

PLATAFORMA COMPUTACIONAL PARA REDES SUSTENTÁVEIS DE HIDROGÊNIO: INTEGRAÇÃO ENTRE BIOHIDROGÊNIO MICROBIANO E ARMAZENAMENTO QUÍMICO REVERSÍVEL

Itamara Gomes De Sousa¹
Aluísio Marques Da Fonseca²

RESUMO

Esta pesquisa tem como objetivo desenvolver e validar uma plataforma computacional integrada para redes sustentáveis de hidrogênio, combinando a elucidação mecanística da produção de biohidrogênio em *Mycobacterium smegmatis* com o design racional e a avaliação termodinâmica de Transportadores Orgânicos Líquidos de Hidrogênio (LOHCs), visando propor soluções eficientes, seguras e escaláveis para armazenamento e distribuição em condições ambientalmente sustentáveis. A metodologia baseia-se em uma abordagem preditiva *in silico* organizada em duas frentes. Na frente biotecnológica, serão construídos e validados modelos tridimensionais das hidrogenases de *Mycobacterium smegmatis*, seguidos de acoplamento molecular e simulações de dinâmica molecular para investigar estabilidade estrutural, dinâmica conformacional, interações moleculares e vias de transferência de elétrons. Na frente química, serão realizados cálculos de Teoria do Funcional da Densidade (DFT) para otimização das estruturas hidrogenadas e desidrogenadas de LOHCs, avaliação de entalpia (ΔH), energia livre de Gibbs (ΔG) e descritores eletrônicos, como gap HOMO-LUMO, dureza química, eletrofilicidade e mapas de potencial eletrostático. Posteriormente, os dados mecanísticos da produção biológica serão correlacionados aos parâmetros termodinâmicos de armazenamento, permitindo estruturar um framework computacional unificado e um modelo conceitual de microrredes energéticas descentralizadas. Espera-se obter modelos computacionais validados para a produção de hidrogênio por rotas microbianas anaeróbicas, modelos de interação molecular, uma biblioteca de compostos candidatos ao armazenamento químico reversível e um framework computacional integrado para redes de hidrogênio sustentável, além de ferramentas digitais para visualização e análise dos dados. A proposta também O projeto busca impulsionar a inovação em energias limpas, a redução das emissões de carbono e o desenvolvimento tecnológico regional. No âmbito do tema “Diversidade, Inclusão e Transformação Social”, o trabalho impacta a formação de recursos humanos qualificados, a capacitação técnica e científica e a integração entre instituições, além de favorecer o desenvolvimento de soluções energéticas sustentáveis com potencial de ampliar o acesso a energia limpa e incentivar soluções descentralizadas.

Palavras-chave: biohidrogênio; hidrogênio sustentável; dinâmica molecular; LOHCs; DFT

Palavras-chave: biohidrogênio; dinâmica molecular; LOHCs; DFT.

UNIVERSIDADE DA INTEGRAÇÃO INTERNACIONAL DA LUSOFONIA AFRO-BRASILEIRA, REDENÇÃO, Discente,
itamarasousa@aluno.unilab.edu.br¹
UNIVERSIDADE DA INTEGRAÇÃO INTERNACIONAL DA LUSOFONIA AFRO-BRASILEIRA, REDENÇÃO, Docente,
aluisiomf@unilab.edu.br²