

mesmo reside na implementação e na consolidação de uma linha de pesquisa em colóides magnéticos junto ao Departamento de Físico-Química do Instituto de Química de São Carlos-USP, fruto da recente contratação do proponente, o qual recebeu uma área de 40 m² para a montagem do laboratório. Dessa forma, neste projeto de pesquisa pretende-se desenvolver novas metodologias para a obtenção de nanopartículas magnéticas metálicas e na forma de óxidos em sistemas monodispersos com adequação de tamanho, forma (nanoesferas, nanofios e nanobastões), propriedades magnéticas e funcionalização de superfície para aplicação em gravação magnética, biotecnologia e biomedicina. Para gravação, trata-se de obter nanoestruturas auto-organizadas em duas e três dimensões com materiais de elevada anisotropia magneto-cristalina utilizando nanofios e nanobastões metálicos, com os quais se espera promover a redução de acoplamentos magnéticos prejudiciais à aplicação em gravação magnética perpendicular em sistemas de ultra-alta densidade de gravação. Para aplicação em biomedicina, as nanopartículas com tamanho e propriedades magnéticas adequadas serão funcionalizadas com macromoléculas naturais e sintéticas visando promover a biocompatibilidade em diferentes sistemas. Adicionalmente, os modificadores de superfícies podem ser total ou parcialmente mudados utilizando-se procedimentos sintéticos a fim de introduzir um grupo específico e promover diferentes interações moleculares e aplicações, tais como entregadores de drogas, sensores biosseletivos para análise de imagem por ressonância, hipertermia, entre outros. Ressalta-se que o tema do projeto está inserido em áreas estratégicas e de fronteira em tecnologia no mundo. Assim, são fortemente esperados resultados inovadores e expressivos, os quais seriam utilizados na geração de patentes nacionais ou internacionais, além da formação de recursos humanos qualificados para atuarem em temas centrais da nanotecnologia, contribuindo para o desenvolvimento da geração de tecnologia nacional.

477 Estudos visando à síntese de decalactonas

Luiz Sidney Longo Júnior
Universidade Federal de São Paulo (Unifesp)
Campus Diadema
Processo 2007/07338-6
Vigência: 1/4/2009 a 31/3/2013

O presente projeto de pesquisa descreve os estudos pretendidos para a síntese de decalactonas (lactonas de dez membros), as quais são unidades estruturais de grande interesse sintético, uma vez que estão presentes em um grande número de produtos naturais biologicamente ativos e em moléculas de interesse farmacêutico. Duas frentes de

trabalho são propostas para a obtenção desses alvos sintéticos: 1) o estudo da reação de metátese de fechamento de anel em ésteres diênicos, visando estabelecer as condições reacionais adequadas à obtenção de decalatonas, assim como verificar a influência dessas condições na seletividade E/Z da ligação dupla carbono-carbono formada; 2) estudo da clivagem de beta-hidróxi-ésteres bicíclicos promovida pelo tetróxido de rutênio em condições catalíticas. Também são propostas duas sínteses totais, uma para a (-)-putaminoxina e outra para o (+)-multiploídeo A, decalatonas naturais ainda não sintetizadas e com atividades biológicas interessantes.

478 Estudo químico-quântico de corantes e de complexos de metais de transição

Paula Homem de Mello
Centro de Ciências Naturais e Humanas
Universidade Federal do ABC (UFABC)
Processo 2007/05370-0
Vigência: 1/11/2008 a 31/10/2011

Neste projeto, é proposta a utilização de métodos de química quântica para estudar as propriedades eletrônicas de corantes e de complexos contendo metais de transição, visando a diversas aplicações tecnológicas. Com base na metodologia estabelecida para um conjunto de corantes catiônicos, serão estudados diazocorantes, procurando explicar a formação e as propriedades de filmes nanoestruturados, e xantenos com potencial para serem utilizados como fotossensibilizadores. Além disso, serão estudados diversos complexos contendo metais de transição, visando ao entendimento das propriedades magnéticas e à aplicação em biocélulas a combustível. Será realizado um estudo metodológico de forma a verificar se os métodos utilizados para os corantes catiônicos (que forneceram resultados excelentes quando comparados aos dados experimentais) podem ser aplicados também para corantes de estruturas mais flexíveis e compostos com metais de coordenação.

479 Catalisadores heterogêneos preparados pelo método sol-gel e sua utilização em células a combustível e na síntese de biodiesel

Hugo Barbosa Suffredini
Centro de Ciências Naturais e Humanas
Universidade Federal do ABC (UFABC)
Processo 2007/05155-1
Vigência: 1/8/2008 a 31/7/2011

A utilização de biocombustíveis é tema de extrema importância na atualidade. O etanol é um combustível

disponível em nosso país e diferentes tecnologias vêm sendo estudadas para a utilização desse álcool como fonte energética, destacando-se as células a combustível que operam diretamente com etanol (DEFC, do inglês Direct Ethanol Fuel Cells). Por outro lado, com o objetivo de diminuir as emissões de poluição atmosférica e de incentivar a agricultura familiar, iniciou-se no ano de 2007 a adição de 2% de biodiesel ao diesel de petróleo. Essa adição será compulsória e sofrerá aumento gradual a partir de 2008. Nesse sentido, a catálise heterogênea pode ser bastante útil para duas importantes vertentes relacionadas à pesquisa em energia: 1) utilização dos materiais sintetizados em células a combustível avançadas que operem diretamente com etanol; 2) proposição de uma metodologia alternativa à tradicional rota de síntese (catálise homogênea), apresentando como principal vantagem a facilidade de purificação do éster produzido. Dessa maneira, o principal objetivo deste projeto é sintetizar catalisadores heterogêneos para serem utilizados como ânodos em células a combustível avançadas, bem como para realizar a síntese de biodiesel. No caso das células a combustível, serão fabricados materiais baseados em Pt, Pb e outros metais depositados em pó de carbono. Para a síntese do biodiesel, será proposto um novo catalisador de Ni e Co com estrutura do tipo espinélio (NiCo_2O_4). Todos os materiais serão sintetizados utilizando-se o método sol-gel. Finalmente, a caracterização dos catalisadores será realizada utilizando-se as técnicas de difratometria de raios X (DRX), Energia dispersiva por raios X (EDX), microscopia eletrônica por transmissão (MET) e voltametrias cíclicas.

480

Desenvolvimento de novas metodologias sintéticas em química orgânica e suas aplicações na síntese de produtos naturais. Síntese do potente tripanossomicida (+)-komaroviquinona e dos cardiotônicos

Antônio Carlos Bender Burtoloso
Instituto de Química de São Carlos
Universidade de São Paulo (USP)
Processo 2007/04170-7
Vigência: 1/4/2008 a 31/3/2012

Subprojeto A: Síntese total do potente tripanossomicida (+)-komaroviquinona e de seus análogos para avaliação biológica: A komaroviquinona, um diterpeno isolado recentemente da planta *Dracocephalum komarovi*, é uma potente candidata em estudos voltados para o tratamento da doença de Chagas, de suma importância para o Brasil. A komaroviquinona mostrou-se muito mais ativa contra formas infectantes do *T. cruzi* ($\text{IC}_{50} = 9$ nanomolar) quando comparada às drogas comumente utilizadas para o tratamento da doença de Chagas, e seu mecanismo de ação

está intimamente relacionado à enzima *T. cruzi old yellow* (TcOYE), presente no parasita. Até o momento, a komaroviquinona bem como possíveis análogos nunca foram preparados na sua forma enantiopura. Nesse sentido, a preparação da komaroviquinona e seus análogos abriria um grande leque para o melhor entendimento da doença de Chagas e para a busca de novos candidatos para o tratamento dessa doença. Subprojeto B: Desenvolvimento de reagentes multifuncionais para a rápida e eficiente preparação de alcaloides piperidínicos, indolizidínicos e quinolizidínicos. Aplicações na síntese total dos cardiotônicos pumiliotoxinas, homopumiliotoxinas e derivados: pumiliotoxinas (alcaloides indolizidínicos), homopumiliotoxinas (alcaloides quinolizidínicos) e seus congêneros são compostos isolados da pele de algumas espécies de sapos das famílias Dendrobatidae, Mantellidae, Bufonidae e Myobatrachidae, apresentando interessantes propriedades farmacológicas (atividade cardiotônica em baixas concentrações). Devido ao vasto número de compostos que essas toxinas reúnem (aproximadamente cem), metodologias de síntese que propiciem a preparação de uma grande quantidade desses compostos (como também de análogos) de forma rápida e eficiente, a partir de intermediários comuns, são de extrema valia para a aplicação em bioquímica. O desenvolvimento de reagentes multifuncionais para a aplicação na síntese desses alcaloides seria de grande utilidade, pois permitiriam a rápida construção desses compostos e análogos para estudos biológicos no que diz respeito à atividade cardiotônica.

481

Nanomarcadores e sondas luminescentes contendo íons terras-raras

Ana Maria Pires
Faculdade de Ciências e Tecnologia de Presidente Prudente
Universidade Estadual Paulista (Unesp)
Processo 2007/00880-0
Vigência: 1/12/2007 a 30/11/2011

Íons terras-raras (TR), devido às suas propriedades luminescentes, têm vasta aplicação em dispositivos visuais e conversores de radiação e atuam também como sondas espectroscópicas ou sensores (químicos ou biológicos). Na composição de nanomateriais ampliam sua aplicabilidade devido às inúmeras vantagens por estarem em dimensão nanométrica. Em biologia e medicina, vem crescendo exponencialmente a utilização de tais nanomateriais como marcadores luminescentes em imunossaios para detecções de diferentes espécies. A busca por novos marcadores e sistemas de detecção com alta sensibilidade óptica e seletividade, sem autofluorescência, compatibilidade com células vivas e estabilidade em ambientes aquosos aerados, tem aumentado o interesse na utilização de luminóforos de TR para esses fins. Luminóforos de TR com conversão ascendente (*upconversion*) também têm demonstrado inú-