



E0576

### **HIDRÓLISE CATALÍTICA DE CELULOSE PARA A PRODUÇÃO DE BIOETANOL: UM ESTUDO POR DINÂMICA MOLECULAR**

Lucas Caire da Silva (Bolsista IC CNPq), Adrian E. Roitberg e Prof. Dr. Munir Salomão Skaf (Orientador), Instituto de Química - IQ, UNICAMP

O desenvolvimento de novas tecnologias para o uso de fontes de energia renovável é importante não somente do ponto de vista econômico, mas também por seu impacto social e político. Hoje o Brasil investe na continuidade do programa de pesquisa em álcool visando otimizar o aproveitamento energético do grande excesso de material lignocelulósico proveniente da biomassa. O uso industrial de  $\beta$ -glicosidases na produção de álcool está relacionado com as etapas finais do processo de transformação de lignocelulose em glicose disponível para a fermentação. O escopo de nosso trabalho envolve o estudo por dinâmica molecular de uma  $\text{exo-}\beta$ -glicosidase monomérica encontrada na bactéria gram-positiva *Paenibacillus polymyxa*. Esta enzima promove a reação de hidrólise da ligação glicosídica  $\beta$ -1,4 com especificidade para celobiose e celodextrinas. O estudo por dinâmica molecular deste sistema nos permite avaliar de modo detalhado a importância relativa dos diversos grupos laterais envolvidos na catálise e na especificidade enzimáticas. Encontramos, para o sistema estudado, indícios que apontam para um mecanismo de reação de hidrólise diferente do mecanismo atualmente aceito para explicar o modo de ação de  $\beta$ -glicosidases.

Celulose - Bioetanol - Dinâmica molecular