

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 $[\text{IrX}(\text{CO})(\text{PR}_3)_2]$ ($\text{X}=\text{Cl}, \text{Br}$ 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-