

**487** Complexos metálicos de platina (II), platina (IV), paládio (II), ouro (I) e ouro (III) com aminoácidos e derivados: síntese, caracterização e aplicações farmacológicas

Pedro Paulo Corbi

Centro Universitário de Araraquara (Uniará)

Processo 2006/55367-2

Vigência: 1/10/2007 a 30/9/2010

Complexos metálicos têm sido utilizados em medicina, no mundo todo, no tratamento de várias doenças. A idade de compostos inorgânicos e suas aplicações medicinais abrangem, por exemplo, o tratamento do câncer e da artrite, agentes antimicrobianos e inibidores enzimáticos. O conhecimento e a compreensão dos mecanismos de ação farmacológica desses compostos são fundamentais no desenvolvimento de novas drogas mais eficientes e seguras ao organismo. Atualmente, são utilizados complexos de ouro no tratamento da artrite, complexos de prata no tratamento de infecções bacterianas e complexos de platina no tratamento do câncer. Além disso, novos complexos metálicos de paládio, rutênio e ouro têm sido pesquisados como potenciais agentes antitumorais. Neste projeto de pesquisa, são abordadas a preparação, a caracterização e a aplicação farmacológica de novos complexos metálicos de Pt(II), Pt(IV), Pd(II), Au(I) e Au(III) com aminoácidos e derivados no tratamento de doenças como o câncer. Os complexos serão sintetizados partindo-se de soluções dos ligantes e dos sais metálicos e caracterizados por meio de análises químicas e espectroscópicas. Serão realizados estudos das atividades antitumorais dos compostos sobre as células HeLa, de câncer humano. Os resultados obtidos serão comparados com aqueles descritos para a cisplatina.

**488** Química quântica relativística aplicada

Luiz Guilherme Machado de Macedo

Faculdade de Ciências de Bauru

Universidade Estadual Paulista (Unesp)

Processo 2006/54976-5

Vigência: 1/3/2007 a 28/2/2011

A química dos elementos mais pesados da tabela periódica não pode ser compreendida sem a inclusão dos efeitos relativísticos. Dessa forma, a química quântica relativística aplicada a problemas de interesse químico é uma poderosa ferramenta auxiliar na compreensão dos fenômenos relacionados com a maioria dos elementos químicos, é mais econômica que os métodos experimentais e em muitos casos a única maneira de se obter informações confiáveis. Nosso objetivo neste projeto é aplicar a química quântica relativística em problemas de interesse

químico balanceando tópicos de ciência aplicada, ciência pura e química computacional. Em ciência aplicada, desejamos estudar as propriedades eletrônicas de nanoclústeres de ouro do tipo  $M@Au_{12}$  ( $M = Ta^-, Re^+, Mo$ ), bem como a adsorção de pequenas moléculas ( $CO$  e  $O_2$ ) em sua superfície. A motivação deste tópico se insere no potencial da nanotecnologia em catálise heterogênea. Em ciência pura, desejamos estudar a química dos elementos superpesados com o objetivo de verificar até onde as propriedades periódicas da tabela periódica são válidas. Por fim, em química computacional, desejamos contrair bases estáveis e de alta qualidade recentemente desenvolvidas por nosso grupo e disponibilizá-las para a comunidade científica nos formatos para os pacotes quântico relativísticos MolDir, Dlrac04 e UTChem.

**489** Aplicação de sílicas, de diferentes porosidades e funcionalizadas com o ligante 4-amino-2-mercaptopirimidina, na pré-concentração de As, Hg, Cd, Cu, Pb e Se em amostras aquosas utilizando sistema em linha

Gustavo Rocha de Castro

Faculdade de Engenharia de Ilha Solteira

Universidade Estadual Paulista (Unesp)

Processo 2006/54946-9

Vigência: 1/2/2007 a 31/1/2011

A determinação direta de espécies metálicas presentes em baixas concentrações em amostras de águas naturais apresenta dificuldades devidas principalmente ao efeito matriz que pode interferir negativamente no sinal do analito. Elementos metálicos como As, Hg, Cd, Pb, Cu e Se são de interesse ambiental em razão de seu uso intensivo, distribuição e por serem absolutamente não degradáveis, de maneira que podem se acumular nos componentes do ambiente, e formar espécies que apresentem toxicidade. O presente trabalho busca organofuncionalizar o suporte sólido sílica com o ligante 4-amino-2-mercaptopirimidina e aplicar os materiais modificados quimicamente na pré-concentração de íons metálicos em amostras aquosas. As sílicas organofuncionalizadas, por apresentarem boa estabilidade térmica, química e mecânica, e ainda grupos orgânicos que apresentam características de bases de Lewis ligados quimicamente na superfície do suporte inorgânico, permitem a extração e pré-concentração de espécies metálicas de sistemas aquosos, por coordenação do íon ao par de elétrons livres do ligante orgânico. Dessa forma, íons metálicos que apresentem concentrações em níveis de traço em sistemas aquosos e/ou orgânicos podem ser diretamente determinados por espectrometria de absorção atômica após pré-concentração em linha. No caso de semimetais, como o selênio, a técnica de geração de hidreto (HG AAS), a extração do metaloide da matriz