

ESTUDOS COMPUTACIONAIS DE INTERAÇÃO SUBSTRATO-ENZIMA APLICADOS À SÍNTESE DE BIOLUBRIFICANTES.

Francisco Mateus Costa Oliveira¹
Antônio Mairton Bezerra Lima Júnior²
João Vitor Gomes De Araujo Silva³
José Cleiton Sousa Dos Santos⁴

RESUMO

Francisco Mateus Costa Oliveira ¹(IC-FUNCAP); José cleiton Souza dos Santos ² (Orientador); Antônio Mairton Bezerra Lima Junior ³; João Vitor Gomes de Araújo Silva ⁴ (IC)

¹²³⁴ Universidade da Integração Internacional da Lusofonia Afro-Brasileira - UNILAB

Apoio Financeiro: FUNCAP

Grande Área da CNPq: Engenharias

A crescente demanda por alternativas renováveis aos produtos derivados do petróleo tem impulsionado o aproveitamento de matérias-primas de origem vegetal para a obtenção de produtos de interesse industrial. Nesse contexto, este trabalho teve como objetivo investigar o potencial do óleo de neem (*Azadirachta indica*) para a produção de biolubrificantes, com ênfase na compreensão das interações entre a lipase Eversa Transform 2.0 e substratos derivados do óleo. A abordagem adotada envolveu inicialmente a preparação e caracterização dos substratos de interesse, considerando as etapas necessárias para sua posterior avaliação por métodos computacionais. Foram consideradas técnicas de acoplamento molecular (docking) e dinâmica molecular para investigar a interação entre a enzima e os substratos e fornecer informações sobre a estabilidade e os possíveis modos de interação dos sistemas. Durante o desenvolvimento do estudo, as etapas de preparação dos materiais e de realização dos experimentos apresentaram limitações que restringiram o avanço das etapas subsequentes e o aprofundamento das análises computacionais. Dessa forma, os resultados obtidos permitiram principalmente reunir informações sobre o sistema estudado e estabelecer condições e direcionamentos para a continuidade das investigações. Embora a avaliação experimental e computacional mais aprofundada ainda necessite de estudos posteriores, o trabalho contribui para o desenvolvimento de estratégias voltadas ao aproveitamento do óleo de neem como matéria-prima renovável e para a compreensão de abordagens aplicadas à síntese enzimática de biolubrificantes.

Agradecimentos: Os autores agradecem à Fundação Cearense de Apoio ao Desenvolvimento Científico e Tecnológico (FUNCAP) pelo apoio financeiro à pesquisa, por meio do Programa Institucional de Bolsas de Iniciação Científica (PIBIC) da Universidade da Integração Internacional da Lusofonia Afro-Brasileira (UNILAB).

Palavras-chave: Óleo de Neem; Biolubrificante; Catálise Enzimática; Otimização de Processo.

Universidade da Integração Internacional da Lusofonia Afro-Brasileira, Instituto de Ciências Exatas e Da Natureza, Discente, mateuscosta028@aluno.unilab.edu.br¹

Universidade da integração internacional da lusofonia Afro-Brasileira, Instituto de Engenharias e Desenvolvimento Sustentável - IEDS, Discente, antoniomairton@aluno.unilab.edu.br²

Universidade da integração internacional da lusofonia Afro-Brasileira, Instituto de Engenharias e Desenvolvimento Sustentável - IEDS, Discente, vitoraraujo@aluno.unilab.edu.br³

Universidade da integração internacional da lusofonia Afro-Brasileira, Instituto de Engenharias e Desenvolvimento Sustentável - IEDS, Docente, jcs@unilab.edu.br⁴