

Projeto de Iniciação Científica PIBIC/CNPEM

Título: Modelagem computacional da difração de raios-X de biomassa celulósica

Pesquisador Responsável: Carlos Driemeier

Unidade do CNPEM: CTBE

A biomassa lignocelulósica é um recurso renovável abundante, com potencial para substituir uma parcela significativa do carbono fóssil atualmente convertido em combustíveis líquidos, produtos químicos e materiais. Para ter uma ideia de escala, a cultura de cana-de-açúcar ocupa $\approx 1\%$ do território brasileiro e disponibiliza cerca de 130 milhões de toneladas anuais (base seca) de *resíduo* lignocelulósico (contabilizando o bagaço e metade da palha). Em unidades mássicas, essa disponibilidade é superior à produção brasileira de petróleo!

A biomassa lignocelulósica é composta de três componentes químicos principais: celulose, hemiceluloses e lignina. A celulose, correspondente a 30-50% da massa, é encontrada na forma de nanocristais fibrilares, os quais são caracterizados por difração de raios-X. Nosso grupo de pesquisa vem desenvolvendo modelos matemáticos e algoritmos computacionais para auxiliar na análise de padrões de difração de biomassa vegetal, a partir dos quais são inferidas propriedades finas dos nanocristais de celulose. O presente projeto se insere nesse contexto.

No projeto, o aluno gerará padrões de difração calculados a partir de coordenadas atômicas. Em um primeiro momento, serão investigados sistemas com coordenadas simples e idealizadas, para compreender como alterações das coordenadas alteram os padrões de difração calculados. Em um segundo momento, serão empregadas coordenadas atômicas obtidas por dinâmica molecular, as quais foram disponibilizadas por colaboradores.

Ao longo do projeto, o aluno terá oportunidade de aprender, com aprofundamento, sobre difração de raios-X de nanocristais. Além disso, o aluno adquirirá prática nas linguagens de programação a serem utilizadas nos cálculos. Por fim, o aluno se beneficiará do ambiente interdisciplinar do Laboratório Nacional de Ciência e Tecnologia do Bioetanol (CTBE), onde são investigados diversos aspectos da produção, conversão e uso de biomassa lignocelulósica, com vistas às biorefinarias do futuro.