

crescente uso dos equipamentos e técnicas computacionais, tem atraído grupos de pesquisa para tratar inúmeros problemas com o objetivo de modelar sistemas, nos diferentes estados físicos da matéria. Entre os materiais de interesse tecnológico, podemos destacar os óxidos, tais como ZnO, SnO<sub>2</sub> e TiO<sub>2</sub>, que são cerâmicas eletrônicas com propriedades varistoras e catalisadoras. Serão utilizadas técnicas *ab initio* e semiempíricas para estudar a estrutura eletrônica desses óxidos e verificar que efeitos podem ser produzidos pelas vacâncias de oxigênio e também a influência da adição de átomos como dopantes na rede. Também serão abordados os estudos e caracterizações de processos de interação de gases e metais nas superfícies desses óxidos.

**529** **Investigação das atividades analgésica, anti-inflamatória e tripanomicida de alguns derivados de cubebina obtidos por síntese parcial**

Márcio Luís Andrade e Silva  
Pró-Reitoria Adjunta de Pesquisa e Pós-Graduação  
Universidade de Franca (Unifran)  
Processo 1998/14956-7  
Vigência: 1/2/2000 a 31/8/2004

Lignanas dibenzilbutirolactônicas apresentam amplo espectro de atividades biológicas, tais como: antitumoral, antiviral, anti-inflamatória, inibição do fator de agregação plaquetária, tripanomicida, dentre outras. Dentre essas lignanas, cubebina, isolada de *Zanthoxylum naranjillo* e de *Piper cubeba*, apresentou atividade anti-inflamatória e analgésica significativas. Partindo-se de cubebina, pretende-se obter alguns derivados por síntese parcial. Os derivados obtidos serão avaliados quanto às atividades analgésicas e anti-inflamatórias. Todos os derivados serão também avaliados quanto à atividade contra o *Trypanosoma cruzi*. Assim, os mecanismos de ação das substâncias ativas serão investigados e as DL50 e DE50 serão determinadas.

**530** **Aplicação de óxidos cerâmicos mistos como materiais alternativos em supercapacitores eletroquímicos para estocagem de energia**

Tânia Aparecida Farias Lassali  
Faculdade de Filosofia, Ciências e Letras de Ribeirão Preto  
Universidade de São Paulo (USP)  
Processo 1998/14932-0  
Vigência: 1/5/1999 a 30/4/2002

Serão estudados materiais alternativos baseados em óxidos condutores para aplicação em capacitores eletroquímicos (CE). Para esse fim, serão preparados, pelo método termogravimétrico e pelo processo sol-gel, diferentes

séries de filmes de composição nominal M<sub>x</sub>N<sub>(1-x)</sub>O<sub>2</sub> (0 < x < 1), onde M representa um óxido de metal nobre (exemplo: Ir e Rh) e N um óxido de metal menos nobre (Ni, Mn, Co, Ce etc.). A morfologia, composição e estrutura dos filmes serão analisadas com o auxílio de técnicas como MEV, EDX, XPS etc. As características eletroquímicas de interesse para aplicação como eletrodos em CE serão estudadas por voltametria cíclica e espectroscopia de impedância faradaica. Parâmetros como densidade de carga, velocidade de carga/descarga, ciclo de vida serão avaliados em diferentes eletrólitos de suporte.

**531** **Catalisadores de vanádio suportados obtidos pelo processo sol-gel: oxidação de metanol e metano para formiato de metila**

Arioaldo de Oliveira Florentino  
Instituto de Biociências de Botucatu  
Universidade Estadual Paulista (Unesp)  
Processo 1998/14789-3  
Vigência: 1/5/1999 a 28/2/2005

Este trabalho tem por objetivo preparar, pelo processo sol-gel, uma série de catalisadores de vanádio sobre titânio, visando maximizar suas propriedades físico-químicas necessárias à catálise de oxidação, por meio da obtenção de um suporte misto de anatásio/rutilo e da maximização da razão V+4/V+5. O suporte misto será obtido via sol-gel, pelo ajuste de pH no momento da síntese. A peptização do gel e a dispersão da fase ativa serão obtidas pela aplicação de ultrassom em frequência superior 75 watts. A caracterização dos catalisadores será feita por difratometria de raios X (XRD), (FTIR), UV-visível, EPR e SEM/EDX. A atividade, seletividade e estabilidade catalítica serão verificadas frente à reação de oxidação parcial de metanol e metano para formiato de metila.

**532** **Desenvolvimento de cátodos de perovskitas, tipo Ln<sub>1-x</sub>Sr<sub>x</sub>FeyMn<sub>1-y</sub>Oz e Ln<sub>1-x</sub>Sr<sub>x</sub>FeyCo<sub>1-y</sub>Oz, para células a combustível de eletrólito sólido (Sofc)**

Joelma Perez  
Faculdade de Ciências de Bauru  
Universidade Estadual Paulista (Unesp)  
Processo 1998/14788-7  
Vigência: 1/5/1999 a 30/11/2003

Este trabalho tem por objetivo preparar e desenvolver, pelo método sol-gel e preferencialmente pelo método polimérico, cátodos de condutor misto cerâmico do tipo Ln<sub>1-x</sub>Sr<sub>x</sub>FeyMn<sub>1-y</sub>Oz e Ln<sub>1-x</sub>Sr<sub>x</sub>FeyCo<sub>1-y</sub>Oz para células a combustível de eletrólito sólido (Sofc). Estudar-se-á o efeito da platina suportada em forma dispersa sobre esse