

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 ( $\delta$ 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 hifenadas 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