

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-

tiva em colunas utilizando adsorventes ou por partição líquido-líquido. A determinação desses compostos será realizada por cromatografia gasosa de alta resolução acoplada a um detector de captura de elétrons (HRGC-ECD). Os resultados obtidos fornecerão subsídios para avaliação de impacto ambiental dos pesticidas organoclorados na região estudada, propiciando para um possível controle ou melhoria do tratamento de água de abastecimento público.

544

Desenvolvimento e estudo de materiais eletrônicos e baterias de lítio tipo celas de concentração

José Maurício Rosolen

Faculdade de Filosofia, Ciências e Letras de Ribeirão Preto
Universidade de São Paulo (USP)
Processo 1996/05347-1
Vigência: 1/9/1997 a 30/4/2001

Neste projeto, é proposto o desenvolvimento e o estudo de dispositivos de baterias de íons de lítio tipos celas de concentração e de compostos de intercalação ($\text{LiNi}_0.5\text{Co}_0.5\text{O}_2$, FeS_2 e avançados), usando técnicas eletroquímicas (galvanostáticas a potenciostáticas) e estruturais (difração de raio X, IR e absorção de raio X). O objetivo do projeto é o desenvolvimento de baterias destinadas a aplicações eletrônicas (telefones celulares etc.) e motores de veículos elétricos.

545

Estudo teórico da espectroscopia e da ligação química de moléculas

Francisco Bolivar Correto Machado

Instituto Tecnológico de Aeronáutica (ITA)
Ministério da Defesa. Comando-Geral de Tecnologia Aeroespacial (CTA)
Processo 1995/09696-8
Vigência: 1/3/1997 a 28/2/2001

Este projeto de pesquisa consiste essencialmente no estudo espectroscópico e da ligação química de moléculas, utilizando métodos da química quântica molecular. As linhas de pesquisa a serem desenvolvidas abrangem basicamente os tópicos: a) estudo espectroscópico de moléculas diatômicas; b) estudo conformacional e espectroscópico de moléculas poliátômicas; c) estudo conformacional e da ligação química de complexos inorgânicos; e d) estudo teórico da adsorção de moléculas orgânicas e inorgânicas em superfícies metálicas. Como instrumento de cálculo, esses problemas serão atacados utilizando-se métodos semiempíricos, *ab initio* a nível Hartree-Fock (HF-SCF), interação de configurações e suas variantes e métodos perturbativos. Além da pesquisa a ser desenvolvida, os recursos solicitados serão essenciais para a formação de

pessoal, com dois alunos de iniciação científica envolvidos em duas das linhas de pesquisa a serem desenvolvidas. Os recursos solicitados consistem essencialmente de uma estação de trabalho, de um microcomputador, de uma impressora e de um *software* (Gaussian 94).

546

Desenvolvimento de materiais condutores iônicos sólidos híbridos orgânico-inorgânicos para dispositivos eletroquímicos

Karim Dahmouche

Instituto de Química de Araraquara
Universidade Estadual Paulista (Unesp)
Processo 1995/09640-2
Vigência: 1/9/1996 a 31/5/2001

O objetivo deste projeto é o desenvolvimento de novos condutores iônicos sólidos híbridos sílica-polietilenoglicol e sílica-polipropilenoglicol, dopadas com sal de lítio ou sódio. Além da síntese desses materiais, deve-se analisar a condutividade iônica, os mecanismos de condução, a estrutura, a textura e as propriedades mecânicas dos materiais, visando à utilização em dispositivos eletroquímicos (janelas eletrocromáticas, espelhos inteligentes, baterias recarregáveis), pois esses dispositivos tem grande importância para um país tropical como o Brasil.

547

Oxidação de metanol sobre catalisadores e eletrocatalisadores obtidos pelo processo sol-gel

Margarida Juri Saeki

Faculdade de Ciências de Bauru
Universidade Estadual Paulista (Unesp)
Processo 1995/09599-2
Vigência: 1/12/1996 a 31/12/2001

Este trabalho tem por objetivo preparar e desenvolver, pelo método sol-gel, catalisadores metálicos (Ni, Pt, Pd, Ru) suportados sobre cerâmica $(\text{CeO}_2)_0.8(\text{SmO}_{1.5})_0.2$. Os materiais desenvolvidos serão utilizados para as reações de hidrorreforma de metanol e metano, visando à aplicação como eletrodos tipo reforma-interna nas células a combustível de óxidos (Sofc – Solid Oxide Fuel Cell), e reação de desidrogenação de metanol para obtenção de formiato de metila. A atividade, seletividade e estabilidade desses materiais frente às reações supracitadas serão determinadas por cromatografia em fase gasosa com detecção por espectrometria de massa. A caracterização eletroquímica das reações no anodo será realizada mediante curvas de polarização e espectroscopia de impedância e a caracterização física será realizada por determinação de área BET, redução e/ou oxidação a temperatura programada (TPD/TPR), difratometria de raios X (XRD), mi-