

INFORME CIENTIFICO DE BECA

Legajo N°:

BECA DE Estudio **PERIODO** 31/8/2011 al 13/02/2012

1. APELLIDO: Díaz Compañy

NOMBRES: Andrés Carlos Daniel

Dirección Particular: Calle: **N°:**

Localidad: Bahía Blanca **CP:** 8000 **Tel:**

Dirección electrónica (donde desea recibir información):
andresdiazcompany@bvconline.com.ar

2. TEMA DE INVESTIGACIÓN (Debe adjuntarse copia del plan de actividades presentado con la solicitud de Beca)

Liberación controlada de fármacos: estudios de adsorción en materiales mesoporosos

3. OTROS DATOS (Completar lo que corresponda)

BECA DE ESTUDIO: 1º AÑO: Fecha de iniciación: 1/4/2010

2º AÑO: Fecha de iniciación: 1/4/2011

BECA DE PERFECCIONAMIENTO: 1º AÑO: Fecha de iniciación: 1/4/2012

2º AÑO: Fecha de iniciación:

4. INSTITUCIÓN DONDE DESARROLLA LOS TRABAJOS

Universidad y/o Centro: Universidad Nacional del Sur

Facultad:

Departamento: Física

Cátedra:

Otros:

Dirección: Calle: Av.Alem **N°:** 1253

Localidad: Bahía Blanca **CP:** 8000 **Tel:** 291-4595141

5. DIRECTOR DE BECA

Apellido y Nombres: Simonetti Sandra Isabel

Dirección Particular: Calle: **N°:**

Localidad: Bahía Blanca **CP:** 8000 **Tel:**

Dirección electrónica: ssimonet@uns.edu.ar

6. EXPOSICIÓN SINTÉTICA DE LA LABOR DESARROLLADA EN EL PERIODO. (Debe exponerse la orientación impuesta a los trabajos, técnicas empleadas, métodos, etc., y dificultades encontradas en el desarrollo de los mismos, en el plano científico y material).

1. Se realizó una actualización bibliográfica sobre el sistema a estudiar: Adsorción de la molécula de cisplatino $\text{cis-[PtCl}_2(\text{NH}_3)_2]$ y sus complejos $\text{cis-[PtCl(NH}_3)_2]^+$ and $\text{cis-[Pt(NH}_3)_2]^{2+}$, sobre una superficie hidratada de $\text{SiO}_2(111)$ funcionalizada con CN.

2. Se realizó la adaptación del método computacional y de los archivos correspondientes. Se diseñaron y optimizaron los clusters a implementar.

3. Se realizaron los cálculos y se obtuvieron las curvas (graficación) de energía correspondientes a los sistemas $\text{cis-[PtCl}_2(\text{NH}_3)_2]/\text{SiO}_2(111)\text{-CN}$, $\text{cis-[PtCl(NH}_3)_2]^+/\text{SiO}_2(111)\text{-CN}$ y $\text{cis-[Pt(NH}_3)_2]^{2+}/\text{SiO}_2(111)\text{-CN}$ y se determinó la posición más estable para la droga y sus complejos sobre la superficie.

4. Se realizaron cálculos de estructura electrónica y enlace químico para los sistemas estudiados $\text{cis-[PtCl}_2(\text{NH}_3)_2]/\text{SiO}_2(111)\text{-CN}$, $\text{cis-[PtCl(NH}_3)_2]^+/\text{SiO}_2(111)\text{-CN}$ y $\text{cis-[Pt(NH}_3)_2]^{2+}/\text{SiO}_2(111)\text{-CN}$.

5. Se analizaron todos los resultados obtenidos y se extrajeron las respectivas conclusiones.

6. Salieron publicados los trabajos "Theoretical study of the cisplatin adsorption on silica" en la revista Applied Surface Science (año 2011) y el trabajo "Effect of thiol-functionalized silica on cisplatin adsorption" en la revista Molecular Simulation (año 2012).

7. Se redactó un trabajo completo titulado "Modeling of CN-functionalized silica as vehicle for the delivery of the chemotherapeutic agent: cisplatin" que fue enviado a Applied Physics A, que fue aceptado y ya ha salido publicado en dicha revista.

8. Se publicaron cuatro trabajos en congresos con referato.

9. Se enviaron trabajos a los siguientes congresos, actualmente se encuentran en proceso de evaluación:

1. Computational simulation of a drug delivery system: $\text{cis-[PtCl}_2(\text{NH}_3)_2]$ / CN-
 $\text{SiO}_2(111)$

A. Díaz Compañy, G. Brizuela, S. Simonetti,
Multifunctional hybrid nanomaterials, Sorrento, Italia, 3-7 de Marzo de 2013.

2. Ciano-functionalized silica for cisplatin delivery

S. Simonetti, G. Brizuela, A. Díaz Compañy
8th International Mesosstructured Materials Symposium-IMMS2013, Awaji island,
Hyogo, Japan 20-24 de Mayo de 2013.

3. Theoretical study of thiol-silica-cisplatin interactions

A. Díaz Compañy, S. Simonetti
1st International Porous and Powder Materials Symposium and Exhibition, PPM
2013, Izmir-Cesme Sheraton Hotel Resort & Spa, in Turkey, 3-6 de Septiembre de
2013.

10. Simultáneamente con la realización de las tareas de investigación antes enunciadas, en este período se cursaron tres materias correspondientes al Doctorado

en Ciencia y Tecnología de los Materiales, y se rindieron sus correspondientes finales. En total se aprobaron diez materias, cumplimentando la totalidad de las materias requeridas para el doctorado.

No hemos encontrado dificultades en el desarrollo de las actividades, ni en el plano científico ni en el plano material.

7. TRABAJOS DE INVESTIGACIÓN REALIZADOS O PUBLICADOS EN EL PERIODO.

7.1. PUBLICACIONES. Debe hacerse referencia, exclusivamente a aquellas publicaciones en la cual se halla hecho explícita mención de su calidad de Becario de la CIC. (Ver instructivo para la publicación de trabajos, comunicaciones, tesis, etc.). Toda publicación donde no figure dicha aclaración no debe ser adjuntada. Indicar el nombre de los autores de cada trabajo, en el mismo orden que aparecen en la publicación, informe o memoria técnica, donde fue publicado, volumen, página y año si corresponde; asignándole a cada uno un número. En cada trabajo que el investigador presente -si lo considerase de importancia- agregará una nota justificando el mismo y su grado de participación.

1. Theoretical study of the cisplatin adsorption on silica
S. Simonetti, A. Díaz Compañy, G. Brizuela, A. Juan
Applied Surface Science 258 (2011) 1052–1057
2. Effect of thiol-functionalized silica on cisplatin adsorption
A. Díaz Compañy, A. Juan, G. Brizuela, S. Simonetti
Molecular Simulation 38 (13) (2012) 1055-1060
3. Modeling of CN-functionalized silica as vehicle for the delivery of the chemotherapeutic agent: cisplatin
S. Simonetti, A. Díaz Compañy, G. Brizuela, A. Juan
Applied Physics A 109 (1) (2012) 63-68

7.2. PUBLICACIONES EN PRENSA. (Aceptados para su publicación. Acompañar copia de cada uno de los trabajos y comprobante de aceptación, indicando lugar a que ha sido remitido. Ver punto 7.1.)

7.3. PUBLICACIONES ENVIADAS Y AUN NO ACEPTADAS PARA SU PUBLICACIÓN. (Adjuntar copia de cada uno de los trabajos. Ver punto 7.1.)

7.4. PUBLICACIONES TERMINADAS Y AUN NO ENVIADAS PARA SU PUBLICACIÓN. (Adjuntar resúmenes de no más de 200 palabras)

7.5. COMUNICACIONES. (No consignar los trabajos anotados en los subtítulos anteriores)

1. Computational study of SH-functionalized silica carrier for cisplatin delivery
S. Simonetti, A. Díaz Compañy, G. Brizuela, A. Juan
4th International Conference on Drug Discovery and Therapy" (4th ICDDT 2012)
Dubai, UAE, 12-15 de febrero de 2012.
2. Functional thiol-silica for carrier-supported of cis-platin's complexes:
computational study of the electronic structure and bonding
A. Díaz Compañy, A. Juan A., G. Brizuela, S. Simonetti
10th International Conference Solid State Chemistry, Pardubice, República Checa, 10-14
de Junio de 2012.

3. Modeling of catalytic cisplatin adsorption on surface CN-functionalized silica
S. Simonetti, A. Díaz Compañy, G. Brizuela, A. Juan
International Symposium on Chemical Reaction Engineering (ISCRE 22), Maastricht, Netherlands, 2-5 de Septiembre de 2012.
4. Liberación controlada de fármacos: Modelado Computacional de la adsorción de la droga cisplatino y sus complejos sobre una superficie hidratada de dióxido de silicio
S. Simonetti, A. Diaz Compañy, G. Brizuela, A. Juan
XXIX Congreso Argentino de Química, Mar del Plata, Argentina, 3-5 de octubre de 2012.

7.6. TRABAJOS EN REALIZACIÓN. (Indicar en forma breve el estado en que se encuentran)

Se desea estudiar el efecto en el proceso de adsorción de la posible funcionalización de la pared del material poroso, en función del fármaco que se quiere utilizar. Para ello se desea introducir modificaciones estructurales en los grupos terminales de la pared del poro mediante la incorporación de ciertos grupos en la estructura básica del absorbente. Las paredes de las matrices porosas se pueden funcionalizar con una amplia variedad de especies químicas y de este modo lograr modificar sus propiedades de adsorción.

Se está trabajando sobre la adsorción de cisplatino y sus complejos sobre la superficie hidratada de SiO₂(100) puro y funcionalizado con silanos de las especies químicas K, Mg, CH₃ y NH₂. Se están realizando los cálculos y obteniendo las curvas (graficación) de energía correspondientes y así poder determinar la posición más estable para la droga y sus complejos sobre la superficie.

8. OTROS TRABAJOS REALIZADOS. (Publicaciones de divulgación, textos, etc.)

8.1. DOCENCIA

8.2. DIVULGACIÓN

8.3. OTROS

9. ASISTENCIA A REUNIONES CIENTÍFICAS. (Se indicará la denominación, lugar y fecha de realización y títulos de los trabajos o comunicaciones presentadas)

10. CURSOS DE PERFECCIONAMIENTO, VIAJES DE ESTUDIO, ETC. (Señalar características del curso o motivo del viaje, duración, instituciones visitadas y si se realizó algún entrenamiento)

Materias de posgrado cursadas pertenecientes al Doctorado en Ciencia y Tecnología de los Materiales- PROMAT Categorizado "A" por la CONEAU

- Física Moderna. Nota final: 9 (nueve). Año 2010.
- Metodología de la Investigación Científica. Nota final: 9 (nueve). Año 2010.
- Química del Sólido. Nota final: 7 (siete). Año 2010.
- Materiales de Interés Farmacéutico y Biomédicos. Nota final: 10 (diez). Año 2011.
- Técnicas de Caracterización de Materiales. Nota final: 8 (ocho). Año 2011.
- Cálculos de Estructura Electrónica de Materiales Nanoestructurados. Nota final: 9 (nueve). Año 2011.
- Termodinámica de Sólidos Nota final: 8 (ocho). Año 2011.
- Estructura y Propiedades de los Materiales. Nota final: 8 (ocho). Año 2012.
- Técnicas de rayos x para la caracterización de Materiales. Nota final: 7 (siete). Año 2012.
- Disolución in vitro de formulaciones farmacéuticas. Nota final: 8 (ocho). Año 2012.

11. DISTINCIONES O PREMIOS OBTENIDOS EN EL PERIODO

12. TAREAS DOCENTES DESARROLLADAS EN EL PERIODO

13. OTROS ELEMENTOS DE JUICIO NO CONTEMPLADOS EN LOS TÍTULOS ANTERIORES (Bajo este punto se indicará todo lo que se considere de interés para la evaluación de la tarea cumplida en el período)

14. TÍTULO DEL PLAN DE TRABAJO A REALIZAR EN EL PERIODO DE PRORROGA O DE CAMBIO DE CATEGORÍA (Deberá indicarse claramente las acciones a desarrollar)
Liberación controlada de fármacos: estudios de adsorción en materiales mesoporosos

En esta etapa se desea estudiar otros planos compactos, como el $\text{SiO}_2(100)$, y analizar el efecto en el proceso de adsorción de la posible funcionalización de la pared del poro del material mesoporoso, en función del fármaco que se quiere utilizar. Para ello se requiere introducir modificaciones estructurales en los grupos terminales de la pared del poro mediante la incorporación de ciertos grupos en la estructura básica de los absorbentes. Las paredes de las matrices mesoporosas se pueden funcionalizar con una amplia variedad de especies químicas y de este modo lograr modificar sus propiedades de adsorción. Se continuará con el estudio de la adsorción de la molécula cisplatino. Se funcionalizará la pared del poro con silanos de especies químicas como SO_3 , NH_2 , CH_2 , K, Ca, otras.

Condiciones de Presentación

- A. El Informe Científico deberá presentarse dentro de una carpeta, con la documentación abrochada y en cuyo rótulo figure el Apellido y Nombre del Becario, la que deberá incluir:
- Una copia en papel A-4 (puntos 1 al 14).
 - Las copias de publicaciones y toda otra documentación respaldatoria, deben agregarse al término del desarrollo del informe
 - Informe del Director de tareas con la opinión del desarrollo del becario (en sobre cerrado).

Nota: El Becario que desee ser considerado a los fines de una prórroga, deberá solicitarlo en el formulario correspondiente, en los períodos que se establezcan en los cronogramas anuales.

.....
Firma del Director

.....
Firma del Becario