

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 **Especiação 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

a implantação de uma nova de linha de pesquisa na área de química analítica no Centro de Estudos Ambientais da Universidade Estadual Paulista Júlio de Mesquita Filho. Na primeira fase do projeto, pretende-se investigar a viabilidade do uso de substratos biológicos (microrganismos) para separações de espécies orgânicas e inorgânicas de As, Cd, Cu, Pb, Sb, Se e Sn. Serão projetados e dimensionados sistemas de fluxo com colunas contendo os substratos biológicos imobilizados em suportes sólidos para conduzir as separações e as detecções das espécies *on-line*. Posteriormente, visando métodos mais sensíveis e abrangentes, as separações obtidas usando os substratos biológicos serão associadas às extrações em fases sólida-líquida com resinas e/ou a geração de hidretos. Os métodos serão aplicados para a análise de amostras de interesse ambiental e toxicológico. A segunda fase do projeto consiste no desenvolvimento de procedimentos analíticos capazes de avaliar a concentração de espécies lábeis (orgânicas e inorgânicas) *in situ* no ambiente, a partir da implantação e implementação da técnica de gradientes de difusão em filmes finos (DGT). Pretende-se desenvolver novos métodos, principalmente com base no uso de novos agentes ligantes para a determinação de grupos de espécies de Cd, Co, Cu, Mn, Ni, Pb, Zn e espécies inorgânicas de As, Sb e Sn. Inicialmente, serão realizados testes com soluções e amostras no laboratório, nos quais serão avaliados os agentes ligantes e os principais parâmetros que influenciam no desempenho da técnica, como pH, espessura e porosidade do gelo. Posteriormente, pretende-se realizar a determinação das espécies *in situ* em sistemas aquáticos e em efluentes.

514

Estudo e caracterização de polissacarídeos hidrofobicamente modificados

Maíra Regina Rodrigues Magini
Universidade do Vale do Paraíba (Univap)
Processo 2002/00272-6
Vigência: 1/3/2003 a 30/6/2008

O trabalho proposto consiste na avaliação das características estruturais e dinâmicas do microambiente formado por polissacarídeos modificados em solução aquosa, visando fornecer informações sobre a viabilidade da utilização dos mesmos como carregadores de drogas. A dextrana e o ácido hialurônico serão hidrofobicamente modificados por reação de esterificação, e um hidrogel será produzido utilizando-se da técnica de fotopolimerização para a obtenção de ligações intercruzadas. Para essas avaliações, faz-se necessária a incorporação das sondas pireno e nabumetona aos microdomínios polissacarídeos formados tanto em solução como em estado sólido, e a utilização de técnicas fotofísicas. Paralelamente, a utilização da nabumetona como sonda fotofísica poderá fornecer informações sobre seu transporte e localização

enquanto droga. Também será feito um estudo fotofísico de drogas utilizadas em terapia fotodinâmica, por sua incorporação aos microdomínios de polissacarídeos. Aliada a esses estudos, a análise estrutural dos polissacarídeos poderá fornecer informações sobre a viabilidade da utilização dos mesmos como carregadores de drogas.

515

Desenvolvimento de derivados de sacarose. Síntese e estudo de suas propriedades físico-químicas

Maurício Boscolo
Instituto de Biociências, Letras e Ciências Exatas
de São José do Rio Preto
Universidade Estadual Paulista (Unesp)
Processo 2001/07093-7
Vigência: 1/1/2002 a 31/3/2006

Este projeto concerne, basicamente, à síntese e a caracterização de compostos derivados de sacarose. Dentre os temas de interesse, destaca-se a produção de ésteres e éteres de sacarose para diversas finalidades, como surfactantes e alimentícias. A funcionalização da sacarose e de seus ésteres e éteres com vários grupos químicos (quina, hidroquinona, triazina, p-nitrobenzeno e 4-cloropiridina), bem como suas polimerizações via formação de poliuretanas e poliéteres, serão investigadas. A pesquisa a ser desenvolvida compõe-se de duas etapas: síntese/caracterização de derivados de sacarose e o estudo de suas propriedades químicas em soluções, como a interação com íons metálicos e seus complexos, e ainda das propriedades físico-químicas dos polímeros formados, visando a aplicações tecnológicas.

516

Análise fitoquímica de espécies vegetais e avaliação de atividades biológicas das substâncias isoladas

Patrícia Sartorelli
Escola Paulista de Medicina
Universidade Federal de São Paulo (Unifesp)
Processo 2001/05023-1
Vigência: 1/8/2003 a 29/2/2008

Espécies vegetais têm sido utilizadas milenarmente como fonte de substâncias com potencial farmacológico. No entanto, uma pequena percentagem tem sido estudada quanto à sua composição química. No Parque Municipal Chico Mendes, localizado na cidade de Osasco, no Estado de São Paulo, são encontradas várias espécies de vegetação da Mata Atlântica, muitas das quais utilizadas com fins medicinais e ornamentais. O presente projeto visa estabelecer, no Centro Universitário Fieo-Unifio, uma rotina de triagem e isolamento de metabólitos secundários bio-