

imagens na otimização dos experimentos e entendimento dos processos de atomização e interações nas superfícies dos fornos atomizadores. Neste projeto, deseja-se propor um trabalho multidisciplinar com o emprego de métodos espectroanalíticos e quimiometria.

508

Caracterização *in situ* de interações entre espécies metálicas e matéria orgânica em sistemas aquáticos: ensaios utilizando diálise e ultrafiltração

André Henrique Rosa

Universidade Estadual Paulista (Unesp)

Campus Experimental de Sorocaba

Processo 2003/13044-4

Vigência: 1/7/2004 a 30/6/2008

Pretende-se desenvolver e aplicar metodologias para a caracterização *in situ* de interações entre espécies metálicas e matéria orgânica aquática. Uma, baseada na diálise em membranas, utilizando saquinhos de chá previamente purificados e empacotados com trocador(es) catiônico(s), os quais serão imersos diretamente no manancial permitindo o estudo da labilidade relativa de espécies metálicas *in situ*, em função do tempo e da quantidade do trocador. Outra proposta a ser investigada é a utilização de sistema de ultrafiltração tangencial de tubo em forma de T, equipado com membrana filtrante. Baseado na elevada massa molar da matéria orgânica natural (MON), os metais livres serão diferenciados daqueles originalmente complexados, por meio do bombeamento direto da água do manancial para o sistema de ultrafiltração. Estudos variando parâmetros, tais como tempo de contato e concentração de soluções de ligantes (por exemplo, EDTA) e/ou íons Cu (II) possibilitarão, por exemplo, caracterizar a estabilidade de complexos metal-MON. Os resultados dos procedimentos *in situ* permitirão melhor compreensão de fenômenos ambientais relacionados à complexação, transporte, estabilidade e labilidade de espécies metálicas em sistemas aquáticos ricos em matéria orgânica.

509

Filmes automontados e Langmuir-Blodgett (LB) utilizados como sensores para a avaliação da qualidade de águas

Marystela Ferreira

Faculdade de Ciências e Tecnologia de Presidente Prudente

Universidade Estadual Paulista (Unesp)

Processo 2003/05722-2

Vigência: 1/2/2004 a 31/8/2007

O projeto visa ao desenvolvimento de sensores para análise de contaminantes fenólicos e metais pesados (Pb, Cd, Cr) em águas residuais, utilizando um sistema experimental de baixo custo. As unidades sensoriais serão

compostas de filmes ultrafinos de polímeros condutores e/ou mistos com compostos inorgânicos em diferentes combinações de arquiteturas supramoleculares, pré-depositados sobre substratos sólidos, por meio das técnicas de automontagem (LBL) e Langmuir-Blodgett (LB). A flexibilidade no controle da espessura dos filmes, oferecida por essas técnicas, poderá ser explorada para atingir baixos tempos de resposta das unidades sensoriais. As unidades serão imersas em diferentes sistemas líquidos e a aquisição e caracterização dos resultados serão realizadas por medidas elétricas em corrente alternada (AC) e pela técnica de pulsos, em eletroquímica. A interação entre os filmes finos de polímeros e os compostos fenólicos e metais pesados será estudada por meio da caracterização espectroscópica por UV-Vis, FTIR e Raman, além da caracterização eletroquímica (voltametria cíclica). Quando necessário, será feita a caracterização espectroscópica e eletroquímica do material que servirá como eletrodo (unidade sensorial). Por exemplo, os filmes LB de Pani/Rupy e LBL de Pani/V2O5 já foram intensamente estudados durante o pós-doutorado realizado no IFSC, porém os materiais novos, como as porfirinas ou os polímeros derivados de PMMA e PS, ainda não foram estudados na forma de filmes nanoestruturados. Na primeira etapa do projeto serão otimizadas as condições de fabricação dos filmes ultrafinos dos materiais citados. Posteriormente, será testada a sensibilidade de resposta do dispositivo e sua capacidade de diferenciar/reconhecer os contaminantes orgânicos e metais pesados em águas em diferentes concentrações molares. Análises complementares mediante microscopia de força atômica (AFM, do inglês *atomic force microscopy*), espectroscopia Raman e eletroquímica serão realizadas para verificar possíveis alterações sofridas pelos materiais devido ao contato com os diferentes analitos. Outra etapa envolve a análise das respostas dos sensores obtidas por meio de estatística multivariada, como na técnica de Análise de Componentes Principais (PCA, do inglês *principal component analysis*). O PCA permite correlacionar estatisticamente os dados, indicando se determinada amostra é semelhante ou não a outra, qual variável contribui mais para essa diferenciação, se as variáveis estão correlacionadas ou independentes umas das outras. Por fim, espera-se que seja possível realizar medidas em amostras reais de efluentes da região de Presidente Prudente. Estudos realizados por pesquisadores da Unesp mostraram que efluentes da região estão contaminados por fenóis e alguns metais pesados (Pb, Cr).

510

Estudos eletroquímicos sobre eletrocatalisadores à base de platina utilizando combustíveis alternativos em células do tipo eletrolitopolimérico sólido

Almir Oliveira Neto

Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares (Ipen)
Secretaria de Desenvolvimento
Processo 2003/03127-0
Vigência: 1/10/2003 a 30/9/2007

As reações de eletro-oxidação do etileno glicol e do etanol serão estudadas sobre eletrocatalisadores à base de platina-rutênio, platina-estanho, platina-ródio, platina-rutênio-estanho, platina-estanho-ródio, platina-rutênio-ródio e platina-rutênio-estanho-ródio dispersas em carbono de alta área superficial. Estes catalisadores serão preparados pelo método do ácido fórmico modificado e etileno glicol. A composição química dos eletrocatalisadores será determinada por EDX. O tamanho médio das partículas, por difração de raios X. Outras técnicas, como espectrometria de infravermelho e microscopia eletrônica de alta resolução, poderão ser utilizadas para a caracterização dos eletrocatalisadores produzidos. O desempenho dos eletrocatalisadores frente às reações será estudado por meio dos perfis voltamétricos. Os eletrocatalisadores que apresentarem o melhor desempenho serão testados em células a combustível unitárias do tipo membrana polimérica sólida (curvas de polarização). A normalização por área ativa também será realizada para esses eletrocatalisadores. Neste trabalho, também será realizado um estudo de otimização na composição dos catalisadores à base de Pt, visto que há poucos estudos nos quais o etilenoglicol e o etanol são utilizados como combustíveis.

511 Estudo da biodiversidade de microrganismos brasileiros em biotransformações: *screening* e aplicação na síntese de compostos quirais e biologicamente ativos

Leandro Helgueira de Andrade
Instituto de Química
Universidade de São Paulo (USP)
Processo 2003/00439-0
Vigência: 1/7/2003 a 30/9/2007

Este projeto consiste na triagem (*screening*) de microrganismos (fungos e bactérias) isolados na Floresta Amazônica, Mata Atlântica e outras reservas do estado de São Paulo frente a diversos tipos de reações (Baeyer-Villiger, oxidação de enxofre, halogenação, óxido-redução, desracemização, hidrólise de ésteres e nitrilas). Com isso, será possível construir uma biblioteca de microrganismos relacionando o seu potencial enzimático em biotransformações. Em uma segunda etapa, após a análise do potencial enzimático dos microrganismos, será feita a introdução da biotransformação como um passo sintético na preparação de moléculas quirais. Essas reações serão aplicadas na síntese de fármacos quirais e produtos naturais ativos. Um aumento de escala das reações de interesse industrial será realizado.

512 Estudos dos efeitos estereoeletrônicos em equilíbrios conformacionais e nos parâmetros de RMN (δ e J), através de dados experimentais e calculados

Claudio Francisco Tormena
Faculdade de Filosofia, Ciências e Letras de Ribeirão Preto
Universidade de São Paulo (USP)
Processo 2002/12305-6
Vigência: 1/7/2003 a 31/3/2006

Este projeto visa ao estudo das interações estereoeletrônicas que estão presentes na estabilidade de determinadas conformações, utilizando para isso a técnica de RMN para obter dados de deslocamentos químicos e constantes de acoplamento experimentais e também obtendo estes mesmos dados por meio de cálculos teóricos. Com isso pretende-se avaliar o efeito dessas interações no equilíbrio conformacional e o efeito que elas causam nos parâmetros de RMN. Para atingir essa finalidade e se conseguir fazer uma significativa generalização, pretende-se estudar um número considerável de compostos que venham a abranger diferentes sistemas e comportamentos. Três classes de compostos serão abordadas: a) acetofenonas com substituintes nas posições orto, meta e para, sendo eles doadores ou retiradores de densidade eletrônica; b) compostos alicíclicos derivados do pirano com substituintes na posição; esses compostos podem apresentar dois confôrmeros, axial e equatorial; c) ciclopentanos-trans-1,2-dissubstituídos. Esses projetos serão desenvolvidos com a utilização dos espectrômetros de RMN (Bruker, 300, 400 e 500 MHz), existentes no Departamento de Química da USP/RP. Os cálculos teóricos serão realizados com o programa Gaussian 98 disponível no departamento, com os microcomputadores adquiridos com recursos desse projeto. A síntese dos compostos será realizada nos laboratórios do Departamento de Química da USP/RP.

513 Especificação de elementos-traços usando técnicas de separação alternativas hífenadas a espectrometria de emissão óptica com plasma acoplado indutivamente

Amauri Antônio Menegário
Centro de Estudos Ambientais de Rio Claro
Universidade Estadual Paulista (Unesp)
Processo 2002/10635-9
Vigência: 1/5/2003 a 30/4/2007

Este projeto abordará a associação de técnicas de separação simples e de baixo custo com a espectrometria de emissão óptica com plasma acoplado indutivamente (ICP-OES), visando ao desenvolvimento de métodos sensíveis e seletivos para determinação de espécies ou grupos de espécies de elementos-traços. Espera-se com isso