

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,