

## **INFORME CIENTIFICO DE BECA**

Legajo N°:

**BECA DE** Perfeccionamiento

**PERIODO** 01/02/2013 al 17/02/2014

**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: 1/4/2013

**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  $\text{cis-[PtCl(NH}_3)_2]^+$  y  $\text{cis-[Pt(NH}_3)_2]^{2+}$ , sobre una superficie hidratada de  $\text{SiO}_2(100)$  sin modificar y funcionalizada.

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

3. Se realizaron los cálculos y se obtuvieron las curvas (graficación) de energía correspondientes a los sistemas  $\text{cis-[PtCl}_2(\text{NH}_3)_2]/\text{SiO}_2(100)$ ,  $\text{cis-[PtCl(NH}_3)_2]^+/\text{SiO}_2(100)$  y  $\text{cis-[Pt(NH}_3)_2]^{2+}/\text{SiO}_2(100)$  y se determinó la posición más estable para la droga y sus complejos sobre la superficie sin funcionalizar y modificada con las especies químicas K, Mg, CH<sub>3</sub> y NH<sub>2</sub>. Se compararon los distintos sistemas.

4. Se realizaron cálculos de estructura electrónica y enlace químico para los sistemas estudiados  $\text{cis-[PtCl}_2(\text{NH}_3)_2]/\text{SiO}_2(100)$ ,  $\text{cis-[PtCl(NH}_3)_2]^+/\text{SiO}_2(100)$  y  $\text{cis-[Pt(NH}_3)_2]^{2+}/\text{SiO}_2(100)$  sin funcionalizar y para la superficie funcionalizada con NH<sub>2</sub> (superficie óptima).

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

6. Se redactó un trabajo completo titulado "Study of  $\text{cis-[PtCl}_2(\text{NH}_3)_2]$  hydrolysis on functionalized  $\text{SiO}_2(100)$  surfaces" que fue publicado en la revista Journal of Solid State Physic (con referato).

8. Se publicaron tres trabajos en congresos con referato y se presentó el trabajo de tesis en el Primer Congreso Internacional Científico y Tecnológico de la Provincia de Buenos Aires (CIC), La Plata.

9. Por el momento, se enviaron tres trabajos a los siguientes congresos a celebrarse en el año 2014:

1. Cisplatin hydrolysis on promoted- $\text{SiO}_2(100)$  surfaces

A. Díaz Compañy, S. Simonetti

3rd International Conference and Exhibition on Materials Science & Engineering, San Antonio, USA, 06-08 de Octubre de 2014 (aceptado).

2. Advanced materials for drug delivery: bonding study of  $\text{cis-[PtCl}_2(\text{NH}_3)_2]$  hydrolysis on functionalised- $\text{SiO}_2(100)$  surfaces

A. Díaz Compañy, S. Simonetti

RSC Conference, Advancing the Chemical Science, Physical Chemistry of Functionalised Biomedical Nanoparticles, Bristol, UK, 17-19 de Septiembre de 2014, Bristol, UK (enviado).

3. Sílica funcionalizada como soporte de drogas: estudio de la hidrólisis del cisplatino

A. Díaz Compañy, G. Brizuela, S. Simonetti

XXIV Congreso Iberoamericano de Catálisis – CIGat 2014, Medellín, Colombia, 14-19 de septiembre 2014 (enviado).

10. Simultáneamente con la realización de las tareas de investigación, se cursaron la totalidad de las materias correspondientes al Doctorado en Ciencia y Tecnología de los Materiales, y se rindieron sus correspondientes finales. En total se aprobaron once materias.

11. Fue redactada la tesis doctoral, se presentó para su evaluación y su defensa se realizará en el mes de marzo próximo.

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. Study of cis-[PtCl<sub>2</sub>(NH<sub>3</sub>)<sub>2</sub>] hydrolysis on functionalized SiO<sub>2</sub>(100) surfaces  
A. Díaz Compañy, G. Brizuela, S. Simonetti  
Journal of Solid State Physics (2013), Article ID 363209, 10 pages  
<http://dx.doi.org/10.1155/2013/363209>

**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. 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, Turquía, 3-6 de Septiembre de 2013.
2. Computational simulation of a drug delivery system: cis-[PtCl<sub>2</sub>(NH<sub>3</sub>)<sub>2</sub>] / CN-SiO<sub>2</sub>(111)  
A. Díaz Compañy, S. Simonetti  
44th World Chemistry Congress-IUPAC 2013, Estambul, Turquía, 11-18 de Agosto de 2013.
3. 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.

4. Liberación controlada de fármacos: estudios de adsorción en material mesoporoso  
A. Díaz Compañy, S. Simonetti  
Primer Congreso Internacional Científico y Tecnológico de la Provincia de Buenos Aires, La Plata, Argentina, 19 y 20 de septiembre de 2013.

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

Se están realizando trabajos de índole teórico-experimental en colaboración con la Universidad de La Habana- Cuba sobre adsorción de las drogas aspirina, metronidazol y sulfametoxazol en la zeolita Clinoptilolita, natural y modificada. Se están realizando además trabajos de índole teórico-experimental en colaboración con la Universidad de La Plata- Argentina sobre adsorción de la droga cefalexina en la sílica mesoporosa SBA-15.

**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)

1. Liberación controlada de fármacos: estudios de adsorción en material mesoporoso  
A. Díaz Compañy, S. Simonetti  
Primer Congreso Internacional Científico y Tecnológico de la Provincia de Buenos Aires, La Plata, Argentina, 19 y 20 de septiembre de 2013.

**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.
- Surface science at the tribological interface. Nota final: 9 (nueve). Año 2013.

**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 PERÍODO DE PRORROGA O DE CAMBIO DE CATEGORÍA** (Deberá indicarse claramente las acciones a desarrollar)  
No corresponde

---

### 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:
- a. Una copia en papel A-4 (puntos 1 al 14).
  - b. Las copias de publicaciones y toda otra documentación respaldatoria, deben agregarse al término del desarrollo del informe
  - c. 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