

condutor visando à melhora da *performance* desse material para a reação de redução de oxigênio (RRO). A caracterização eletroquímica da RRO será realizada mediante levantamento de curvas de polarização e espectroscopia de impedância. Após a otimização do material quanto à estrutura (composição) e textura (porosidade, espessura do filme etc.), pretende-se a construção de um pequeno módulo (célula unitária) de $\sim 25 \text{ cm}^2$.

533

Pesquisas em materiais avançados visando a aplicações em dispositivos eletroquímicos

Silmara das Neves

Universidade São Francisco (USF)

Processo 1998/14756-8

Vigência: 1/7/1999 a 30/11/2003

Este projeto tem como tema central a preparação de dispositivos eletroquímicos com alta eficiência de armazenamento e conversão de energia, a partir do estudo minucioso dos materiais que os compõem. Os objetivos estão vinculados à história desses materiais, investigando-se desde sua síntese e caracterização até a etapa final envolvendo sua aplicação tecnológica. *A priori*, os seguintes materiais serão investigados: óxidos de silício e de metais de transição (Co, Ni, Mn, Mo, V e Ti); óxidos de metais de transição litiados (LiCoO_2 , LiNiO_2 , LiMn_2O_4); polímeros condutores (polianilina, politiofeno, polipirrol e poli-p-fenilenovinileno); eletrólitos poliméricos com sais de lítio (blendas de póli (óxido de etileno) + poliácrlonitrila e póli (óxido de etileno) + polimetilmetacrilato) e nanocompósitos (polímeros condutores/óxidos). Este conjunto de materiais possui propriedades intrínsecas e complementares que possibilitarão a sua aplicação em baterias recarregáveis de lítio e íons-lítio; capacitores eletroquímicos; dispositivos eletrocromáticos e fotoeletroquímicos.

534

Reações de inserção de isonitrilas e de fosfo e arso-alcinos em azido-ciclopaladados gerados por complexação de sais de paládio (II) com alcinos funcionalizados: aplicações de alguns derivados, como bifosfínicos, como agentes antitumorais e como inibidores

Antonio Carlos Fávero Caires

Universidade de Mogi das Cruzes (UMC)

Processo 1998/11398-3

Vigência: 1/1/1999 a 30/4/2004

Este projeto visa ao estudo das reações de inserção de isonitrilas e de fofo e arso-alcinos em ligações Pd-C de uma classe especial de azido-ciclopaladados, ou seja, aqueles formados por complexação de sais de paládio (II) com alcinos funcionalizados. Importantes informações meca-

nísticas, ainda desconhecidas, a respeito das reações de inserção em paladociclos deverão ser obtidas, considerando-se aspectos eletrônicos e estereoquímicos intrínsecos da classe estudada. Alguns compostos orgânicos heterocíclicos inéditos, bem como novos complexos organometálicos de alta relevância tecnológica, deverão ser isolados. Em outra etapa estudar-se-á a atividade antitumoral de alguns complexos derivados. Importantes correlações entre estrutura química e atividade biológica serão obtidas.

535

Preparo e caracterização de cimentos obtidos a partir de casca de arroz

Flávio Aparecido Rodrigues

Universidade de Mogi das Cruzes (UMC)

Processo 1998/09644-6

Vigência: 1/1/1999 a 31/3/2005

O Brasil produz anualmente cerca de 2,2 milhões de toneladas de casca de arroz; este material em sua grande maioria é queimado a céu aberto, gerando finas partículas que permanecem dispersas no ambiente podendo causar graves problemas de saúde pública. Por outro lado, não existem processos produtivos de larga escala, capazes de absorver essa quantidade de material, tornando desinteressante seu aproveitamento. Este projeto tem por objetivo o desenvolvimento de cimentos à base de $\text{B-Ca}_2\text{SiO}_4$ (um dos componentes do cimento Portland), utilizando-se a cinza da casca de arroz (CCA) como material de partida. A queima da CCA, em condições controladas, leva à formação de sílica, com excelentes características, no que se refere à sua reatividade sob condições hidrotermais. Em trabalho anterior, desenvolvido junto à Universidade da Califórnia, foi demonstrada a viabilidade desse procedimento; foram preparados diversos tipos de cimentos por meio de síntese hidrotérmica, envolvendo a CCA, óxido de cálcio e adição de pequenas quantidades de sais de bário. Esse procedimento envolve a preparação de um silicato intermediário, cujo tratamento térmico a temperaturas de 650°C produz os cimentos. Esses materiais apresentam características similares ao cimento Portland. Comparativamente, o cimento comercial é preparado utilizando-se temperaturas ao redor de 1500°C . Assim sendo, a proposta deste trabalho é viabilizar a produção comercial de cimentos derivados da casca de arroz. Espera-se com isso não apenas minimizar os problemas ambientais gerados pela sua queima, mas também utilizar de forma produtiva os recursos agrícolas disponíveis.

536

Síntese e caracterização de compostos metilidenos de irídio e sua utilização em polimerização metatética por abertura de anel

Regina Mara Silva Pereira

Universidade Bandeirante de São Paulo (Uniban)

Processo 1998/08993-7

Vigência: 1/4/1999 a 31/8/2003

O projeto consiste em sintetizar e caracterizar compostos de irídio em baixo estado de oxidação e coordenativamente insaturados a partir de precursores do tipo $[\text{Ir}(\text{CO})\text{X}\{\text{R}_2\text{P}(\text{CH}_2)_2\text{R}_2\}]$ e $[\text{IrX}(\text{CO})(\text{PR}_3)_2]$ ($\text{X}=\text{Cl}$, Br ou I ; $\text{R}=\text{alquilas}$ ou arilas), fazer um estudo comparativo da influência de X e R sobre a reatividade e estabilidade do complexo e estudar a possível aplicação desses compostos como catalisadores em polimerização metatética por abertura de anel.

537

Acoplamento entre técnicas de biologia molecular e eletroquímica e aplicação em ciências ambientais e patologia clínica

João Roberto Fernandes

Faculdade de Ciências de Bauru

Universidade Estadual Paulista (Unesp)

Processo 1998/07402-5

Vigência: 1/1/1999 a 30/4/2004

Técnicas de biologia molecular como PCR e eletroforese permitem a amplificação e separação de seqüências de ácidos nucleicos sem a possibilidade de quantificação precisa das mesmas. A combinação destas com técnicas eletroquímicas podem levar não apenas a uma melhora na quantificação de seqüências específicas, mas também à possibilidade de obter dispositivos descartáveis capazes de medir seqüências que estatisticamente identifiquem bactérias, vírus, protozoários etc. Estes estudos podem ser conduzidos inicialmente com oligonucleotídeos sintéticos para fins de otimização e, numa segunda etapa, serem aplicados diretamente em amostras reais previamente tratadas.

538

Estudo teórico da adsorção de gases em superfície de óxidos

João Batista Lopes Martins

Faculdade de Ciências de Bauru

Universidade Estadual Paulista (Unesp)

Processo 1997/13110-4

Vigência: 1/5/1998 a 31/8/1998

Utilização de métodos RHF LCAO MO *ab initio* e semiempírico para o estudo e caracterização dos processos de adsorção de gases em superfícies de óxidos (ZnO e MgO). Estudo dos processos catalíticos em superfície de ZnO , notadamente, o importante processo catalítico de conversão de H_2 e CO em metanol. Os cálculos serão realizados *ab initio* com aglomerados representando a su-

perfície do óxido. Serão utilizados aglomerados de grande tamanho, os quais recentemente têm produzido bons resultados de adsorção em comparação com resultados experimentais. Os métodos semiempíricos serão utilizados numa primeira abordagem para otimização de geometria, com aglomerados de grande tamanho, os quais melhor representam a superfície catalítica do ZnO . Os estados estacionários serão utilizados para encontrar o caminho de reação e o estado de transição para o processo catalítico. Métodos semiempíricos com orbitais "d" serão avaliados, particularmente o MNDO/d, SAM1d, e PM3tm, com o objetivo de utilizá-los não somente no estudo de óxidos, mas também em estudos de organometálicos e complexos inorgânicos a serem desenvolvidos em colaboração com o Departamento de Química.

539

Argilas pilarizadas como catalisadores em transformações oxidativas de compostos orgânicos em fase líquida e gasosa

Wagner Alves Carvalho

Pontifícia Universidade Católica de Campinas (PUC-Camp)

Processo 1997/13077-7

Vigência: 1/7/1998 a 30/6/2001

O projeto pretende avaliar a atividade e a estabilidade de argilas pilarizadas contendo metais redox na conversão de substratos orgânicos em fase líquida e gasosa. Os produtos de interesse são cicloexanol, cicloexanona, cicloexeno e fenol, utilizados na fabricação de poliamidas e poliésteres. Além de metais normalmente empregados em processos de oxidação (Ti , V , Cr , Fe), serão testados terras-raras (La , Ce) e alguns metais que atuam via mecanismo peroxometálico (Zr , Mo). O trabalho será desenvolvido em colaboração com a Unicamp e a UFSCar.

540

Estudo da formação de monocamadas de polissacarídeos e da imobilização de macromoléculas biológicas sobre as mesmas

Denise Freitas Siqueira Petri

Instituto de Química

Universidade de São Paulo (USP)

Processo 1997/13070-2

Vigência: 1/8/1998 a 31/3/2003

O presente projeto envolve o estudo da adsorção de polissacarídeos sobre superfícies sólidas e as interações entre os polissacarídeos adsorvidos e macromoléculas biológicas (enzimas e proteínas). Os substratos sólidos sobre os quais os polissacarídeos devem ser absorvidos serão previamente modificados, a fim de se obter grupos específicos na superfície. Estes deverão interagir favora-