

rá sobremaneira para o conhecimento interdisciplinar na área, visto que poderá articular estudantes e pesquisadores de biologia celular e química orgânica.

463

### Síntese, caracterização e estudo das propriedades eletrônicas dos nanotubos de peptídeos e óxido de titânio

Wendel Andrade Alves

Centro de Ciências Naturais e Humanas

Universidade Federal do ABC (UFABC)

Processo 2008/53576-9

Vigência: 1/4/2009 a 31/3/2013

O presente projeto de pesquisa apresenta quatro objetivos relacionados: 1) síntese e caracterização de novos biomateriais do tipo nanotubos peptídicos ou nanofibras, a partir de reações de auto-organização; 2) preparação de nanotubos de óxido de titânio e comparações das características eletrônicas entre eles, isto é, nanotubos de  $TiO_2$  e peptídicos; 3) preparação de filmes nanocristalinos de óxido de titânio que servirão de suporte para os nanotubos de peptídeos; 4) funcionalização das superfícies desses novos biomateriais para imobilização de enzimas e dopagem com metais de transição e/ou compostos de coordenação. Este projeto tem característica teórico-experimental e os estudos de modelagem e de transporte eletrônico permitirão determinar os metais com o maior potencial para o desenvolvimento de aplicações analíticas.

464

### Filmes ultrafinos para a fabricação de biossensores e mimetização de biomembranas: aplicações na área ambiental e de saúde

Luciano Caseli

Universidade Federal de São Paulo (Unifesp)

Campus Diadema

Processo 2008/10851-0

Vigência: 1/4/2009 a 31/3/2013

Esse projeto visa à fabricação de três tipos de filmes ultrafinos organizados na escala molecular: os filmes auto-montados (ou filmes LbL, do inglês Layer-by-Layer), os filmes de Langmuir; e os filmes Langmuir-Blodgett (LB). Diversos materiais serão testados para serem imobilizados nas matrizes sólidas (LbL e LB), incluindo polímeros sintéticos, biopolímeros e lipídios. Assim, os filmes ultrafinos serão caracterizados e analisados visando à sua aplicabilidade como sensores de interesse ambiental, tecnológico ou biomédico. A utilização de filmes de Langmuir compostos de lipídios e outras moléculas de interesse biológico (proteínas, fármacos e pedaços de ácidos nucleicos) servirão como mimetizadores de biointerfaces, tais como vesículas e membranas celulares. Em suma, pretende-se instalar no recém-criado

*campus* de Diadema da Universidade Federal de São Paulo um centro de fabricação de filmes finos e química de interfaces, mediante a compra de uma cuba de Langmuir.

465

### Medindo a dinâmica química de líquidos por meio de espectroscopia ultrarrápida

Rene Alfonso Nome Silva

Instituto de Química

Universidade Estadual de Campinas (Unicamp)

Processo 2008/10593-0

Vigência: 1/4/ 2009 a 31/3/2013

Propõe-se implementar um equipamento de espectroscopia ultrarrápida e aplicá-lo ao estudo da dinâmica molecular de sistemas químicos em fases condensadas. Inicialmente, propõe-se a criação de infraestrutura para experimentos de espectroscopia resolvida no tempo, bem como a aquisição de um amplificador de pulsos de femtossegundos à base de titânio: safira. Essa fonte de luz será utilizada para a construção de vários equipamentos de espectroscopia não linear: 1) espectroscopia resolvida no tempo do efeito Kerr ótico (EKO); 2) amplificador paramétrico ótico; 3) técnicas de bombeio e prova, fluorescência resolvida no tempo e anisotropia da polarização. Na segunda parte do projeto, pretende-se aplicar o sistema acima descrito no estudo de processos químicos em fases condensadas. Utilizando a técnica EKO, estudar-se-ão misturas de dissulfeto de carbono com componentes do biodiesel, tais como estearato de etila e linoleato de metila e diesel. Em seguida, pretende-se medir espectros resolvidos no tempo associados a processos de transferência de carga (iodetos de piridínio) e de próton (piranina). O estudo desses sistemas em uma série de solventes permitirá investigar o papel do solvente nesses processos fundamentais. Os resultados serão analisados no domínio do tempo e da frequência com o objetivo de inferir as escalas de tempo fundamentais e os espectros de frequência das interações inter e intramoleculares relevantes.

466

### Dinâmica molecular de materiais iônicos híbridos para baterias de lítio

Leonardo José Amaral de Siqueira

Universidade Federal de São Paulo (Unifesp)

Campus Diadema

Processo 2008/08670-7

Vigência: 1/3/2009 a 28/2/2013

Líquidos iônicos são capazes de dissolver íons, por exemplo, sais de lítio, possibilitando sua aplicação como eletrólitos para baterias. Os eletrólitos formados pela dissolução de sais de lítio em líquidos iônicos possuem alta tendência de formar agregados iônicos, devido à forte interação do  $Li^+$  com os ânions. Esse efeito acarreta baixa

condutividade iônica do eletrólito, o que é indesejável para a aplicação em baterias. Portanto, novos materiais que possam diminuir a interação dos íons  $\text{Li}^+$  com os ânions são altamente desejados nesse contexto. Dessa forma, estamos propondo neste projeto simulação computacional de novos materiais que apresentem potencial para diminuir a formação dos agregados iônicos. Os novos materiais-alvo de estudo deste projeto envolvem líquidos iônicos cuja cadeia lateral nos cátions apresenta número variável de segmentos  $(-\text{CH}_2\text{CH}_2\text{O}-)_n$ , em que  $n=2,4$  ou  $6$ . A presença de átomos de oxigênio na cadeia lateral permitiria a interação com os cátions  $\text{Li}^+$ , o que diminuiria a formação dos agregados mencionados anteriormente. Nanocompósitos de argilas com poli(oxietileno), PEO, mostraram aumento de condutividade iônica à temperatura ambiente em relação ao eletrólito PEO/ $\text{LiBF}_4$ . Vislumbrando uma possível aplicação de sistemas híbridos formados por líquidos iônicos e argilas como eletrólitos para baterias, idealizamos a segunda parte desta proposta. A terceira parte deste projeto envolverá a proposição de modelos polarizáveis para líquidos iônicos a partir de dados de simulações *ab initio*. Os potenciais de interação serão obtidos pelo procedimento estudado pelo proponente durante seu estágio de pós-doutorado no grupo do prof. Paul A. Madden na University of Edinburgh.

467

### Síntese de novos fotossensibilizadores com potencial aplicação em terapia fotodinâmica

Kleber Thiago de Oliveira

Centro de Ciências Naturais e Humanas

Universidade Federal do ABC (UFABC)

Processo 2008/06619-4

Vigência: 1/6/2009 a 31/5/2013

A terapia fotodinâmica (TFD) tem ocupado um lugar de destaque dentre as terapias não invasivas desenvolvidas nos últimos anos. Baseada na combinação entre um fotossensibilizador e luz em comprimentos de onda adequados, a TFD tem possibilitado a cura de diversas doenças, principalmente alguns tipos de câncer. Sendo assim, neste projeto são propostas algumas sínteses de novos fotossensibilizadores visando contribuir para possíveis evoluções de compostos que sejam cada vez mais adequados ao uso em TFD. Em uma das frentes deste trabalho são propostas as sínteses de algumas clorinas via reação de Diels-Alder partindo da protoporfirina IX dimetil éster e anidrido maleico. Aos adutos obtidos deverá ser ligado um grupo espaçador (etililenoglicol), seguido de ácido 5-aminolevulínico (ALA), dentre outros substituintes sulfonados como derivados de sultona e taurina; nesse caso alguns modelos sintéticos já foram preparados com êxito. Na outra parte, são propostas sínteses totais de novas ftalocianinas ligadas a ALA dentre outros grupos hidrofílicos (ácido ascórbico

e açúcares) com o objetivo de obter compostos devidamente funcionalizados para uma melhor solubilidade e menor agregação desses compostos. Em ambas as sínteses (clorinas e ftalocianinas), espera-se obter um aumento das características apropriadas de um bom fotossensibilizador, destacando-se a possibilidade de se preparar compostos do tipo fotossensibilizador-ALA e também o surgimento de efeito sinérgico entre o fotossensibilizador e o ALA quando empregados em TFD. Este projeto, desenvolvendo novos macrociclos e metodologias sintéticas, constituirá um grande esforço para a consolidação de um grupo de síntese de macrociclos porfirínicos e ftalocianínicos. Dará suporte e terá a colaboração de docentes e pesquisadores do Departamento de Química da FFCLRP-USP e de outras instituições envolvidas em pesquisas relacionadas à TFD.

468

### Desenvolvimento de novos métodos sintéticos visando à preparação de substâncias bioativas

Guiliana César Clososki

Faculdade de Ciências Farmacêuticas de Ribeirão Preto

Universidade de São Paulo (USP)

Processo 2008/04762-4

Vigência: 1/3/2009 a 28/2/2013

Este projeto tem por finalidade apresentar proposta de implantação de linha de pesquisa em síntese orgânica e biocatálise no Departamento de Física e Química da Faculdade de Ciências Farmacêuticas de Ribeirão Preto - Universidade de São Paulo (FCFRP-USP). Para tanto, é proposto, em estreita colaboração com o corpo docente já fixado no departamento, o início de atividades visando ao desenvolvimento de novos reagentes organometálicos, principalmente de magnésio e zinco, que possam ser aplicados na síntese de substâncias com potencial atividade biológica, como a oxadazaflavina, a pirimetamina e o (S)-talnetant. É também proposto o desenvolvimento de novos métodos biocatalíticos que permitam a síntese e/ou semissíntese enantiosseletiva de moléculas bioativas quirais, como o discodermolídeo. Como o projeto possui um aspecto bastante metodológico, o planejamento de sínteses e semissínteses de novas substâncias isoladas na FCFRP-USP, ou de outras substâncias visando às mais variadas aplicações, será a principal forma de adequar e integrar esta nova linha de pesquisa com o atual corpo de pesquisa presente no departamento.

469

### Desenvolvimento e aplicação de colunas enzimáticas na triagem de inibidores seletivos e no monitoramento do trabalho fitoquímico de produtos naturais

Carmen Lúcia Cardoso