

croscopia eletrônica de varredura (MEV) e espectroscopia no infravermelho (FTIR). Este projeto tem também o propósito de firmar o Grupo de Catálise/Eletrocatalise no Departamento de Química – Unesp/Bauru.

**548 Filmes semicondutores nanocristalinos com e sem sensibilizadores espectrais para utilização em células fotovoltaicas**

Cássio Luís Fernandes de Oliveira  
Faculdade de Ciências de Bauru  
Universidade Estadual Paulista (Unesp)  
Processo 1995/09598-6  
Vigência: 1/9/1996 a 31/8/2000

O objetivo deste projeto é de preparar filmes semicondutores nanocristalinos de  $\text{TiO}_2$ ,  $\text{Nb}_2\text{O}_5$ ,  $\text{ZrO}_2$  e  $\text{WO}_3$  para montagem de dispositivos fotovoltaicos. Esses filmes serão preparados pelo processo sol-gel sobre ITO e recobertos ou não por camada de sensibilizadores espectrais, como o complexo polipiridínico de rutênio. Os estudos eletroquímicos serão feitos principalmente por meio das técnicas de espectroscopia de impedância eletroquímica (EIE) para determinações dos potenciais de banda plana, densidade de transportadores majoritários e no estudo das propriedades eletrônicas desses semicondutores por estudo na presença de par redox (exemplo:  $\text{Fe}^{2+}/\text{Fe}^{3+}$ ). A avaliação da eficiência na conversão da energia solar em energia elétrica será feita via fotoeletroquímica. Os filmes que apresentarem melhores resultados servirão para construção de dispositivos fotovoltaicos.

**549 Simulação computacional de processos dinâmicos em líquidos moleculares e catalisadores zeolíticos**

Munir Salomão Skaf  
Instituto de Química  
Universidade Estadual de Campinas (Unicamp)  
Processo 1995/09508-7  
Vigência: 1/8/1996 a 31/1/1999

Este projeto visa ao estudo termodinâmico-estatístico de propriedades estruturais, processos dinâmicos e propriedades espectroscópicas de sistemas moleculares em fases condensadas de interesse da físico-química mediante simulações de dinâmica molecular (MD). Parte do projeto dá continuidade aos nossos estudos dos efeitos dinâmicos de solventes moleculares associativos em reações de transferência eletrônica de cromóforos em solução, bem como aos estudos das propriedades dielétricas estáticas e dinâmicas e espectros de absorção no

infravermelho longínquo (IVL) de líquidos associativos puros e misturas binárias. O projeto propõe também o desenvolvimento de programas para simulações de MD de catalisadores zeolíticos e o uso desses programas para o estudo das propriedades estruturais, dinâmicas e espectroscópicas de faujasitas sódicas. Pretendemos estudar o mapeamento das posições de equilíbrio dos cátions relativas à matriz zeolítica, suas mobilidades e frequências características de vibração em função dos sítios de ocupação preferenciais, bem como calcular espectros IVL desses sistemas e correlacionar as bandas de absorção com o mapeamento catiônico.

**550 Uso do processo sol-gel na preparação de óxidos semicondutores e materiais híbridos organo-inorgânicos**

Rita Aparecida Zoppi  
Pontifícia Universidade Católica de Campinas (PUC-Camp)  
Processo 1995/09506-4  
Vigência: 1/9/1996 a 31/8/2000

Neste projeto, pretende-se preparar e caracterizar óxidos semicondutores e materiais híbridos organo-inorgânicos pelo processo sol-gel. Três tópicos básicos serão abordados: a) preparação de óxidos semicondutores e estudo das propriedades eletroquímicas e eletrocromicas; b) preparação e avaliação das propriedades condutoras iônicas de híbridos eletrólitos sólidos constituídos de um polímero orgânico (solvente de sais de lítio),  $\text{LiClO}_4$  e sílica obtida pelo processo sol-gel; c) preparação de membranas com camadas superficiais organo-inorgânicas seletivas para nanofiltração e separação de gases, bem como sua caracterização quanto à permeabilidade e seletividade.

**551 Síntese de prostaglandinas da série 8-aza-10-tio-11-desoxi-pge**

Francisco Carlos Biaggio  
Escola de Engenharia de Lorena  
Universidade de São Paulo (USP)  
Processo 1995/09419-4  
Vigência: 1/8/1996 a 31/7/1998

O presente projeto tem por objetivo a síntese de novos derivados de prostaglandina a partir da cisteína, um aminoácido de fácil disponibilidade. O anel ciclopentânico dos novos derivados sintetizados conterá heteroátomos (N, S), o que nos permitirá avaliar o perfil de atividade biológica no nível do controle da secreção gástrica e do efeito broncodilatador.