

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 (Uniar)

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

original, irá favorecer a reação de formação do respectivo hidreto metálico, garantindo maior quantidade de átomos do metaloide na altura de observação da chama, pois muitas vezes a energia fornecida pela chama não é suficiente para promover uma eficiente atomização. Os resultados obtidos pelos métodos desenvolvidos serão comparados com aqueles obtidos diretamente por GF AAS.

490

Estudo da fixação e ativação da molécula de dióxido de carbono com bases nitrogenadas

Eduardo Rene Perez Gonzalez

Faculdade de Ciências e Tecnologia de Presidente Prudente

Universidade Estadual Paulista (Unesp)

Processo 2006/51987-6

Vigência: 1/2/2007 a 31/1/2011

Este projeto tem como objetivo a implementação de uma nova linha de pesquisa em química orgânica, compondo uma das ações que vêm sendo tomadas pela faculdade visando ao apoio dos novos cursos de química e engenharia ambiental que foram implementados há três anos. Pretende-se iniciar uma linha de pesquisa na área de química orgânica envolvendo síntese e caracterização estrutural de novos compostos orgânicos a partir da utilização do dióxido de carbono como material de partida. O desenvolvimento de tecnologias para utilização do CO_2 tem na atualidade uma relevante importância visando a dois objetivos fundamentais; a diminuição do CO_2 emitido para atmosfera, o que tem uma conotação ambiental devido ao efeito estufa, e a substituição de tecnologias que utilizam reagentes altamente tóxicos como o fosgênio (considerado arma química) para preparação de compostos orgânicos usados como pesticidas, fármacos, e em outras aplicações industriais, como é o caso dos carbamatos (poliuretanos) e carbonatos orgânicos (carbonatos cíclicos e policarbonatos). O uso do CO_2 em síntese requer a ativação da molécula de CO_2 , que pode ser realizada com bases orgânicas. Para tal fim, deve-se fazer um estudo experimental e teórico das bases propostas (amidinas, guanidinas e aminas em geral, alcóxidos, fenóxidos etc.) que gere conhecimento sobre os fatores que governam a reatividade dessas bases frente à molécula de CO_2 , permitindo a otimização dos processos de ativação. Nesse sentido, serão estudadas a formação dos complexos [Base orgânica – CO_2] e as possíveis correlações da reatividade das bases com parâmetros físico-químicos destas, determinados por meio da utilização de programas de computação utilizados em química teórica. Um aspecto de particular importância é a seletividade da reação da base com a molécula de CO_2 , ainda na presença de outros ácidos de Lewis, assim como o comportamento preferencial dessas bases como nucleófilos quando estão na presença do CO_2 . Para este estudo, serão determinadas as energias dos orbitais

de fronteira para as moléculas na suas conformações de mínima energia. Com esses resultados, pode-se aplicar o princípio Hard-Soft Acid and Bases (HSAB) de Pearson e comparar as durezas relativas das bases para determinar a sua reatividade frente à molécula de CO_2 . Esses resultados teóricos serão correlacionados com a reatividade determinada experimentalmente e com a atividade de transferência da molécula de CO_2 frente a outras bases nucleofílicas. Assim, será determinado o caráter reversível da fixação de CO_2 pelas bases experimentadas e as condições para a saída do CO_2 . Esse aspecto está relacionado com a atividade mimética da anidrase carbônica e pode conduzir a estudos interessantes de caráter farmacológico. Será estudada a viabilidade da utilização do CO_2 em condições de alta pressão (estado supercrítico) para a substituição de solventes orgânicos nas reações com as bases.

491

Estudo da interação de anestésicos locais com biomembranas por simulações computacionais

Monica Andréa Pickholz

Instituto de Biologia

Universidade Estadual de Campinas (Unicamp)

Processo 2006/02523-7

Vigência: 1/3/2007 a 28/2/2009

Este projeto destina-se à implantação de uma linha de pesquisa em simulações computacionais de biomembranas, a ser desenvolvida junto ao grupo de biomembranas, do Departamento de Bioquímica – Instituto de Biologia da Unicamp. O projeto propõe a utilização de técnicas de simulação computacional para investigar, com detalhe microscópico, a interação de anestésicos locais com membranas biológicas. O estudo será focalizado nas propriedades estruturais e dinâmicas de bicamadas e lipossomas de fosfolípidios (na escala de tempo dos nanossegundos), nas fases biologicamente relevantes.

492

Contaminação de alimentos por hidrocarbonetos policíclicos aromáticos (HPAs)

Mônica Cristiane Rojo de Camargo

Instituto de Tecnologia de Alimentos (Ital)

Secretaria de Agricultura e Abastecimento

Processo 2005/59974-8

Vigência: 1/8/2006 a 31/1/2011

Hidrocarbonetos policíclicos aromáticos (HPAs) representam uma importante classe de carcinógenos químicos formados durante a combustão incompleta de material orgânico. Desde que o potencial carcinogênico dos HPAs foi comprovado, principalmente em relação ao benzo(a)pireno,