

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-

velmente com os grupos funcionais dos polissacarídeos por meio de interações eletrostáticas ou de pontes de hidrogênio, promovendo assim a formação de monocamadas estáveis. A cinética e as isotermas de adsorção serão obtidas *in situ* por elipsometria. A influência da massa molar e força iônica do meio sobre o comportamento de adsorção dos polissacarídeos será investigada. A adsorção competitiva entre polissacarídeos de diferentes massas molares, graus de substituição e constituições químicas também deverá ser estudada. As massas molares médias dos polissacarídeos serão estimadas por medidas de viscosimetria capilar. Medidas de ângulo de contato serão feitas a fim de se obter informações qualitativas sobre a rugosidade, a homogeneidade e o caráter hidrofílico ou hidrofóbico das superfícies. A imobilização de albumina, fibrinogênio, imunoglobulina G e lipase sobre os substratos sólidos (antes e depois do recobrimento com polissacarídeos) será investigada mediante medidas elipsométricas. A atividade catalítica das lipases imobilizadas será testada por meio de reações de esterificação. Deseja-se com este projeto estudar polissacarídeos que sirvam para o desenvolvimento de materiais biocompatíveis e cromatográficos e biossensores.

541 **Determinação eletroquímica de metais pesados em águas naturais com ultramicroeletrodos**

Sonia Maria da Silva
Instituto de Biociências de Botucatu
Universidade Estadual Paulista (Unesp)
Processo 1997/11594-4
Vigência: 1/3/1998 a 31/10/1999

O desenvolvimento de técnicas eletroanalíticas com uso de ultramicroeletrodos possibilita análises de metais pesados em diversas matrizes de interesse ambiental, incluindo águas naturais, nas quais se pretende determinar simultaneamente chumbo, cádmio, cobre e mercúrio. A metodologia envolve a aplicação da voltametria de redissolução anódica, com o uso de um amplificador de corrente, acoplado a um microcomputador, e ultramicroeletrodos de fibra de carbono, ouro e platina. As amostras deverão ser analisadas com e sem tratamento prévio (digestão ácida), na presença ou não de eletrólito suporte, visando-se atingir limites de detecção inferiores a $10 \mu\text{g l}^{-1}$. Os resultados serão avaliados por testes de recuperação ou comparados com os obtidos por técnicas convencionais como espectroscopia de absorção atômica, para intervalos maiores de concentração.

542 **Modelos teóricos em reações de transferência de carga**

Vitor Barbanti Pereira Leite
Instituto de Biociências, Letras e Ciências Exatas
de São José do Rio Preto
Universidade Estadual Paulista (Unesp)
Processo 1997/06267-4
Vigência: 1/9/1998 a 30/9/2002

O projeto desenvolverá, por meio de modelos simples, o estudo de três tópicos associados a reações de transferência de carga. O primeiro tópico consiste em utilizar modelos de vidro de *spin* (*spin glass*) para o estudo de dinâmica de solventes em reações de transferência de carga. A dinâmica de solvente ocorre em uma superfície de potencial multidimensional e essa superfície apresenta um grande número de mínimos locais. O problema crítico, que será tratado neste trabalho, é compreender as condições sob as quais a dinâmica do solvente pode ser representada por uma única coordenada coletiva de reação. Um outro aspecto dessas reações envolve o cálculo do elemento de matriz de acoplamento entre estados doador e aceitador eletrônicos. No segundo tópico, estudaremos a dependência desses elementos de matriz quando os doadores e aceitadores estiverem intercalados ao longo de uma hélice de DNA. Nesse caso, a reação de transferência de elétrons ocorre a grandes distâncias entre doador e aceitador, e o acoplamento entre os estados é fraco (regime não adiabático). O último assunto está relacionado ao desenvolvimento de modelos de transferência de prótons. Neste formalismo, a transferência de próton é mediada por uma transferência de elétrons, que ocorre de maneira simultânea em um regime no qual o acoplamento eletrônico é forte (regime adiabático). Aplicam-se estes modelos no estudo da condutância em filmes de Langmuir.

543 **Desenvolvimento de metodologia de alta eficiência (SPE/SFE/HRGC) para determinação de pesticidas organoclorados em amostras ambientais (água e solo)**

Sandra Regina Rissato
Faculdade de Ciências de Bauru
Universidade Estadual Paulista (Unesp)
Processo 1996/11215-0
Vigência: 1/11/1997 a 31/1/2002

A proposta deste trabalho é desenvolver uma metodologia para análise de alguns pesticidas organoclorados em amostras reais de solo e água de mananciais, utilizada no abastecimento de água potável da região de Bauru, SP, por técnicas convencionais de extração (extração líquido-líquido e sólido líquido) e também por técnicas contemporâneas (extração em fase sólida (SPE) e extração com fluido supercrítico (SFE)). Serão desenvolvidas as metodologias de *clean-up* por cromatografia líquida prepara-