

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-