

# TEMAS DE DOUTORADO

## AP-2: REATORES QUÍMICOS HETEROGÊNEOS E CATÁLISE

**EDITAL Nº 04/2022 – INGRESSO NO 1º SEMESTRE DE 2023**

**OBSERVAÇÃO:** PARA CONTACTAR O DOCENTE, ACESSE <https://www.ppgeq.ufscar.br/pt-br/docentes>

**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 se insere dentro de fortes desafios tecnológicos impostos à comunidade científica, em busca da sustentabilidade do planeta. Um deles se refere à substituição de processos químicos industriais homogêneos, fortemente contaminantes, por processos catalíticos heterogêneos. O outro, também de grande relevância, considera a substituição de matérias primas de origem fóssil por outras de origem renovável, minimizando os impactos ao meio ambiente. Assim, processos catalíticos heterogêneos aplicados à transformação de biomoléculas, vem adquirindo importância estratégica. Com esse objetivo, durante o desenvolvimento da pesquisa em nível de doutorado, serão sintetizados catalisadores à base de zeólitas (peneiras moleculares), com propriedades físico-químicas, acidez e porosidade controladas, as que serão aplicadas na transformação de *biomoléculas plataforma* derivadas de lignocelulose, para a obtenção de intermediários ou produtos químicos de alta demanda. A caracterização físico-química dos catalisadores preparados, será realizada utilizando adsorção de nitrogênio, análises químicas, NH<sub>3</sub>-TPD, DRX, FTIR, 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](http://www.cpqmae.ufscar.br)), a qual faz parte da temática do Centre of Excellence for Research in Sustainable Chemistry (CERSusChem/UFSCar).

**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.**

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

**PROFESSOR: Ernesto Antonio Urquieta-González**

**TÍTULO: Valorização de Bio-moléculas Plataforma como Matéria Prima na Produção de Bio-combustíveis – Zeólitas Ácidas como Catalisadores**

**RESUMO:**

A pesquisa se insere dentro de fortes desafios tecnológicos impostos à comunidade científica, em busca da sustentabilidade do planeta. Um deles se refere à substituição de processos químicos industriais homogêneos, fortemente contaminantes, por processos catalíticos heterogêneos. O outro, também de grande relevância, considera a substituição de matérias primas de origem fóssil por outras de origem renovável, minimizando os impactos ao meio ambiente. Assim, processos catalíticos heterogêneos aplicados à transformação de biomoléculas, vem adquirindo importância estratégica. Com esse objetivo, durante o desenvolvimento da pesquisa em nível de doutorado, serão sintetizados catalisadores à base de zeólitas (peneiras moleculares), com propriedades físico-químicas e porosidade controladas, as que serão aplicadas na transformação de *biomoléculas plataforma* derivadas de lignocelulose, para a obtenção de biocombustíveis. A caracterização físico-química dos catalisadores, será realizada utilizando adsorção de nitrogênio, análises químicas, NH<sub>3</sub>-TPD, DRX, FTIR, 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](http://www.cpqmae.ufscar.br)), a qual faz parte da temática do Centre of Excellence for Research in Sustainable Chemistry (CERSusChem/UFSCar).

**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.**

**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:** Desenvolvimento de um reator compacto e modular para produção de hidrogênio.

**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 micro reatores. 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 ocorre 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 desenvolver um reator compacto e modular 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 no desenvolvimento, construção e operação do reator modular. Testes experimentais do reator modular serão realizados com o objetivo de otimizar a produção de hidrogênio.

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

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

**PROFESSOR: José Mansur Assaf**

**Compostos químicos de valor agregado obtidos da transformação catalítica do biogás**

**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 é produzido no processo de decomposição anaeróbia de material orgânico, que é parte importante do tratamento de efluentes industriais, visando seu aproveitamento e valorização, evitando descarte na natureza. Seus principais componentes são o metano e o dióxido de carbono.

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 CO<sub>2</sub>, quanto a de CH<sub>4</sub> 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 a 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 do biogás podem ser exploradas, como a produção de H<sub>2</sub> e CO como intermediários na produção de combustíveis sintéticos, até a conversão em ácidos e outros compostos orgânicos.

Este trabalho visa avançar nas pesquisas de valorização do biogás, 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 pesquisadores 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 CH<sub>4</sub> e CO<sub>2</sub>, gás de síntese, combustíveis sintéticos, reações de interesse ambiental.

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

**PROFESSOR: José Mansur Assaf**

**Valorização do CO<sub>2</sub> – Conversão em produtos com valor de mercado**

**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:**

As grandes empresas que de maneira direta ou indireta geram poluentes gasosos, principalmente CO<sub>2</sub>, têm aumentado muito seu interesse no desenvolvimento de tecnologias para mitigação de problemas ambientais, como as mudanças climáticas. Entre estas tecnologias, são importantes os processos de captura e utilização de carbono (CCU).

Entre os interesses nesta área, destaca-se o desenvolvimento de processos que usam o CO<sub>2</sub> como matéria-prima para conversão em produtos com valor de mercado, tais como combustíveis, compostos químicos e outros compostos de interesse industrial.

A conversão de CO<sub>2</sub> em produtos de maior valor agregado, tem como primeiro passo uma etapa de hidrogenação, que pode ser seguida de outras transformações químicas que levem a combustíveis, intermediários químicos e/ou aldeídos, éteres, álcoois, etc.

Estas reações podem ocorrer em fase gasosa ou líquida, em reatores contínuos ou em batelada e são processos reacionais heterogêneos, com catalisadores na forma sólida contendo metais em sua composição.

Ácido fórmico, alcoóis, dimetil-éter e carbonatos são produtos que podem ser obtidos tendo CO<sub>2</sub> como molécula de partida.

Neste trabalho, o doutorando irá selecionar e estudar uma reação de valorização de CO<sub>2</sub> que seja de interesse econômico e ambiental. O trabalho experimental constará de preparação, caracterização e testes de catalisadores sólidos para este processo.

**PALAVRAS-CHAVE:** **catálise ambiental, hidrogenação de CO<sub>2</sub>, produtos químicos de origem renovável, preparação e aplicação de catálise heterogênea.**

<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>
<p><b>RESUMO</b></p> <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>

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

**DOCENTE ORIENTADOR: José Maria Correa Bueno**

**TÍTULO: Desenvolvimento de novos catalisadores a base de Ni para reforma do etanol livre da deposição de carbono e formação de metano**

**RESUMO**

As projeções atuais da expansão do consumo mundial de energia, vinculada ao crescimento populacional e ao acesso aos bens tecnológicos, indicam um aumento na demanda de 30% até 2040 e novas fontes renováveis e de baixo impacto ambiental têm sido buscadas. Uma possibilidade tem sido o uso de H<sub>2</sub> como fonte primária de energia, além do já estabelecido como insumo para processos industriais. O H<sub>2</sub> a partir de fontes que não emitam, secundariamente CO<sub>2</sub>, é uma alternativa fundamental para diminuir o impacto ambiental do uso da energia. Considerando uma transição energética renovável, o H<sub>2</sub> destaca-se para geração de energia e também como um insumo de processos industriais estratégicos. A produção de H<sub>2</sub> via reforma do etanol e bio-gás pode contribuir para um avanço na produção de H<sub>2</sub> no Brasil por diferentes tecnologias e baixo impacto ambiental. Nosso grupo de pesquisa já acumula conhecimento nessa área de reforma do etanol, as principais publicações estão compiladas na revisão<sup>1</sup>. Os catalisadores a base de Ni, usado industrialmente para reforma do metano, quando aplicados a reforma de moléculas menos estáveis como o etanol apresenta alta atividade para acúmulo de carbono na superfície, o qual desativa o catalisador. Além disso em baixa temperatura tem-se a formação de metano e CO. A formação de ligas do tipo Ni-Fe influencia na deposição de carbono sobre a superfície do catalisador durante a reação de reforma. Estas espécies de óxido de metais como Fe na superfície das partículas podem auxiliar na oxidação do carbono formado sobre a superfície de metais e também modificar a rota reacional de reforma na oxidação sem que passe pela formação de carbono. Essa modificação de rota reacional pode suprimir a formação de metano.

Espera-se assim que o estudo científico do problema e de como os pontos chave citados que afetam a estabilidade levará ao entendimento da reação e conseqüentemente o desenvolvimento de catalisadores a base de Ni estáveis para reforma a vapor do etanol.

*Impacto esperado: -Desenvolvimento de novos catalisadores para reforma do etanol para operação a baixa temperatura sem formação de CH<sub>4</sub> e altamente resistente a deposição de carbono em operação de razões vapor/carbono próximo ao estequiométrico.* Esta pesquisa está integrada ao Laboratório de Hidrogênio da UFSCar e será fundamental para troca de conhecimentos das diferentes tecnologias para produção de H<sub>2</sub> e de formação de recursos humanos especializados, que serão tão necessários nos próximos anos

1- Zanchet, Daniela ; SANTOS, JOAO BATISTA O. ; DAMYANOVA, SONIA ; GALLO, JEAN MARCEL R. ; C. BUENO, JOSÉ MARIA . Toward Understanding Metal-Catalyzed Ethanol Reforming. ACS Catalysis, v. 1, p. 3841-3863, 2015. 1-

*Existe a possibilidade de bolsa CNPq-projeto Laboratório de H<sub>2</sub> UFSCar.*

**Palavras-chaves:** Máximo 05 (cinco) palavra 1; palavra 2; palavra 3; palavra 4; palavra 5