

TEMA DOUTORADO – PPGEQ/UFSCar – 2º semestre 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. Assim, na pesquisa, em nível de doutorado, processos catalíticos 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-vigliacca-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).

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

TEMA DE DOUTORADO – EDITAL N° 01/2024

ÁREA DE PESQUISA: Reatores Químicos Heterogêneos e Catálise

DOCENTE ORIENTADOR: Janaina Fernandes Gomes

TÍTULO: Hidrogenação de CO₂ a metanol

RESUMO

Devido ao intenso consumo de energia associado ao crescimento da população e a atividades humanas, emissões atmosféricas contendo CO₂ e outros gases, resultantes da exploração e do emprego do petróleo e de seus derivados, crescem a cada ano em ritmos mais acelerados. O aumento da concentração atmosférica de CO₂ é o principal causador da intensificação do efeito estufa e do conseqüente incremento da temperatura global a níveis acima do esperado, com impactos desastrosos ao meio ambiente. Nesse contexto, a captura seguida da utilização do CO₂ tem sido considerada uma estratégia interessante na tentativa de mitigar as emissões desse gás e reaproveitá-lo como matéria-prima na síntese de produtos químicos de interesse comercial. O CO₂ é tradicionalmente empregado em processos industriais de produção de uréia, ácido salicílico e carbonatos. Como alternativa, a hidrogenação catalítica do CO₂ a metanol e outros produtos têm sido muito estudada, com a aplicação de diversos tipos de catalisadores. Dentre os catalisadores já investigados para a síntese de metanol a partir da hidrogenação em fase gasosa de CO₂, aqueles à base de cobre apresentam os desempenhos mais promissores, além de serem relativamente mais baratos e duráveis. O emprego do cobre puro não é vantajoso para essa reação e a sua associação ao zinco, ou a outro metal facilmente oxidável, é necessária para que se obtenha um catalisador eficiente. A introdução de promotores, como Ga₂O₃, proporciona melhoria no desempenho catalítico. Há uma quantidade considerável de dados empíricos que comprova essas relações. Entretanto, é preciso desenvolver uma compreensão sobre o mecanismo da reação, o papel dos sítios ativos e os efeitos do suporte e do promotor no desempenho dos materiais. Esse conhecimento é fundamental para se possa adequar as características do catalisador ao processo de interesse. Apesar de ter sido extensivamente estudado no processo em questão, catalisadores à base de Cu ainda apresentam limitações na síntese de metanol devido ao impacto da água formada como co-produto da reação de hidrogenação de CO₂ e da reação reversa à de deslocamento gás-água, que ocorre em paralelo. Além disso, as condições termodinâmicas que favorecem a síntese de metanol na hidrogenação catalítica de CO₂ são baixa temperatura e alta pressão. No entanto, a cinética é beneficiada pelo aumento da temperatura, que ocasiona também a redução da seletividade ao metanol, uma vez que a reação reversa à de deslocamento gás-água é endotérmica. Dessa forma, o desenvolvimento de novos catalisadores deve almejar alta atividade e seletividade a temperaturas de até 250 °C e estabilidade sob condições reacionais por longos períodos durante operação contínua. Adicionalmente, como a síntese de metanol via hidrogenação de CO₂ é exotérmica, o reator deve proporcionar um eficiente controle da temperatura e, além disso, uma alta conversão por passe é desejável para minimizar custos de separação. O objetivo deste projeto é desenvolver novos catalisadores para a hidrogenação de CO₂ a metanol e empregar sistemas reacionais que permitam a remoção/transferência de calor.

Palavras-chaves: Hidrogenação de CO₂; catalisadores; metanol

TEMA PARA DOUTORADO – 2º SEMESTRE DE 2024

ÁREA DE PESQUISA: Reatores Heterogêneos e Catálise

PROFESSOR: José Mansur Assaf

Biocombustíveis e compostos químicos de interesse industrial obtidos de metano e CO₂ - valorização de biomassa aplicada a processos sustentáveis

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 Multitemático sobre biorrefinarias, com participação de vários grupos de pesquisas, financiado pela FAPESP*

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