

Instituto Oceanográfico  
Universidade de São Paulo (USP)  
Processo 2001/06921-3  
Vigência: 1/2/2002 a 31/3/2006

Propõe-se a formação de um centro emergente para o estudo da dinâmica e termodinâmica dos oceanos e suas conexões com a meteorologia, oceanografia biológica e química, utilizando dados globais de múltiplos sensores a bordo de satélites oceanográficos. O projeto examinará dados globais contendo a anomalia da altura, temperatura e vento na superfície do mar, concentração de clorofila e vapor integrado na atmosfera. Filtros digitais serão utilizados para separar as medidas originais em várias bandas do espectro espaço-temporal associadas a vários regimes dinâmicos. Este centro se caracteriza pela interdisciplinaridade. Isso fica evidente nos aspectos específicos dos quatro principais tópicos desta proposta. O primeiro deles é o estudo da interação oceano-atmosfera em várias escalas espaço-temporais. No segundo tópico, a influência de regimes dinâmicos e termodinâmicos na concentração de fitoplâncton é abordada utilizando uma metodologia semelhante à do primeiro tópico. A terceira parte trata de vários aspectos do balanço de calor e inclui estimativas do fluxo na superfície, do calor armazenado e do fluxo de calor de Ekman. O quarto tópico apresenta um método inovador para o cálculo do fluxo de CO<sub>2</sub> da atmosfera para o oceano devido à produção primária nova, baseado em dados de altímetro.

## QUÍMICA

459

### Organocatálise assimétrica: preparação de novos organocatalisadores e desenvolvimento de novas metodologias

Márcio Weber Paixão  
Centro de Ciências Exatas e de Tecnologia  
Universidade Federal de São Carlos (UFSCar)  
Processo 2009/07281-0  
Vigência: 1/11/2009 a 31/10/2013

Atualmente, é crescente o emprego de organocatalisadores para induzir estereosseletividade. A organocatálise, ou seja, o uso de moléculas orgânicas de baixo peso molecular para catalisar transformações orgânicas na ausência de metais, é uma ramificação da catálise assimétrica que tem se desenvolvido muito rapidamente nos últimos oito anos. As reações organocatalisadas são classificadas de acordo com os seus dois diferentes métodos de ativação: não covalente e covalente. Nesse contexto, a utilização de sais de amônio quirais para indução de assimetria, em condições catalíticas (CTF assimétrica), começou a receber atenção especial a partir da década de 1970. Atualmente, os catalisadores mais utilizados têm

sido os derivados do binol e de alcaloides da cinchona. Assim, pretendemos preparar novos organocatalisadores que incorporem em suas estruturas derivados de carboidratos e esteroides, em combinação com o alcaloide cinchona e alguns dos seus derivados. De posse dos catalisadores quirais de transferência de fase, pretendemos avaliar o desempenho dos mesmos em diversas reações visando à síntese de moléculas biologicamente ativas. Dentre elas, pode-se destacar a síntese de  $\alpha$ -aminoácidos,  $\gamma$ -lactamas e alcaloides quirais. De maneira similar, serão preparadas tioureias, selenoureias e derivados squaramídicos que incorporem em suas estruturas um núcleo quiral derivado de esteroides, os quais devem atuar como agentes responsáveis pela transferência da quiralidade ao substrato. Essas novas classes de organocatalisadores deverão ser testadas como mediadores quirais, em reações de adição conjugada de nucleófilos de carbono a acilfosfonatos  $\alpha,\beta$ -insaturados visando à síntese de lactonas e lactamas quirais. Adicionalmente, pretende-se empregar essa metodologia na síntese dos fármacos Baclofen e Pregabalina. Atualmente, é de grande interesse na área da catálise assimétrica o desenvolvimento de reações que possam ser realizadas em meio aquoso. A substituição de solventes orgânicos por água minimiza o impacto ambiental, além de ter baixo custo e apresentar menor periculosidade operacional. No entanto, o uso de água como solvente reacional nem sempre é eficiente, pois a água muitas vezes inibe a atividade do catalisador ou altera a enantiosseletividade. Por isso, o *design* apropriado da estrutura do catalisador deve ser encontrado, para que altos níveis de enantiosseletividade sejam atingidos. Com esse objetivo, pretende-se preparar novos organocatalisadores derivados do aminoácido L-prolina e, posteriormente, aplicá-los a reações de adições conjugadas de nitrometano e malonatos a olefinas deficientes de elétrons, tendo água como único solvente reacional. Deve-se salientar que os produtos obtidos por meio destas reações são de grande interesse da indústria farmacêutica, uma vez que ambos são intermediários-chaves para a síntese de vários fármacos. Pretende-se também testar a atividade biológica dos compostos sintetizados nesta proposta. Efetivamente, a avaliação da atividade biológica dos compostos que serão sintetizados neste projeto deverá ser feita no âmbito do Instituto Nacional de Biotecnologia Estrutural e Química Medicinal em Doenças Infecciosas (INBEQMeDI - INCT/CNPq).

460

### Biocatálise: uso de células vegetais e lipases em síntese orgânica – aplicação em síntese assimétrica de compostos com atividade biológica

Álvaro Takeo Omori  
Centro de Ciências Naturais e Humanas

Universidade Federal do ABC (UFABC)  
Processo 2009/00617-2  
Vigência: 1/9/2009 a 31/8/2013

Este projeto tem por finalidade a nucleação de uma linha de pesquisa em síntese orgânica e biocatálise junto ao Centro de Ciências Naturais e Humanas da Universidade Federal do ABC. O foco deste projeto está na aplicação de compostos enantiomericamente puros obtidos por métodos biocatalíticos na síntese total de moléculas de importância biológica. Os métodos biocatalíticos a serem empregados incluem o uso de vegetais em novos substratos e o emprego de lipases em reações de resolução de alcoóis e aminas. Alguns desses intermediários poderão ser aplicados na síntese de fármacos (Oseltamivir) e de produtos naturais, como a gabaculina e a epibatidina.

**461** **Preparação e caracterização de nanocatalisadores de AU, AUPT, AUPD e sua aplicação em reações de interesse na área de células a combustível e implantação da técnica espectroeletrouímica**

Elisete Aparecida Batista  
Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares (Ipen)  
Secretaria de Desenvolvimento  
Processo 2008/58715-7  
Vigência: 1/8/2009 a 31/7/2013

Este projeto visa à preparação e caracterização de nanocatalisadores suportados de ouro e bimetálicos contendo ouro (Au-Pi, Au-Pd), assim como à avaliação da atividade de tais catalisadores em reações de eletroxidação de pequenas moléculas como metanol e etanol. Para isso, serão testados diferentes métodos de síntese dos nanocatalisadores em diversos suportes (carbono e óxidos metálicos). Para a caracterização, serão utilizadas técnicas eletroquímicas TEM, EDX e outras que se façam necessárias. A atividade catalítica será testada por meio de medidas eletroquímicas em célula eletroquímica e na célula a combustível. A análise de produtos e intermediários de reações será feita com técnicas de cromatografia gasosa e espectroscopia no infravermelho *in situ*. Paralelamente a este estudo, propomos também a implantação da técnica de espectroscopia no infravermelho por reflexão/absorção *in situ*. A utilização de técnicas espectroeletrouímicas, adicionalmente às técnicas eletroquímicas convencionais, pode levar a um grande enriquecimento com relação às informações obtidas acerca dos processos que ocorrem na interface eletroquímica. Especialmente, as técnicas de espectroscopia vibracional podem fornecer informações em nível molecular da interface eletroquímica e permitem estudar tanto espécies efetivamente adsorvidas na superfície do eletrodo como em solução. A técnica será utilizada para

a realização de estudos fundamentais relacionados aos sistemas propostos na primeira parte deste projeto, como também será viabilizada a utilização pelos outros membros do grupo.

**462** **Triagem em larga escala de produtos de origem natural com atividade antitumoral em cultura de células de mamífero**

Márcia Regina Cominetti  
Centro de Ciências Exatas e de Tecnologia  
Universidade Federal de São Carlos (UFSCar)  
Processo 2008/56758-0  
Vigência: 1/1/2010 a 31/12/2013

Este projeto tem como objetivo realizar uma triagem em larga escala de compostos de origem natural com atividade antitumoral sobre células de mamífero, com o intuito de estabelecer novas moléculas que possam servir de modelo para o desenho de fármacos com potencial atividade contra a progressão tumoral e formação de metástases. Inicialmente, os testes serão realizados com amostras provenientes do Laboratório de Produtos Naturais do Departamento de Química, da Universidade Federal de São Carlos (LPN - DQ - UFSCar). Em um segundo momento, amostras provenientes dos diferentes laboratórios integrantes da Rede Biota de Bioprospecção e Bioensaios serão testadas quanto à sua atividade antitumoral nos diferentes ensaios já mencionados. Os compostos serão testados por comparação em linhagens celulares tumorais e normais quanto a seus efeitos sobre citotoxicidade, proliferação e adesão celular, indução de apoptose (morte celular programada), inibição de invasão e migração celular e por fim sobre seus efeitos na inibição da angiogênese (formação de novos vasos sanguíneos). A maioria dos ensaios será realizada de acordo com a metodologia desenvolvida pelo NCI-EUA (National Cancer Institute), de forma a permitir uma análise reprodutível e robusta dos compostos de interesse. Os resultados obtidos serão publicados em revistas internacionais indexadas. As moléculas avaliadas como potenciais compostos antitumorais, com atividade citotóxica, inibitória da adesão, proliferação, migração ou invasão celular, ou ainda moléculas indutoras de apoptose ou antiangiogênicas, serão analisadas quanto à possibilidade de submissão de patente(s), com colaboração do Núcleo de Propriedade Intelectual e Transferência de Tecnologia da UFSCar (NPfTT-UFSCar). Este estudo será desenvolvido no LPN-DQ-UFSCar e, embora o mesmo represente um centro já consolidado, este projeto visa à criação de uma nova linha de pesquisa neste departamento, qual seja, a biologia celular. Esta linha de pesquisa será aplicada de forma a verificar os efeitos de produtos de origem natural sobre células de mamífero de linhagens tumorais e normais por meio da elaboração de testes biológicos com triagem em larga escala. Dessa forma, o projeto contribui-