

Resultado
Poses y puntuaciones estimadas

Modelo / material
Sitio de unión definido

Equipos
Software y estructura curada

Control
Ligando conocido y acoplamiento

Calidad
Confirmación bioquímica posterior

Límite
Puntuación no equivale a afinidad

ARTÍCULO DE INTERÉS

Warren GL et al. (2006)
Evaluación crítica de programas de docking.
Escanea el QR para consultar la fuente.

APLICACIONES EN DIVERSAS ÁREAS

Bioinformática | Farmacología | Química | Estructura | 3R

REFERENCIAS

1. Warren GL et al. A critical assessment of docking programs and scoring functions. J Mol Chem. 2006;49:3023-30. doi:10.1021/jm060000a.
2. Ingleset et al. Quantitative high-throughput screening: A titration-based approach. Proc Natl Acad Sci USA. 2006;103:11473-8. doi:10.1073/pnas.0604480103.
3. OECD. QSAR Assessment Framework, Second edition. 2024. doi:10.1787/9789264043400-en.

Acoplamiento molecular

CRIBADO DE ALTO RENDIMIENTO



INFORMACIÓN GENERAL

NOMBRE COMÚN
Cribado automatizado de alto rendimiento.

TIPO DE ALTERNATIVA
Método in vitro o bioquímico, según ensayo.

BASE CIENTÍFICA
Ministración y lectura de respuestas biológicas.

ENFOQUES
HTS de una concentración; qHTS con curvas.

CARACTERÍSTICAS
Automatización, trazabilidad y controles de calidad.

USOS EN INVESTIGACIÓN Y DOCENCIA

DESCUBRIMIENTO
Detectar moléculas activas.

TOXICOLOGÍA
Comparar perfiles celulares.

VÍAS CELULARES
Identificar moduladores de señalización.

ENZIMAS
Cribar inhibidores o activadores.

POTENCIA
Estimar concentraciones de efecto.

DATOS
Organizar grandes bibliotecas.

DOCENCIA
Analizar calidad y reproducibilidad.

BIOTERIO Y 3R
Reservar estudios animales para hipótesis sólidas.

IMPORTANCIA EN LA INVESTIGACIÓN

Permite concentrar la investigación en candidatos con actividad reproducible. Puede usar células humanas o de roedores y ensayos sin células. Los hallazgos iniciales necesitan confirmación para descartar señales esporádicas antes de avanzar a estudios más complejos.

DATOS GENERALES

Estimulo
Biblioteca de compuestos y ensayo

Resultado
Candidatos y curvas de respuesta

Modelo / material
Microplacas de múltiples pozos

Equipos
Robótica y lector automatizado

Control
Controles en cada placa

Calidad
Confirmación de actividad independiente

Límite
Falsos positivos e interferencias

ARTÍCULO DE INTERÉS

Ingleset et al. (2006)
Cribado cuantitativo mediante curvas de concentración.
Escanea el QR para consultar la fuente.

APLICACIONES EN DIVERSAS ÁREAS

Farmacología | Automatización | Toxicología | Datos | 3R

REFERENCIAS

1. Ingleset et al. Quantitative high-throughput screening: A titration-based approach. Proc Natl Acad Sci USA. 2006;103:11473-8. doi:10.1073/pnas.0604480103.
2. Ait M, et al. Quantitative high-throughput screening using quantitative high-throughput screening. Biochem Biophys Res Commun. 2008;369:100-105.
3. Elman GL et al. A new and rapid colorimetric determination of acetylcholinesterase activity. Biochem Pharmacol. 1961;7:88-95. PMID:13720018.

Cribado de alto rendimiento

Métodos alternativos en las investigaciones biomédicas

Evidencia científica
para apoyar las 3R

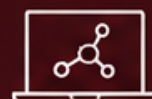
- ◆ Ensayos *in vitro*
- ◆ Bioquímica
- ◆ Modelado QSAR
- ◆ Acoplamiento molecular
- ◆ Cribado automatizado



MÉTODOS ALTERNATIVOS



In vitro



In silico



Bioquímica



3R



MÉTODOS IN CHEMICO

Ensayos moleculares y químicos

REACTIVIDAD QUÍMICA SIN CÉLULAS VIVAS



IMPORTANCIA EN LA INVESTIGACIÓN

En sensibilización cutánea, examinan reactividad asociada al inicio del proceso. Aportan evidencia para estrategias que evitan o reducen ensayos animales. Por sí solos no reproducen absorción, metabolismo ni la respuesta inmune completa.



DATOS GENERALES

	Sistema	Sin células vivas
	Ejemplo	EASA de 96 pozos
	Reactivos EASA	Sondas NBT y PDA
	Lectura EASA	Absorbancia y fluorescencia
	Controles	Blancos y referencias
	Interferencias	Color, fluorescencia y solubilidad
	Complemento	Datos celulares y computacionales

• APLICACIONES EN DIVERSAS ÁREAS •



Química



Toxicología



Alergología



Metrología



3R



REFERENCIAS

- Petersen EJ, et al. Development of a 96-Well Electrophilic Allergen Screening Assay for Skin Sensitization Using a Measurement Science Approach. *Toxics*. 2022;10:257. doi:10.3390/toxics10050257.
- OECD. Test No. 442C: In Chemico Skin Sensitisation. 2026. doi:10.1787/9789264229709-en.
- OECD. Guideline No. 497: Defined Approaches on Skin Sensitisation. 2026. doi:10.1787/b92879a4-en.



INFORMACIÓN GENERAL



NOMBRE COMÚN

Ensayos *in chemico*.



TIPO DE ALTERNATIVA

Reacciones químicas en sistemas acelulares.



BASE CIENTÍFICA

Interacción con péptidos o moléculas modelo.



EJEMPLO DEL ARTÍCULO

EASA: cribado de alérgenos electrófilos.



CARACTERÍSTICAS

Formato de 96 pozos; controles; lectura instrumental.



USOS FUNDAMENTALES EN LA INVESTIGACIÓN



SENSIBILIZACIÓN CUTÁNEA

Evaluación de reactividad química.



UNIÓN A PROTEÍNAS

Aproximación al evento molecular inicial.



CRIBADO DE SUSTANCIAS

Comparación de múltiples compuestos.



DPRA Y ADRA

Reactividad con péptidos o derivados de aminoácidos.



kDPRA

Información cinética para subclasificación.



CALIDAD ANALÍTICA

Detección de sesgos e interferencias.



ENFOQUES DEFINIDOS

Integración con otras fuentes de información.



DESARROLLO DE MÉTODOS

Mejora de robustez y reproducibilidad.



ARTÍCULO DE INTERÉS



Petersen et al. (2022)

Ensayo EASA de 96 pozos para sensibilización cutánea.

Escanea el QR para consultar la fuente.
doi:10.3390/toxics10050257

ENSAYOS DE CITOTOXICIDAD IN VITRO

Cultivos celulares

EVALUAR DAÑO CELULAR PARA APOYAR LAS 3R



Ilustración conceptual de bioterio y modelos alternativos

IMPORTANCIA EN LA INVESTIGACIÓN

Permiten detectar efectos celulares antes de planear estudios con roedores. Las líneas establecidas pueden evitar nuevos animales para esa etapa. Una señal metabólica no demuestra por sí sola muerte celular; conviene combinar indicadores independientes.

APLICACIONES EN DIVERSAS ÁREAS

Toxicología | Farmacología | Cultivo celular | Bioética | 3R

REFERENCIAS

1. Mosmann T. Rapid colorimetric assay for cellular growth and survival. J Immunol Methods. 1983;65:55-63. doi:10.1016/0022-1759(83)90303-4.
2. Xia M, et al. Compound cytotoxicity profiling using quantitative high-throughput screening. Environ Health Perspect. 2008. PMID:PMC2265061.
3. Inglese J, et al. Quantitative high-throughput screening: a titration-based approach. Proc Natl Acad Sci USA. 2006;103:11473-8. doi:10.1073/pnas.0604348103.

INFORMACIÓN GENERAL



NOMBRE COMÚN

Citotoxicidad en células cultivadas.



TIPO DE ALTERNATIVA

Método in vitro; reemplazo parcial según objetivo.



BASE CIENTÍFICA

Viabilidad, integridad de membrana y actividad metabólica.



ENFOQUES

MTT, ATP, liberación de LDH y microscopía.



CARACTERÍSTICAS

Comparación de concentraciones con controles y réplicas.

USOS EN INVESTIGACIÓN Y DOCENCIA



TOXICOLOGÍA

Detectar daño celular inicial.



FARMACOLOGÍA

Comparar concentraciones y respuestas.



BIOMATERIALES

Examinar compatibilidad celular.



ONCOLOGÍA

Explorar sensibilidad de células tumorales.



MECANISMOS

Distinguir metabolismo y membrana.



PRIORIZACIÓN

Seleccionar sustancias para más estudios.



DOCENCIA

Enseñar controles y curvas de respuesta.



BIOTERIO Y 3R

Justificar estudios posteriores con evidencia.

DATOS GENERALES

Entrada	Células y sustancia de prueba
Resultado	Viabilidad relativa o curva de respuesta
Modelo / material	Líneas de ratón, rata o humanas
Equipo	Lector de placas y microscopio
Control	Blanco, vehículo y control positivo
Calidad	Verificar interferencias del compuesto
Límite	No reproduce la respuesta sistémica

ARTÍCULO DE INTERÉS



Mosmann (1983)
Ensayo colorimétrico de crecimiento y supervivencia celular.

Escanea el QR para consultar la fuente.

ENSAYOS BIOQUÍMICOS LIBRES DE CÉLULAS

Sistemas acelulares

ESTUDIAR DIANAS SIN ORGANISMOS COMPLETOS



Ilustración conceptual de bioterio y modelos alternativos

IMPORTANCIA EN LA INVESTIGACIÓN

Aíslan una reacción para estudiar cómo actúa un compuesto. Las proteínas recombinantes pueden evitar la obtención repetida de tejidos de roedores. El origen de los reactivos determina cuánto reemplazo se logra; no equivalen a una respuesta en un animal.

APLICACIONES EN DIVERSAS ÁREAS

Bioquímica | Farmacología | Toxicología | Docencia | 3R

REFERENCIAS

1. Ellman GL, et al. A new and rapid colorimetric determination of acetylcholinesterase activity. *Biochem Pharmacol.* 1961;7:88-95. PMID:13726518.
2. Inglese J, et al. Quantitative high-throughput screening: a titration-based approach. *Proc Natl Acad Sci USA.* 2006;103:11473-8. doi:10.1073/pnas.0604348103.
3. Warren GL, et al. A critical assessment of docking programs and scoring functions. *J Med Chem.* 2006;49:5912-31. doi:10.1021/jm050362n.

INFORMACIÓN GENERAL



NOMBRE COMÚN

Ensayos enzimáticos y de unión molecular.



TIPO DE ALTERNATIVA

Método in chemico o bioquímico acelular.



BASE CIENTÍFICA

Reacciones entre enzimas, sustratos y ligandos.



ENFOQUES

Colorimetría, fluorescencia y luminiscencia.



CARACTERÍSTICAS

Condiciones controladas; controles de señal e interferencia.

USOS EN INVESTIGACIÓN Y DOCENCIA



ENZIMOLOGÍA

Medir actividad catalítica.



FÁRMACOS

Identificar inhibidores candidatos.



NEUROTOXICOLOGÍA

Estudiar acetilcolinesterasa.



MECANISMOS

Relacionar concentración y actividad.



CRIBADO

Evaluar bibliotecas de moléculas.



CONFIRMACIÓN

Repetir con otro método de detección.



DOCENCIA

Demostrar cinética y controles.



BIOTERIO Y 3R

Disminuir demanda de tejidos frescos.

DATOS GENERALES

Entrada	Enzima o proteína y compuesto
Resultado	Actividad o porcentaje de inhibición
Modelo / material	Reactivos purificados o recombinantes
Equipo	Espectrofotómetro o lector de placas
Control	Blanco y reacción sin inhibidor
Calidad	Controlar pH, tiempo y temperatura
Límite	Ausencia de metabolismo y barreras

ARTÍCULO DE INTERÉS



Ellman et al. (1961)
Determinación colorimétrica de acetilcolinesterasa.

Escanea el QR para consultar la fuente.

MODELADO QSAR

Relación estructura-actividad

PREDECIR PROPIEDADES CON DATOS QUÍMICOS

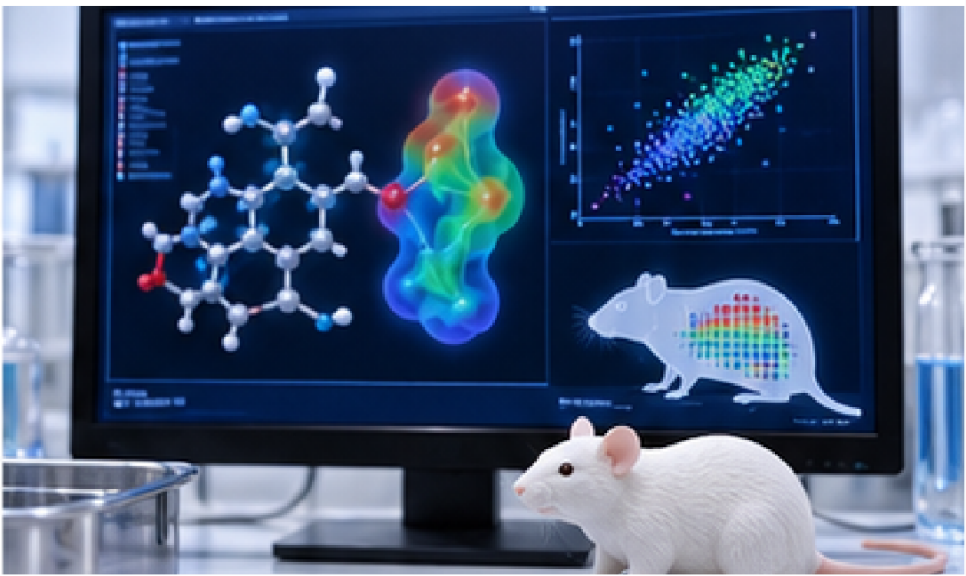


Ilustración conceptual de bioterio y modelos alternativos

IMPORTANCIA EN LA INVESTIGACIÓN

Ayuda a seleccionar sustancias y completar información cuando el modelo es adecuado para el propósito. Los datos históricos de roedores deben identificarse por especie y ensayo. La extrapolación fuera del dominio aumenta la incertidumbre y requiere evidencia adicional.

APLICACIONES EN DIVERSAS ÁREAS

Química | Toxicología | Bioinformática | Validación | 3R

REFERENCIAS

1. Rethinking the applicability domain analysis in QSAR models. 2024. PMID:38351144.
2. OECD. (Q)SAR Assessment Framework. Second edition. 2024. doi:10.1787/bbdac345-en.
3. Mayr A, et al. DeepTox: Toxicity Prediction using Deep Learning. Front Environ Sci. 2016;3:80. doi:10.3389/fenvs.2015.00080.

INFORMACIÓN GENERAL



NOMBRE COMÚN

Relaciones cuantitativas estructura-actividad.



TIPO DE ALTERNATIVA

Método in silico de predicción.



BASE CIENTÍFICA

Asocia descriptores moleculares y efectos medidos.



ENFOQUES

Regresión, clasificación y aprendizaje automático.



CARACTERÍSTICAS

Requiere datos trazables y dominio de aplicación.

USOS EN INVESTIGACIÓN Y DOCENCIA



TOXICIDAD

Estimar peligros definidos.



QUÍMICA

Relacionar estructura y actividad.



PRIORIZACIÓN

Seleccionar compuestos para ensayos.



SEGURIDAD

Integrar evidencia de diferentes fuentes.



DATOS HISTÓRICOS

Reutilizar resultados documentados.



DISEÑO

Explorar cambios de estructura.



DOCENCIA

Enseñar validación e incertidumbre.



BIOTERIO Y 3R

Evitar ensayos redundantes cuando procede.

DATOS GENERALES

Entrada	Estructuras y resultados conocidos
Resultado	Propiedad o actividad predicha
Modelo / material	Descriptores moleculares
Equipo	Conjunto externo de validación
Control	Error, sensibilidad y especificidad
Calidad	Dominio de aplicación explícito
Límite	No demuestra causalidad biológica

ARTÍCULO DE INTERÉS



Artículo de investigación (2024)
Análisis del dominio de aplicación
en modelos QSAR.

Escanea el QR para consultar la fuente.

ACOPLAMIENTO MOLECULAR

Docking computacional

EXPLORAR INTERACCIONES PROTEÍNA-LIGANDO



Ilustración conceptual de bioterio y modelos alternativos

IMPORTANCIA EN LA INVESTIGACIÓN

Permite formular hipótesis antes de ensayos celulares o animales. Al usar una proteína de rata o ratón se deben indicar especie, estructura y calidad. La flexibilidad, el agua y la preparación del sistema pueden cambiar las predicciones.

APLICACIONES EN DIVERSAS ÁREAS

Bioinformática | Farmacología | Química | Estructura | 3R

REFERENCIAS

1. Warren GL, et al. A critical assessment of docking programs and scoring functions. J Med Chem. 2006;49:5912-31. doi:10.1021/jm050362n.
2. Ellman GL, et al. A new and rapid colorimetric determination of acetylcholinesterase activity. Biochem Pharmacol. 1961;7:88-95. PMID:13726518.
3. OECD. (Q)SAR Assessment Framework. Second edition. 2024. doi:10.1787/bbdac345-en.

INFORMACIÓN GENERAL



NOMBRE COMÚN

Acoplamiento molecular o docking.



TIPO DE ALTERNATIVA

Método in silico de cribado estructural.



BASE CIENTÍFICA

Busca poses compatibles en un sitio de unión.



ENFOQUES

Preparación de estructuras, búsqueda y puntuación.



CARACTERÍSTICAS

Las puntuaciones orientan; no prueban eficacia.

USOS EN INVESTIGACIÓN Y DOCENCIA



FÁRMACOS

Proponer moléculas candidatas.



MECANISMOS

Explorar contactos con la diana.



SELECTIVIDAD

Comparar proteínas relacionadas.



TOXICOLOGÍA

Plantear posibles interacciones.



OPTIMIZACIÓN

Orientar cambios en ligandos.



COMPARACIÓN

Revisar diferencias entre especies.



DOCENCIA

Visualizar estructura y reconocimiento.



BIOTERIO Y 3R

Priorizar hipótesis antes de estudios in vivo.

DATOS GENERALES

Entrada	Proteína 3D y ligandos
Resultado	Poses y puntuaciones estimadas
Modelo / material	Sitio de unión definido
Equipo	Software y estructura curada
Control	Ligando conocido y reacoplamiento
Calidad	Confirmación bioquímica posterior
Límite	Puntuación no equivale a afinidad

ARTÍCULO DE INTERÉS



Warren et al. (2006)
Evaluación crítica de programas de docking.

Escanea el QR para consultar la fuente.

CRIBADO DE ALTO RENDIMIENTO

HTS y qHTS

EVALUAR MUCHOS COMPUESTOS DE FORMA SISTEMÁTICA



Ilustración conceptual de bioterio y modelos alternativos

IMPORTANCIA EN LA INVESTIGACIÓN

Permite concentrar la investigación en candidatos con actividad reproducible. Puede usar células humanas o de roedores y ensayos sin células. Los hallazgos iniciales necesitan confirmación para descartar señales espurias antes de avanzar a estudios más complejos.

APLICACIONES EN DIVERSAS ÁREAS

Farmacología | Automatización | Toxicología | Datos | 3R

REFERENCIAS

1. Inglesse J, et al. Quantitative high-throughput screening: a titration-based approach. Proc Natl Acad Sci USA. 2006;103:11473-8. doi:10.1073/pnas.0604348103.
2. Xia M, et al. Compound cytotoxicity profiling using quantitative high-throughput screening. Environ Health Perspect. 2008. PMID:PMC2265061.
3. Ellman GL, et al. A new and rapid colorimetric determination of acetylcholinesterase activity. Biochem Pharmacol. 1961;7:88-95. PMID:13726518.

INFORMACIÓN GENERAL



NOMBRE COMÚN

Cribado automatizado de alto rendimiento.



TIPO DE ALTERNATIVA

Método in vitro o bioquímico, según ensayo.



BASE CIENTÍFICA

Miniaturización y lectura de respuestas biológicas.



ENFOQUES

HTS de una concentración; qHTS con curvas.



CARACTERÍSTICAS

Automatización, trazabilidad y controles de calidad.

USOS EN INVESTIGACIÓN Y DOCENCIA



DESCUBRIMIENTO

Detectar moléculas activas.



TOXICOLOGÍA

Comparar perfiles celulares.



VÍAS CELULARES

Identificar moduladores de señalización.



ENZIMAS

Cribar inhibidores o activadores.



POTENCIA

Estimar concentraciones de efecto.



DATOS

Organizar grandes bibliotecas.



DOCENCIA

Analizar calidad y reproducibilidad.



BIOTERIO Y 3R

Reservar estudios animales para hipótesis sólidas.

ARTÍCULO DE INTERÉS



Inglesse et al. (2006)
Cribado cuantitativo mediante curvas de concentración.

Escanea el QR para consultar la fuente.