

**ÁREA DE PESQUISA: Reatores Heterogêneos e Catálise**

**DOCENTE ORIENTADOR: Janaina Fernandes Gomes**

**TÍTULO: Conversão eletrocatalítica de CO<sub>2</sub> 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 CO<sub>2</sub> e controlar os níveis atmosféricos deste gás. A conversão eletrocatalítica de CO<sub>2</sub> a combustíveis é uma abordagem promissora para ajudar a minimizar o acúmulo de CO<sub>2</sub> na atmosfera e os impactos ambientais associados a ele. Contudo, a baixa conversão de CO<sub>2</sub>, 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 CO<sub>2</sub> 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 CO<sub>2</sub> sob diferentes condições reacionais, visando o desenvolvimento de uma rota tecnológica para conversão eletrocatalítica de CO<sub>2</sub> 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 CO<sub>2</sub>; metais não-nobres; combustíveis

**ÁREA DE PESQUISA:** Reatores Químicos Heterogêneos e Catálise

**DOCENTE ORIENTADOR:** João Batista Oliveira dos Santos

**TÍTULO: Produção de energia limpa e materiais estruturados via decomposição catalítica do metano.**

**RESUMO**

A produção de materiais estruturados, ou seja, nanotubos de carbono e energia limpa pode ser feita pela decomposição do metano utilizando um catalisador metálico suportado. A energia limpa consiste no Hidrogênio, que é produzido sem a presença de contaminantes, tais como CO e CO<sub>2</sub>, evitando assim etapas de purificação e diminuindo os custos com o processo. Os metais (Fe, Ni, Co), em conjunto com os suportes (alumina, sílica, magnésia e zircônia), são os mais utilizados na decomposição do metano. Single-walled carbon nanotubes (SWNTs) e multi-walled carbon nanotubes (MWNTs) podem ser produzidos dependendo das condições reacionais e do catalisador empregado. Nanotubos de carbono podem ser utilizados em diversas áreas, tais como eletrônica, materiais, catálise, ambiental e médica. A aplicação e o preço de nanotubos de carbono depende da sua qualidade (tamanho e uniformidade das paredes). A aplicação industrial da decomposição do metano para produção de nanotubos de carbono com alto rendimento, elevada pureza e perfeita orientação, ainda é limitada. A ampla aplicação industrial de nanotubos de carbono só será atingida se um catalisador eficiente for desenvolvido e o processo for completamente entendido.

O crescimento de carbono sobre a superfície de um catalisador depende de vários fatores, como por exemplo: tipo e teor do metal, tamanho médio da partícula metálica, interação metal-suporte e velocidade de difusão do carbono. O catalisador de Ni é o mais ativo para a decomposição do metano e mostra elevada atividade em temperaturas entre 450 e 500 °C. O Cobalto apresenta baixa atividade catalítica e a produção de nanotubos de carbono é bem menor em relação ao catalisador de Ni. O catalisador de Ferro é interessante para a produção de nanotubos de carbono, mas a reação de decomposição do metano deve ser realizada em temperaturas elevadas (acima de 650 °C). A utilização de catalisadores bimetálicos ou a utilização de promotores pode aumentar a produção de nanotubos de carbono. Por exemplo, a adição de Cu ao catalisador de Ni aumentou a produção de nanotubos de 22 para 525 g de carbono por g de catalisador. A adição de Pd ao catalisador de Ni resultou na maior produção de nanotubos de carbono, cerca de 1170 g de carbono por g de catalisador.

Portanto, para se obter elevada conversão do metano em hidrogênio e produzir nanotubos de carbono é essencial encontrar um catalisador com elevada atividade e estabilidade. O objetivo desse trabalho é desenvolver um catalisador bimetálico e otimizar o processo de produção de nanotubos de carbono. Os catalisadores estudados serão a base de Ni/Fe e suportados em alumina/zircônia. Esses catalisadores serão modificados com outros metais com o objetivo de aumentar a produção de nanotubos de carbono. Os materiais serão preparados por impregnação e caracterizados por difração de raios-x, microscopia eletrônica de transmissão, espectroscopia Raman e medidas de adsorção de gases. A decomposição do metano será realizada em um reator PBR, operado a pressão de 1 atm e em temperaturas entre 600-800 °C.

**Palavras-chaves:** Hidrogênio; Metano; Nanotubos de carbono; Catalisadores de Ni e Fe;

<b>ÁREA DE PESQUISA: Reatores Químicos Heterogêneos e Catálise</b>
<b>DOCENTE ORIENTADOR: José Maria Correa Bueno</b> <b>Coorientadora: Alice Medeiros de Lima</b>
<b>TÍTULO: Desenvolvimento de novo processo para abater N<sub>2</sub>O a partir de metano para produção de metanol</b>
<b>RESUMO</b> <p>A molécula de N<sub>2</sub>O é formada no processo industrial para produção do ácido adípico. O N<sub>2</sub>O juntamente com CO<sub>2</sub> e CH<sub>4</sub> são gases causadores do agravamento do efeito de estufa. Quando produzido em um processo industrial deve ser abatido termicamente, podendo também se utilizar catalisadores. Contudo, esse abate ocorre com alto consumo de energia e existe um grande interesse que esse oxidante venha a ser utilizado na produção de produtos químicos. Com esse objetivo propomos a sua utilização na oxidação parcial do metano para a produção do metanol. O uso de N<sub>2</sub>O já foi utilizado para oxidação parcial do metano em processo chamado de “<i>chemical looping</i>”. Sendo a reação realizada ao menos em três etapas: i) oxidação do metano a metanol pelos cluster de CuO<sub>x</sub>H<sub>y</sub>; ii) extração do metanol por vapor de H<sub>2</sub>O e iii) reativação do material por tratamento térmico em oxidante com O<sub>2</sub>, utilizando-se catalisadores a base de Cu-O-zeólitas. Os estudos realizados até o momento em nosso grupo de pesquisa, através do projeto temático 2018/01258-5, demonstram que o O<sub>2</sub> pode ser substituído por N<sub>2</sub>O, resultando em um processo altamente seguro que permite o trabalho em temperaturas mais amenas e com modulação dos reagentes. Além disso, dependendo da estrutura da zeólita e das estruturas dos clusters CuO<sub>x</sub>H<sub>y</sub> é possível suprimir a etapa de extração do metanol. Propõe-se também a utilização de ferramentas da Engenharia de Sistemas em Processos (PSE) para avaliar dos pontos técnico, econômico e ambiental o novo processo, levando à definição de métricas e alvos de performance que possam torná-lo viável considerando essas perspectivas. Assim, neste projeto temos o objetivo de desenvolver um novo processo para abatimento do N<sub>2</sub>O com a oxidação do metano a metanol, de alto rendimento a metanol obtidos através da combinação natureza de zeólita, estrutura do cluster CuO<sub>x</sub>H<sub>y</sub> e operação do reator com modulação com a avaliação técnico, econômica e ambiental do novo processo.</p> <p>Para a realização deste trabalho, buscamos um(a) candidato(a) com formação na área de Engenharia Química ou demais áreas relacionadas, com interesse em estudos envolvendo reatores químicos heterogêneos, catálise e engenharia de sistemas em processos. Conhecimentos de técnicas de catálise e engenharia de sistemas são desejáveis. Entre os conhecimentos que devem ser adquiridos ao longo do desenvolvimento do projeto, estão:</p> <ul style="list-style-type: none"><li>• Técnicas de preparo de zeólitas, caracterização de catalisadores, condução de testes em reatores heterogêneos</li><li>• Técnicas de modelagem e simulação de processos utilizando o simulador de processos da suíte aspenONE, de avaliação econômica com ferramentas da Engenharia Econômica e de avaliação ambiental, empregando a metodologia de Análise de Ciclo de Vida (LCA)</li><li>• Redação de artigos e relatórios científicos</li></ul> <p><b>Existe possibilidade de financiamento da Empresa Rhodia.</b></p> <p><b>Palavras-chaves:</b> N<sub>2</sub>O, CuO-Zeolitas, catalisador, metano, Avaliação econômica</p>