

TEMA DOUTORADO 1 – PPGEQ/UFSCar - 2024

ÁREA DE PESQUISA: Reatores Químicos Heterogêneos e Catálise

PROFESSOR: Ernesto Antonio Urquieta-González

TÍTULO: Catálise Ácida sobre Zeólitas: Transformação de Biomoléculas Plataforma em Produtos Químicos de Alta Demanda

RESUMO:

A pesquisa proposta se insere dentro dos fortes desafios tecnológicos impostos pela sociedade aos profissionais que atuam na área de catálise, os que se concentram na busca por matérias primas renováveis e processos químicos sustentáveis, os que devem conduzir à substituição de processos catalíticos homogêneos, fortemente contaminantes, por processos catalíticos heterogêneos. Assim, na pesquisa, em nível de doutorado, processos com catálise heterogênea serão aplicados à transformação de *biomoléculas plataforma* derivadas de lignocelulose, tendo como objetivo a obtenção de intermediários ou produtos químicos de alta demanda. Para esse fim, serão sintetizados catalisadores à base de zeólitas (peneiras moleculares), com propriedades físico-químicas, acidez e porosidade controladas, os que serão caracterizados por medidas de adsorção/dessorção de nitrogênio, análises químicas, termodesorção de amônia à temperatura programada (NH₃-TPD), difração de raios X (DRX) espectroscopia na região do infravermelho (FTIR), e na região do ultra violeta visível (UV-Vis) e, microscopia eletrônica de varredura (MEV) e de transmissão (MET). A pesquisa será realizada nos Laboratórios de Catálise do Centro de Pesquisas em Materiais Avançados e Energia (CPqMAE/UFSCar): <https://www.archdaily.com/777506/laboratories-ufscar-vigliecca-and-associados>; www.cpqmae.ufscar.br), a qual faz parte da temática do Centre of Excellence for Research in Sustainable Chemistry (www.cersuschem.ufscar.br).

Observação

Este tema está incluído na área de abrangência do PRH 39 ANP/FINEP – Biocombustíveis e Energias Alternativas - e poderá ser beneficiado com bolsa de estudos deste Programa. Mais informações sobre o PRH 39 podem ser obtidas no link: <https://www.deq.ufscar.br/pt-br/prh-anp/prh-anp-1>.

PALAVRAS-CHAVE: catálise heterogênea, zeólitas, produtos químicos bioderivados, lignocelulose.

TEMA DOUTORADO 2 – 2024

ÁREA DE PESQUISA: Reatores Químicos Heterogêneos e Catálise

PROFESSOR: Ernesto A. Urquieta-González (PPG-EQ), com a participação de docente convidado pertencente ao PPGEQ.

TÍTULO: *Desenvolvimento de Catalisadores para a Conversão Direta de Metano em Metanol*

RESUMO:

No cenário energético atual, o desenvolvimento de catalisadores ativos e seletivos para a Conversão Direta de Metano em Metanol é estratégico no contexto da Indústria de Petróleo e Gás e, em particular, na valorização do metano. A importância surge do fato do metano ser o principal constituinte do gás natural e do biogás, os quais possuem uma produção crescente no Brasil, respectivamente, pela descoberta de novas jazidas de petróleo e gás nos campos de extração offshore na camada do pré-sal e pelo desenvolvimento de tecnologias para o aproveitamento de resíduos orgânicos. Na pesquisa, em nível de doutorado, serão preparados catalisadores à base de zeólitas contendo cátions de cobre oxidados (oxocátions), que serão caracterizados por medidas de adsorção/dessorção de nitrogênio, análises químicas, termodesorção de amônia à temperatura programada (NH₃-TPD), redução com hidrogênio à temperatura programada (H₂-TPR), difração de raios X (DRX) espectroscopia na região infravermelho (FTIR), e na região do ultra violeta visível (UV-Vis) e, microscopia eletrônica de varredura (MEV) e de transmissão (MET). Os resultados experimentais serão validados pela Teoria do Funcional da Densidade (do inglês, *Density Functional Theory*, DFT). A pesquisa será realizada nos Laboratórios de Catálise do Centro de Pesquisas em Materiais Avançados e Energia (CPqMAE/UFSCar): <https://www.archdaily.com/777506/laboratories-ufscar-vigliecca-and-associados>; www.cpqmar.ufscar.br, que recebe suporte financeiro de Projeto Temático financiado pela FAPESP.

Observação

Este tema está incluído na área de abrangência do PRH 39 ANP/FINEP – Biocombustíveis e Energias Alternativas - e poderá ser beneficiado com bolsa de estudos deste Programa. Mais informações sobre o PRH 39 podem ser obtidas no link: <https://www.deq.ufscar.br/pt-br/prh-anp/prh-anp-1>.

PALAVRAS-CHAVE: conversão de metano a metanol, catálise heterogênea, zeólitas, oxocátions, DFT

ÁREA DE PESQUISA: Reatores Heterogêneos e Catálise

DOCENTE ORIENTADOR: Janaina Fernandes Gomes

TÍTULO: Conversão eletrocatalítica de CO₂ a combustíveis

RESUMO

As constantes mudanças climáticas e a crescente demanda mundial por fontes de energia renováveis impulsionaram o desenvolvimento de estratégias para reduzir a emissão de CO₂ e controlar os níveis atmosféricos deste gás. A conversão eletrocatalítica de CO₂ a combustíveis é uma abordagem promissora para ajudar a minimizar o acúmulo de CO₂ na atmosfera e os impactos ambientais associados a ele. Contudo, a baixa conversão de CO₂, a baixa seletividade à formação de um produto específico e/ou baixa estabilidade dos catalisadores sob condições reacionais são desafios a serem superados. Diversos estudos desenvolvidos por vários grupos de pesquisa indicam que diferentes estratégias, como a realização da reação em meio ácido na presença de cátions de metais alcalinos, o emprego de catalisadores bimetálicos ou híbridos, a aplicação de processos oxidativos a catalisadores à base de Cu e a utilização de catalisadores com diferentes geometrias, podem intensificar a conversão eletroquímica de CO₂ a compostos com dois ou mais átomos de carbono, como o etanol. O objetivo deste estudo é sintetizar catalisadores de metais não-nobres ainda não explorados, caracterizá-los e aplicá-los à eletro-redução de CO₂ sob diferentes condições reacionais, visando o desenvolvimento de uma rota tecnológica para conversão eletrocatalítica de CO₂ a combustíveis.

OBSERVAÇÃO: Este tema está incluído na área de abrangência do PRH 39 ANP/FINEP – Biocombustíveis e Energias Alternativas - e poderá ser beneficiado com bolsa de estudos deste Programa. Mais informações sobre o PRH 39 podem ser obtidas no link: <https://www.deq.ufscar.br/pt-br/prh-anp/prh-anp-1>

Palavras-chaves: eletrocatalise; eletro-redução de CO₂; metais não-nobres; combustíveis

ÁREA DE PESQUISA: Reatores Heterogêneos e Catálise

DOCENTE ORIENTADOR: Janaina Fernandes Gomes

TÍTULO: Conversão catalítica de gás de síntese em hidrocarbonetos líquidos

RESUMO

Hidrocarbonetos líquidos podem ser produzidos a partir de gás de síntese. Na reação clássica de Fischer-Tropsch, que normalmente é realizada sobre catalisadores metálicos de Fe, Co e Ru, a conversão de gás de síntese em hidrocarbonetos líquidos, como gasolina (C₅-C₁₁), combustível de aviação (C₈-C₁₆) e diesel (C₁₀-C₂₀), é limitada pela distribuição de Anderson-Schulz-Flory, o que resulta em baixas seletividades a estes compostos. O rendimento a combustíveis líquidos com cinco a vinte átomos de carbono pode ser aumentado por um segundo processo, que pode envolver hidrocraqueamento e isomerização. Zeólitas são materiais geralmente usados em reações catalisadas por sítios ácidos, como isomerização, oligomerização, aromatização, hidrogenação e hidrocraqueamento. Assim, catalisadores híbridos de Fischer-Tropsch e zeólitas, como a H-ZSM-5, têm sido desenvolvidos como uma alternativa para intensificar a conversão direta de gás de síntese em hidrocarbonetos líquidos. Nos catalisadores híbridos, os centros metálicos são responsáveis pela ativação do CO e pelo crescimento da cadeia carbônica, enquanto a função de sítios ácidos da zeólita é a de realizar o hidrocraqueamento e a isomerização. Eles podem ser combinados em um reator, usando-se diferentes configurações, como leitos consecutivos do catalisador de Fischer-Tropsch e da zeólita ou misturas físicas destes materiais. O catalisador e as condições reacionais determinam a distribuição de produtos, que pode compreender uma mistura complexa de hidrocarbonetos, contendo CH₄, olefinas e parafinas lineares e ramificadas. O desenvolvimento de um processo para a obtenção de hidrocarbonetos líquidos sobre materiais híbridos com propriedades otimizadas, sob condições reacionais adequadas, bem como a manutenção da estabilidade desses materiais ao longo do tempo de reação, são desafios a serem superados. Na reação, a oxidação da fase metálica é um dos problemas que leva à desativação do material. Metais nobres, como rutênio, rênio e platina, promovem a redução de óxidos metálicos e, por isso, podem ser adicionados a catalisadores de Fischer-Tropsch para auxiliar na estabilidade da fase metálica sob condições reacionais. A quantidade e a força dos sítios ácidos de zeólitas podem ser controladas por processos de desaluminação ou realuminação, troca iônica e substituição isomórfica. Além disso, os tamanhos de poros e canais das zeólitas também podem ser ajustados para otimizar a difusão de reagentes e produtos reacionais de interesse. Neste trabalho serão investigados novos catalisadores híbridos de Fischer-Tropsch e zeólita para a conversão direta de gás de síntese em hidrocarbonetos líquidos, sob diferentes condições reacionais, visando o desenvolvimento de um processo catalítico em fase gasosa viável.

OBSERVAÇÃO: Este tema está incluído na área de abrangência do PRH 39 ANP/FINEP – Biocombustíveis e Energias Alternativas - e poderá ser beneficiado com bolsa de estudos deste Programa. Mais informações sobre o PRH 39 podem ser obtidas no link: <https://www.deq.ufscar.br/pt-br/prh-anp/prh-anp-1>

Palavras-chaves: catalisadores híbridos; gás de síntese; hidrocarbonetos líquidos

ÁREA DE PESQUISA: Reatores Químicos Heterogêneos e Catálise

DOCENTE ORIENTADOR: João Batista Oliveira dos Santos

TÍTULO: Produção de gás natural sintético usando CO₂ e hidrogênio verde.

RESUMO

A produção sustentável de biocombustíveis é desejável do ponto de vista econômico, social, político e ambiental. A conversão de CO₂ para metanol, dimetil éter e metano têm despertado grande interesse por ser uma rota sustentável dependendo da fonte de hidrogênio. A produção sustentável de hidrogênio pode ser obtida pela eletrólise da água, reforma do etanol e gaseificação com captura de CO₂. A formação de gás natural sintético (CO₂ + 4 H₂ = CH₄ + 2 H₂O) utilizando H₂, gerado via eletrólise, é uma alternativa para o armazenamento de energia em usinas de geração de energia elétrica. O processo consiste na produção de metano quando há excedente de energia elétrica e consumo de metano para produzir energia elétrica quando há escassez de energia elétrica. A reação de formação de metano é chamada de metanação e é catalisada por Níquel. Recentemente, nosso grupo tem demonstrado que Ni/ZrO₂ suportado em nanotubos de carbono é um catalisador eficiente para essa reação. Entretanto, o diâmetro dos nanotubos de carbono e as quantidades de Ni e ZrO₂ ainda não foram otimizadas. Além disso, o método de preparação do catalisador precisa ser otimizado. Portanto, o objetivo deste trabalho é preparar e caracterizar catalisadores de Ni/ZrO₂ suportado em nanotubos de carbono e testar esses materiais na reação de hidrogenação do CO₂ para metano. A parte experimental consiste na preparação de catalisadores, caracterização dos materiais por difração de raios x, microscopia eletrônica de transmissão, XPS, TPR, e adsorção de gases. As medidas de atividade catalítica serão realizadas em um sistema reacional, que é composto por: reator de leito fixo, controladores de vazão, forno tubular e cromatógrafo à gás. A reação será realizada a pressão atmosférica, na faixa de 200 a 400 °C, e com diferentes velocidades espaciais usando uma mistura de CO₂ e hidrogênio na razão molar de 1/4. A outra parte do projeto é realizar a simulação do reator e do processo global de produção do gás natural sintético. A simulação será realizada no ASPEN PLUS usando o reator RPLUG, onde a expressão cinética da velocidade de reação será inserida. Em seguida, o processo global de produção do metano será simulado no ASPEN PLUS.

Palavras-chaves: Gás natural sintético; metano; hidrogênio; nanotubos de carbono; simulação.

ÁREA DE PESQUISA: Reatores Químicos Heterogêneos e Catálise

DOCENTE ORIENTADOR: João Batista Oliveira dos Santos

TÍTULO: Produção de hidrogênio via reforma a vapor do etanol: avaliação experimental e simulação do processo

RESUMO

A produção industrial de hidrogênio é realizada pela reforma do gás natural utilizando catalisador de Ni. A produção é feita em larga escala e de forma centralizada utilizando grandes reformadores (reatores de leito fixo). Em geral, o hidrogênio precisa ser comprimido, armazenado e enviado até o consumidor final. Com isso, o custo final do produto aumenta devido aos custos de transporte e de energia empregada na compressão. Uma forma de diminuir os custos de produção do hidrogênio é produzir esse produto de forma descentralizada, ou seja, o produto é produzido no local que será utilizado e na quantidade desejada. Para uma produção descentralizada de hidrogênio é necessário utilizar pequenos ou microrreatores. Esse conceito inovador de produção descentralizada, com pequenos reatores modulares oferece vantagens significativas em relação a produção centralizada de produtos. Reatores com pequenas dimensões físicas apresentam elevada razão entre a área e o volume disponível para realizar a reação. Além disso, as propriedades de transporte, tais como transferência de calor e massa, são maiores do que em reatores convencionais. Além disso, o catalisador é utilizado em sua totalidade devido a sua dispersão e, como a distribuição de calor é uniforme, não ocorre a presença de pontos quentes ou frios no reator. Reatores compactos consistem em uma estrutura similar a um trocador de calor de placas planas, ou seja, o reator é construído em camadas alternadas, onde ocorre a reação química, e camadas onde passa um fluido refrigerante para fornecer ou retirar calor do reator. As camadas em que ocorrem a reação são construídas com catalisadores estruturados e, em seguida, são soldadas as camadas onde passa um fluido refrigerante. Esses reatores compactos podem ser construídos de forma modular para que possam ser acoplados e aumentar, se necessário, a produção de hidrogênio. A vantagem da construção modular é a facilidade de manutenção do reator e a substituição do catalisador. Portanto, o objetivo deste projeto é avaliar reatores tradicionais e compactos/modulares para a produção de hidrogênio a partir da reforma do etanol. O etanol foi escolhido por ser um produto bem conhecido e amplamente produzido no Brasil. Além disso, o etanol já foi amplamente utilizado por nosso grupo de pesquisa para produzir hidrogênio via reforma a vapor ou reforma autotérmica. O projeto consiste na avaliação dos efeitos das variáveis de processo no desempenho do reator. Paralelo a parte experimental, uma simulação do reator e do processo global também será realizada.

Palavras-chaves: Hidrogênio; Etanol; Reator modular compacto; Catalisador de Ni;

TEMA PARA DOUTORADO – 1º SEMESTRE DE 2024

ÁREA DE PESQUISA: Reatores Heterogêneos e Catálise

PROFESSOR: José Mansur Assaf

Compostos químicos de interesse industrial obtidos da transformação catalítica de metano e CO₂

OBSERVAÇÃO: *Este tema está incluído na área de abrangência do PRH 39 ANP/FINEP – Biocombustíveis e Energias Alternativas - e poderá ser beneficiado com bolsa de estudos deste Programa. Mais informações sobre o PRH 39 podem ser obtidas no link: <https://www.deq.ufscar.br/pt-br/prh-anp/prh-anp-1>*

RESUMO:

O biogás, que contém metano e CO₂ como principais componentes, é produzido na decomposição anaeróbia de material orgânico, que é parte importante do tratamento de efluentes industriais, visando seu aproveitamento e valorização, evitando descarte na natureza. Metano e CO₂ são também produzidos em dezenas de outros processos industriais e especialmente o CO₂ é produto da queima de combustíveis.

A utilização destes gases como insumos industriais contribui para minimizar as mudanças climáticas globais causadas pelo aumento das emissões e proporciona uma oportunidade de exploração de novos conceitos para o desenvolvimento da catálise e da indústria química. Tanto a molécula de CO₂, quanto a de CH₄ são termodinamicamente estáveis e demandam alta energia para serem ativadas, o que constitui um desafio científico ao desempenho dos catalisadores, pois este depende de vários parâmetros, como natureza da fase ativa e dos suportes e condições de operação reacional.

Estudos teóricos e experimentais têm contribuído para a identificação de intermediários-chave, o que pode auxiliar na obtenção de maiores conversão e seletividade para um determinado produto.

Várias rotas de valorização destes gases podem ser exploradas, desde a produção de H₂ e CO, que são intermediários para produção de combustíveis sintéticos, até a conversão em ácidos e outros compostos orgânicos.

Este trabalho visa avançar nas pesquisas de valorização de metano e CO₂, estudando a seleção de catalisadores e rotas químicas para produção de compostos químicos de valor industrial. Está inserido em um Projeto Temático Multitemático sobre biorrefinarias, com participação de vários grupos de pesquisas, financiado pela FAPESP. Conta também com o apoio do programa PRH - Biocombustíveis e Energias Alternativas, financiado pela ANP e FINEP.

PALAVRAS-CHAVE: transformação do biogás, valorização de CH₄ e CO₂, gás de síntese, combustíveis sintéticos, reações de interesse ambiental.

TEMA PARA DOUTORADO – 1º SEMESTRE DE 2024

ÁREA DE PESQUISA: Catálise

PROFESSORES: José Mansur Assaf e Luiz Henrique Vieira

TÍTULO: Combustíveis renováveis e outros produtos químicos obtidos da conversão de biomassa lignocelulósica com catalisadores que ativos, de fácil separação e de alta reusabilidade

OBSERVAÇÃO: *Este tema está incluído na área de abrangência do PRH 39 ANP/FINEP – Biocombustíveis e Energias Alternativas - e poderá ser beneficiado com bolsa de estudos deste Programa.*

Mais informações sobre o PRH 39 no link: <https://www.deq.ufscar.br/pt-br/prh-anp/prh-anp-1>

RESUMO:

A conversão de biomassa lignocelulósica em combustíveis e outros produtos químicos requer a utilização de hemicelulose e celulose, consistindo principalmente de açúcares C5 e C6. A conversão catalítica da hemicelulose é particularmente importante devido à baixa eficiência da conversão biológica de açúcares C5 [1]. Dentre os compostos que podem ser obtidos a partir dos açúcares C5, o furfural torna-se uma opção promissora, sendo precursor da síntese de uma série de compostos de relevância na indústria química, como por exemplo, a g-valerolactona, que se apresenta como uma alternativa na busca de processos sustentáveis para a substituição de petroquímicos, tornando-se uma importante matéria-prima na produção de combustíveis renováveis [2]. A produção da g-valerolactona a partir do furfural envolve etapas de hidratação/desidratação e transferência de hidrogênio, sendo catalisada por uma combinação de sítios ácidos de Lewis e Brønsted. A utilização de catalisadores heterogêneos para um processo de conversão direta do furfural em g-valerolactona se torna atrativa do ponto de vista da facilidade na separação ao final do processo, e alta reusabilidade desses materiais. Considerando as demandas do processo, este projeto será focado no desenvolvimento e aplicação de sistemas catalíticos compostos por misturas físicas de materiais zeolíticos e estruturas de carbono dopado contendo single-atoms de metais de transição. As propriedades estruturais e químicas dos materiais serão investigadas aplicando um amplo conjunto de técnicas analíticas de forma a estabelecer uma relação com a atividade catalítica.

[1] E. I. Gürbüz, J. M. R. Gallo, D. M. Alonso, S. G. Wettstein, W. Y. Lim, J. A. Dumesic, *Angew. Chemie Int. Ed.* 2013, 52, 1270–1274.

[2] S. Zhu, Y. Xue, J. Guo, Y. Cen, J. Wang, W. Fan, *ACS Catal.* 2016, 6, 2035–2042.

PALAVRAS-CHAVE: biomassa; furfural; carbono dopado; catálise por single-atoms; zeólitas.

TEMA PARA DOUTORADO – Edital N^o 04/2023

ÁREA DE PESQUISA: Reatores Químicos Heterogêneos e Catálise

PROFESSOR: Jose Maria Correa Bueno

TÍTULO: Understanding the surface chemistry on Cu-based catalysts on the CO₂ hydrogenation to methanol. .

RESUMO: Hydrogenation of CO₂ into methanol with H₂ represents a route of interest for renewable energy production and CO₂ utilization. A commercial utilization of this molecule would improve the overall sustainability products for the fuel and chemical industry from CO₂. The hydrogenation of CO₂ can follow three main pathways: (i) formation of formate (HCOO), which is further hydrogenated to dioxyethylene (H₂COO), followed by methoxide (H₃CO) to methanol; (ii) formation of CO following the retro-Water Gas Shift reaction (r-WGS); (iii) CO₂ could be protonated to hydrocarboxyl (COOH) followed by COHOH, which then decomposes to COH, an intermediate to methanol.¹⁻³ Indeed, the r-WGS pathway appears to be the most energetically favorable process² which is a major drawback in the process, since CO₂ and H₂ are consumed to form CO and water.

Hence, the suppression of the r-WGS is one of the major challenges in the CO₂ hydrogenation to methanol. The cost-prohibitive In₂O₃ was found to block the r-WGS pathway due to the arrangement of the vacancies which are selectively activate CO₂ over CO.^{3,4}

In this project, it will be proposed the synthesis of Cu-based catalysts, their modification and use in the CO₂ reduction to methanol. Copper catalysts have shown high catalytic activity for hydrogenation, but also to WGS and r-WGS.⁵ Bueno and coworkers have identified a correlation between Cu⁰/Cu^{δ+} ratio as well as the bond length Cu-O.⁶⁻⁹ As it regards the hydrogenation of CO₂, the role of Cu⁰ and Cu^{δ+} in interaction with oxides as ZrO_x is not yet clear and different studies have reached contradictory conclusions on their roles.^{10,11} Indeed, the understanding of the CO₂ hydrogenation over the Cu surface needs refinement and fundamental surface studies, which include controlling the electronic properties and the surface species distribution at an atomic level and the electronic properties. The interaction of Cu with the support or an alloys heteroatom might lead to significant changes in these properties.

Cu nanoparticles supported in metal oxides with different surface properties, such as SiO₂, Al₂O₃, ZrO₂ and CeO₂ will be prepared, seeking to understand the effect of the support. The catalytic activities will be rationalized based on the characterization techniques, with a special attention to the in situ EXAFS.

In a second phase of the project, supported Cu will be alloyed with Ni or Au, seeking to tailor the surface electric properties of the nanoparticle. Once again, the structure and surface properties of the nanoparticles will be studied the traditional characterization techniques, as well as in situ XAS analyses in order to explain the catalytic behaviors.

References

(1) Yang, Y.; et al. *Phys. Chem. Chem.* 2010, 12, 9909; (2) Grabow, L. C.; Mavrikakis, M. *ACS Catal.* 2011, 1, 365; (3) Ye, J.; et al. *ACS Catal.* 2013, 3, 1296. (4) Ye, J. et al. *J. Phy. Chem. C* 2012, 116, 7817. (5) Chen, C.-S.; Lin, J.-H.; et al. *J Catal* 2009, 263, 155. (6) Caldas, P. C. P.; et al. *ACS Catal.* 2017, 2419. (7) Freitas, I. C.; et al. *J. Mol. Catal. a-Chemical* 2014, 381, 26. (8) Sato, A. G.; et al. *J. Catal* 2013, 307, 1. (9) Sato, A. G.; et al. *Catal. Comm.* 2012, 26, 122. (10) Chen, C.-S.; Cheng, W.-H. *Catal. Lett.* 2002, 83, 121. (11) Wang, Z.-Q.; et al. *ACS Catal.* 2015, 5, 4255.

PALAVRAS-CHAVE: CO₂, hydrogenation, catalysis

ÁREA DE PESQUISA: AP2 - Reatores Químicos Heterogêneos e Catálise

DOCENTE ORIENTADOR: Luiz Henrique Vieira

TÍTULO: Desenvolvimento de sistemas de adsorventes catalíticos para processos integrados de captura e conversão de CO₂ em temperaturas brandas

RESUMO

O projeto refere-se ao desenvolvimento de novos adsorventes catalíticos inorgânicos, que serão constituídos por misturas físicas de adsorventes mesoestruturados porosos de alta área específica e catalisadores heterogêneos de metais atômicamente dispersos (*single-atoms*) estabilizados sobre suportes com elevada concentração de defeitos superficiais. Para a preparação dos adsorventes, diferentes estratégias de síntese devem ser empregadas (*hard- and soft-templating methods*) de modo a comparar as propriedades de textura e superfície dos materiais. A preparação da fração de catalisador do sistema deve explorar o papel da concentração de defeitos estruturais na estabilização dos sítios ativos (*single-atoms*) através da exposição controlada de determinados planos cristalinos na superfície do suporte. A aplicação manterá o foco em ciclos de captura de CO₂ de misturas de pós-combustão provenientes de centrais de geração de energia termoelétrica (8-10% CO₂, 18-20% H₂O, 2-3% O₂, and 67-72% N₂) seguidos por ciclos de conversão em CO, através da rota reversa ao deslocamento gás-água (rWGS), em processo integrado isotérmico utilizando condições brandas. Intermediário em diversos processos industriais, o CO tem grande interesse comercial, e sua obtenção a partir do CO₂ capturado é altamente desejada, porém pouco foi explorado sobre sua produção em sistemas integrados de captura e conversão, sendo a produção em condições reacionais brandas ainda inédita.

Palavras-chaves: captura de CO₂; conversão de CO₂; pós-combustão; monóxido de carbono; catálise por *single-atoms*