



E0652

### **DINÂMICA MOLECULAR DE CELULOSE EM LÍQUIDOS IÔNICOS: UM ESTUDO SOBRE A RECALCITRÂNCIA DA BIOMASSA**

Henrique do Amaral Goldemberg (Bolsista PIBIC/CNPq) e Prof. Dr. Munir Salomão Skaf (Orientador), Instituto de Química - IQ, UNICAMP

A barreira da recalcitrância da celulose – consequência de suas fortes ligações H intra e intermoleculares – a torna particularmente resistente e menos suscetível ao ataque de enzimas celulolíticas, capazes de produzir etanol de segunda geração a partir de biomassa lignocelulósica. É nesse contexto que os líquidos iônicos tornam-se extremamente interessantes, pois recentemente descobriu-se que alguns deles tem capacidade de dissolver a celulose cristalina em altas concentrações e sem derivatização, sendo que, após ser regenerada, a celulose apresenta uma cristalinidade menor, sendo muito mais fácil que ela seja atacada enzimaticamente. Contudo, as bases moleculares que levam determinados líquidos iônicos a dissolver tão eficientemente a celulose ainda são pouco compreendidas. Este trabalho valeu-se de técnicas de dinâmica molecular para o estudo da celulose imersa em líquidos iônicos, particularmente o cloreto de 1-butil-3-metilimidazólio ([Bmim]Cl). Uma fibrila de 36 cadeias, cada qual com 8 unidades de celobiose, foi solvatada com 12180 pares de [Bmim]Cl a 450 K, e o sistema foi simulado com campos de força CHARMM sob condições periódicas de contorno, permitindo o estudo das propriedades de solvatação celulose. Conforme a simulação progrediu, notou-se o despreendimento de cadeias de celulose da fibrila.

Dinâmica molecular - Líquidos iônicos - Celulose