



6° Encontro de
**Catálise
Regional 2**
RJ, MG e ES - 2025

LIVRO DE RESUMOS

10 E 11 DE ABRIL DE 2025

REALIZAÇÃO



PATROCÍNIO

analítica

 **SHIMADZU**



6º Encontro de **Catálise Regional 2** RJ, MG e ES - 2025

COMITÊ ORGANIZADOR

Alexandre Barros Gaspar - INT
Ana Paula de Carvalho - UFMG
Carlos Andres Ortiz Bravo - UFF
Cristiane Assumpção Henriques - UERJ
Fabio Souza Toniolo - UFRJ
José Luiz Zotin - Petrobras
Maria Auxiliadora Scaramelo Baldanza - UFRJ
Thiago Melo de Lima - UFF

AVALIADORES

Alexandre Barros Gaspar - INT
Ana Paula de Carvalho - UFMG
André VonHeld Soares - UFF
Camila Lois Oreiro Ferreira - UERJ
Carlos Andres Ortiz Bravo - UFF
Carolina Guimarães de Souza Lima - UFF
Caroline Duarte Prates - UFMG
Cristiane Assumpção Henriques - UERJ
Debora da Silva Fernandes - UERJ
Debora Morais Bezerra - UFRJ
Erika Batista Silveira - INT
Eugenio Furtado de Souza - UFRJ
Fábio Bellot Noronha - INT
Fabio Souza Toniolo - UFRJ
Jonas Albuquerque - UFF
Lídia Oazem de Oliveira da Costa - INT
Ludmila Cabral - UFF
Marco André Fraga - INT
Rayane Cristian Ferreira Silva - UFMG
Rubens Lucas de Freitas Filho - UFMG
Thiago de Melo Lima - INT
Vitor Duarte Lage - UFRJ
Zilacleide da Silva Barros Sousa - UERJ

COMITÊ DE APOIO

Chayenne Felix da Silva
Débora Morais Bezerra
Guilherme Vittorazzi Salvador
Idia Gigante Nascimento
Jonas Santana Albuquerque
Marcelo Avelar do Nascimento
Vitor Duarte Lage

ADMINISTRATIVO

Luciana Martins Oliveira da Silva

APRESENTAÇÃO

A Regional 2 da Sociedade Brasileira de Catálise (SBCat) tem o prazer de apresentar à comunidade brasileira o Livro de Resumos do 6º Encontro de Catálise da Regional 2 (ERCAT), realizado nos dias 10 e 11 de abril de 2025, na Universidade Federal Fluminense (UFF), às margens da Baía da Guanabara.

O ERCAT se destaca como um espaço para a troca de experiências, o fortalecimento de contatos e colaborações entre pesquisadores, profissionais e alunos. Além disso, possibilita uma atualização contínua sobre temas relevantes para a catálise, tanto na região quanto no cenário nacional.

O evento conta com conferências ministradas por pesquisadores e profissionais da indústria de renome nacional e internacional, além de sessões técnicas orais e apresentações de pôsteres, proporcionando um ambiente dinâmico para o debate científico e tecnológico.

Nesta edição, a Medalha Ruth Leibsohn Martins foi concedida ao Prof. Dr. Martin Schmal, em reconhecimento não apenas à sua brilhante trajetória acadêmica, mas também ao seu caráter altruísta e às suas contribuições para o avanço da catálise no Brasil.

Aos colegas e amigos da comunidade brasileira de catálise, é uma grande alegria organizar e compartilhar este evento com vocês!

PLENÁRIAS

Dia 10/04

Plenária 1: Estudos da matéria heterogênea e hierárquica no SIRIUS/LNLS/CNPEM.

Ministrante: Helio Cesar Nogueira Tolentino

Horário: 9:15h às 10:15h

Descrição: O SIRIUS é uma fonte de luz síncrotron de última geração e provê para a comunidade científica e tecnológica uma ampla gama de técnicas avançadas para o estudo da matéria. Uma classe particular é a matéria heterogênea e hierárquica, incluindo materiais para energia, biologia e agricultura, como células solares, baterias, catalizadores, células de mamíferos, tecidos, rochas e solos. Essa classe de materiais necessita de técnicas variadas e complementares para o seu entendimento, cobrindo várias escalas de resolução e diversos contrastes. Nessa palestra serão apresentadas as ferramentas desenvolvidas no SIRIUS para esses estudos e discutidos alguns casos particulares já estudados, com ênfase em algumas aplicações na área de catálise.

Plenária 2: Escalonamento de tecnologias e criação de startups para o desenvolvimento de materiais para aplicações sustentáveis.

Ministrante: Ana Paula de Carvalho

Horário: 13:30h às 14:30h

Descrição: Um dos grandes desafios na área de materiais é transformar pesquisas laboratoriais em novos produtos capazes de resolver grandes questões de sustentabilidade. Para isso, etapas cruciais devem ser superadas, como o escalonamento da síntese dos materiais, a aplicação em larga escala e a análise da viabilidade técnica e econômica. O sucesso dessas fases não só acelera a inovação, mas também abre caminho para a criação de startups que possam liderar soluções sustentáveis no mercado. Compreender essas etapas e como integrá-las é fundamental para impulsionar a transição para um futuro mais sustentável.

PLENÁRIAS

Dia 11/04

Plenária 3: Fabricando Performance: O Processo de Produção Industrial de Catalisadores de FCC

Ministrante: José Marcos Moreira Ferreira (FCC)

Horário: 9:15h às 10:15h

Descrição: A unidade de FCC é o principal processo de conversão catalítica em uma refinaria, cujo desempenho depende de um catalisador de FCC produzido sob medida para maximizar sua rentabilidade na produção de combustíveis e derivados petroquímicos. Mas como é feito industrialmente o catalisador de FCC? Como avaliar sua atividade e seletividade? A produção do catalisador de FCC exige intensa pesquisa e desenvolvimento para criar catalisadores de alto desempenho, que reduzam as emissões de gases do efeito estufa e contribuam para a transição energética e a descarbonização. Versátil, o catalisador de FCC pode ser reformulado para ser usado no coprocessamento de cargas renováveis e na reciclagem de plásticos, pneus e biomassa.

Plenária 4: Caracterização In Situ e Operando por Técnicas de Luz Síncrotron para o Design de Catalisadores Avançados.

Ministrante: Fabiane de Jesus Trindade

Horário: 13:30h às 14:30h

Descrição: Compreender o comportamento dinâmico dos catalisadores em condições reais de operação é crucial para o desenvolvimento de nanomateriais com melhor desempenho e estabilidade. Técnicas de caracterização in situ e operando, como SR-PXRD, PDF e XAS, permitem investigar transformações estruturais, estados eletrônicos e interações metal-suporte em tempo real. Estudos de caso demonstrarão como essas técnicas podem otimizar o design de catalisadores à base óxidos metálicos, promovendo maior eficiência e estabilidade em aplicações para conversão de energia sustentável.



6º Encontro de
**Catálise
Regional 2**
RJ, MG e ES - 2025

PROGRAMAÇÃO

DIA 10/04

Hora	Atividade
8:00 - 9:00	Recepção e credenciamento. (Recepção de posters).
9:00 - 9:15	Abertura
9:15 - 10:15	Plenária: <i>Estudos da matéria heterogênea e hierárquica no SIRIUS/LNLS/CNPEM</i> Ministrante: Helio Cesar Nogueira Tolentino
10:15 - 10:45	Coffee break
10:45 - 11:00	Fotocatálise: <i>Vanádio incorporado na estrutura ETS-10 para a fotorredução do CO₂</i>
11:00 - 11:15	Conversão de Biomassa: <i>Obtenção de álcool furfurílico utilizando catalisadores heterogêneos à base de ZrO₂</i>
11:15 - 11:30	Síntese e Caracterização de Catalisadores: <i>Síntese e caracterização de zeólitas HZSM-5 cristalina e embrionária impregnadas com Ni e Ru para aplicação em conversão de CO₂</i>
11:30 - 11:45	Refinaria e Petroquímica: <i>Do resíduo ao recurso: despolimerização de PET com microondas e catalisador ECAT</i>
11:45 - 12:00	Catalisadores e Adsorventes Aplicados ao Meio Ambiente: <i>Modificação estrutural de caulinita e metacaulinita para aplicação em reações de esterificação: rumo a catalisadores sustentáveis</i>
12:00 - 13:30	Almoço
13:30 - 14:30	Plenária: <i>Escalonamento de tecnologias e criação de startups para o desenvolvimento de materiais para aplicações sustentáveis.</i> Ministrante: Ana Paula de Carvalho
14:30 - 14:45	Outras Aplicações: <i>Dimensionality reduction approach for DRIFTS-MS data: application on pure MgO catalyst in ethanol to 1-butanol conversion</i>
14:45 - 15:00	Fotocatálise: <i>Síntese e aplicação de nanopartículas núcleo-casca de Fe_xO_y@C na descoloração do índigo carmim em meio aquoso</i>
15:00 - 15:15	Conversão de Biomassa: <i>Efeito do Rênio na atividade catalítica de Cu-Re/ZrO₂ para a reação de hidrodessoxigenação de m-cresol</i>
15:15 - 15:30	Síntese e Caracterização de Catalisadores: <i>Efeito da incorporação de Zn, Ga e Mg em materiais tipo hidrotalcita com Fe na desidrogenação oxidativa de propano</i>
15:30 - 15:45	Refinaria e Petroquímica: <i>Influência dos compostos nitrogenados na produção de diesel S10</i>
15:45 - 16:00	Catalisadores e Adsorventes Aplicados ao Meio Ambiente: <i>Desenvolvimento de catalisadores zeolíticos bifuncionais aplicado no beneficiamento de hidrocarbonetos leves para obtenção de combustível de aviação sustentável</i>
16:00 - 17:30	Coffee Break + Poster
17:30 - 19:00	Premiação melhores posters + Evento cultural.



6° Encontro de
**Catálise
Regional 2**
RJ, MG e ES - 2025

PROGRAMAÇÃO

DIA 11/04

Hora	Atividade
9:00 - 9:15	Recepção
9:15 - 10:15	Plenária: <i>Fabricando Performance: O Processo de Produção Industrial de Catalisadores de FCC.</i> Ministrante: José Marcos Moreira Ferreira
10:15 - 10:45	Coffee break
10:45 - 11:00	Fotocatálise: <i>Degradação fotocatalítica da rodamina B utilizando rede orgânica porosa baseada em melamina dopada com nióbio</i>
11:00 - 11:15	Conversão de Biomassa: <i>Biocarvão de Singônio funcionalizado com NiO como catalisador para a produção de álcool furfurílico</i>
11:15 - 11:30	Síntese e Caracterização de Catalisadores: <i>Desenvolvimento de catalisador núcleo-casca de Co@SiO₂ mesoporoso aplicado à síntese de Fischer-Tropsch</i>
11:30 - 11:45	Refinaria e petroquímica: <i>Impacto da mesoporosidade estruturada na atividade e estabilidade de catalisadores Pt/HUSY em hidrocraqueamento</i>
11:45 - 12:00	Catalisadores e Adsorventes Aplicados ao Meio Ambiente: <i>Avaliação catalítica de carvão ativado de PET com óxido de nióbio para a oxidação de contaminantes emergentes</i>
12:00 - 13:30	Almoço
13:30 - 14:30	Plenária: <i>Caracterização In Situ e Operando por Técnicas de Luz Síncrotron para o Design de Catalisadores Avançados.</i> Ministrante: Fabiane de Jesus Trindade
14:30 - 14:45	Síntese e Caracterização de Catalisadores: <i>Óxidos mistos de lantânia e céria como catalisadores para o acoplamento oxidativo de metano</i>
14:45 - 15:00	Fotocatálise: <i>Minerando soluções sustentáveis: Síntese e aplicação de fotocatalisadores nanoestruturados à base de cobre e ferro oriundo de rejeito da mineração</i>
15:00 - 15:15	Conversão de Biomassa: <i>Efeito da acidez de catalisadores de Pd suportado em Nb₂O₅ e em TiO₂ na valorização da lignina</i>
15:15 - 15:30	Síntese e Caracterização de Catalisadores: <i>Síntese e caracterização de diferentes estruturas de catalisadores de níquel-sílica para a metanação de CO₂</i>
15:30 - 15:45	Refinaria e Petroquímica: <i>Avaliação da relação metal nobre-CeZrO₂ para atividade catalítica e tiorresistência na reação de deslocamento gás-água</i>
15:45 - 16:00	Conversão de biomassa: <i>Hidrocarbonetos Renováveis a partir de óleo de Scenedesmus sp.: Otimização da seletividade na reação de hidroxidação (HDO) com catalisadores Mo₂C/Al₂O₃ e NiMoC/Al₂O₃</i>
16:00 - 16:30	Coffee Break
16:30 - 16:45	Cerimônia de Entrega da Medalha Ruth L. Martins
16:45 - 17:15	Conferência Medalha Ruth L. Martins
17:15 - 17:30	Encerramento (premiação melhor apresentação oral).

RESUMOS

O: Oral; P: Pôster

CATALISADORES E ADSORVENTES APLICADOS AO MEIO AMBIENTE

14

O-01 MODIFICAÇÃO ESTRUTURAL DE CAULINITA E METACAULINITA PARA APLICAÇÃO EM REAÇÕES DE ESTERIFICAÇÃO: RUMO A CATALISADORES SUSTENTÁVEIS

O-02 DESENVOLVIMENTO DE CATALISADORES ZEOLÍTICOS BIFUNCIONAIS APLICADO NO BENEFICIAMENTO DE HIDROCARBONETOS LEVES PARA OBTENÇÃO DE COMBUSTÍVEL DE AVIAÇÃO SUSTENTÁVEL

O-03 AVALIAÇÃO CATALÍTICA DE CARVÃO ATIVADO DE PET COM ÓXIDO DE NIÓBIO PARA A OXIDAÇÃO DE CONTAMINANTES EMERGENTES

P-01 DESENVOLVIMENTO DE COMPÓSITO A BASE DE ÓXIDO DE GRAFENO E ÓXIDO DE COBALTO PARA CAPTURA DE CO₂

P-02 APLICAÇÃO DE CATALISADORES BIFUNCIONAIS SUPORTADOS EM CEO₂ NA HIDROGENAÇÃO DIRETA DE CO₂ A HIDROCARBONETOS NA PRODUÇÃO DE QAV

P-03 UTILIZAÇÃO DE QUITOSANA COMO ADSORVENTE DO CORANTE TÊXTIL *DIRECT ORANGE-39*

P-04 CATALISADORES DE ESPODUMÊNIO IMPREGNADOS COM CÁLCIO PARA TRANSESTERIFICAÇÃO: SINERGIA ENTRE SUPORTE E SÍTIOS BÁSICOS

P-05 PRODUÇÃO DE ÓLEO DIESEL A PARTIR DA CO-PIRÓLISE CATALÍTICA DE BORRA DE PETRÓLEO E POLIOLEFINAS COM UMA ARGILA PILARIZADA COM CROMO

P-06 MODELLING CO₂ ADSORPTION AND DESORPTION ON Si-INTEGRATED 13X ZEOLITE MATERIAL

P-07 SÍNTESE E CARACTERIZAÇÃO DE CARBONOS MESOPOROSOS UTILIZANDO TRÊS DIFERENTES FONTES DE AÇÚCARES E AEROSIL-200 COMO MOLDE

CONVERSÃO CATALÍTICA DE BIOMASSA E DERIVADOS

25

O-04 OBTENÇÃO DE ÁLCOOL FURFURÍLICO UTILIZANDO CATALISADORES HETEROGÊNEOS A BASE DE ZrO₂

O-05 EFEITO DO RÊNIO NA ATIVIDADE CATALÍTICA DE Cu-Re/ZrO₂ PARA A REAÇÃO DE HIDRODESOXIGENAÇÃO DE M-CRESOL

O-06 BIOCÁRVÃO DE SINGÔNIO FUNCIONALIZADO COM NiO COMO CATALISADOR PARA A PRODUÇÃO DE ÁLCOOL FURFURÍLICO

O-07 EFEITO DA ACIDEZ DE CATALISADORES DE Pd SUPORTADO EM Nb₂O₅ E EM TiO₂ NA VALORIZAÇÃO DA LIGNINA

- O-08** HIDROCARBONETOS RENOVÁVEIS A PARTIR DE ÓLEO DE *SCENEDESMUS* sp.: OTIMIZAÇÃO DA SELETIVIDADE NA REAÇÃO DE HIDRODEOXIGENAÇÃO (HDO) COM CATALISADORES $\text{Mo}_2\text{C}/\text{Al}_2\text{O}_3$ e $\text{NiMoC}/\text{Al}_2\text{O}_3$
- P-08** CONVERSÃO DIRETA DE ETANOL EM ÓXIDO DE ETILENO SOBRE CATALISADOR BIFUNCIONAL DO TIPO CORE-SHELL DE NANOPARTÍCULAS DE PRATA RECOBERTAS EM ALUMINA
- P-09** USO DE CATALISADORES TANDEM PARA OLIGOMERIZAÇÃO DE ETENO VISANDO A PRODUÇÃO DE SAFS
- P-10** AVALIAÇÃO CATALÍTICA DA RESINA AMBERLYST-15 E DA ZEÓLITA HY NA REAÇÃO DE CETALIZAÇÃO DO LEVULINATO DE ETILA COM DIÓIS DE CADEIA LONGA
- P-11** HIDRÓLISE DO AMIDO DA AMÊNDOA DA MANGA (*MANGIFERA INDICA*) EM GLICOSE SOBRE NbOPO_4
- P-12** EFEITO PROMOTOR DO COBRE NA HIDROXIAPATITA PARA ACOMPLAMENTO DE ETANOL EM COMPOSTOS C4+
- P-13** EFEITO DA HIERARQUIZAÇÃO DA ZEÓLITA BETA NA SÍNTESE DO LEVULINATO DE ISOPROPILA VIA REAÇÃO DOMINÓ
- P-14** CATALISADORES DE Ni E Ni/Re SUPORTADOS EM HZSM-5 NA DESOXIGENAÇÃO DO ÁCIDO OLEICO
- P-15** Ni- Al_2O_3 SUPORTADO EM MONÓLITO METÁLICO IMPRESSO EM 3D COM ESTRUTURA TPMS APLICADA NA REFORMA A SECA E A VAPOR DE METANO
- P-16** CONDENSAÇÃO ALDÓLICA DO FURFURAL E ACETONA CATALISADA POR ZEÓLITAS HIERÁRQUICAS
- P-17** CONVERSÃO *ONE-POT* DE FURFURAL A LEVULINATO DE ISOPROPILA SOBRE ZEÓLITA BETA RECRISTALIZADA E SUBSTITUÍDA COM ZIRCÔNIO
- P-18** CATALISADORES DE BIOMASSA PARA REAÇÃO DE ODH A BASE DE CARVÃO ATIVADO A PARTIR DO PROPANO
- P-19** CATALISADORES DE Zr e Nb NA PRODUÇÃO DE BIOCOMBUSTÍVEIS A PARTIR DE COMPOSTOS ORIUNDOS DA BIOMASSA LIGNOCELULÓSICA
- P-20** CARVÃO DE LODO DE ESGOTO COMO CATALISADOR PARA REAÇÃO DE CONDENSAÇÃO ALDÓLICA DO FURFURAL
- P-21** SÍNTESE E APLICAÇÃO DE CATALISADORES DE $\text{Mg}_x\text{AlO}_y\text{-SiO}_2$ DOPADOS COM Re OU Ru PARA A CONVERSÃO DE ETANOL EM 1,3-BUTADIENO
- P-22** CONVERSÃO DE ÁLCOOL FURFURÍLICO A PENTANODIOIS SOBRE $\text{Cu}/\text{Al}_2\text{O}_3$, $\text{Cu}/\text{MgAl}_2\text{O}_4$ E Cu/MgO
- P-23** REACTIVATION MECHANISMS OF Mo_2C CATALYSTS IN HDO REACTIONS: A DFT AND EXPERIMENTAL STUDY
- P-24** USO DE BIOCARVÕES DE LODO DE ESGOTO COMO CATALISADORES PARA CONVERSÃO DE FURFURAL EM ÁLCOOL FURFURÍLICO
- P-25** CONVERSÃO DO FURFURAL Á ALCOOL FURFURÍLICO VIA REAÇÕES DOMINÓ UTILIZANDO CARVÕES DE LODO DE ESGOTO

- P-26** CATALISADORES METÁLICOS SUPTADOS APLICADOS À CONVERSÃO DE ÁCIDO LEVULÍNICO
- P-27** LODO DE ESGOTO PIROLISADO COMO CATALISADOR PARA OBTENÇÃO DE ÁLCOOL FURFURÍLICO VIA REAÇÃO DOMINÓ DO FURFURAL
- P-28** NITRETOS DE CARBONO SULFONADOS COMO CATALISADORES PARA REAÇÃO DE CONDENSAÇÃO ALDÓLICA DO FURFURAL
- P-29** INFLUÊNCIA DO TEMPO DE SULFATAÇÃO NAS PROPRIEDADES DE NIÓBIAS FUNCIONALIZADAS COMO CATALISADORES ÁCIDOS
- P-30** SÍNTESE E AVALIAÇÃO DE CATALISADORES METALORGÂNICOS EM REAÇÕES DE VALORIZAÇÃO DE DERIVADOS DE BIOMASSA PARA A OBTENÇÃO DE PRECURSORES DE BIOCOMBUSTÍVEIS
- P-31** CATALISADORES HIDROFÓBICOS A BASE DE ZrO_2-SiO_2 PARA A VALORIZAÇÃO DA HEMICELULOSE

FOTOCATÁLISE

55

- O-08** VANÁDIO INCORPORADO NA ESTRUTURA ETS-10 PARA A FOTORREDUÇÃO DO CO_2
- O-09** SÍNTESE E APLICAÇÃO DE NANOPARTÍCULAS NÚCLEO-CASCA DE $FexOy@C$ NA DESCOLORAÇÃO DO ÍNDIGO CARMIM EM MEIO AQUOSO
- O-10** DEGRADAÇÃO FOTOCATALÍTICA DA RODAMINA B UTILIZANDO REDE ORGÂNICA POROSA BASEADA EM MELAMINA DOPADA COM NIÓBIO
- O-11** MINERANDO SOLUÇÕES SUSTENTÁVEIS: SÍNTESE E APLICAÇÃO DE FOTOCATALISADORES NANOESTRUTURADOS À BASE DE COBRE E FERRO ORIUNDO DE REJEITO DA MINERAÇÃO
- P-32** EFEITO DA DESSILICAÇÃO DA ZEÓLITA ZSM-5 NA DEGRADAÇÃO FOTOCATALÍTICA DE ÓLEOS
- P-33** GRAFENO E CARVÃO ATIVADO COMO SUPORTES DE CATALISADORES CONTENDO ÓXIDO DE FERRO PARA USO EM FOTOCATÁLISE
- P-34** DEGRADAÇÃO FOTOCATALÍTICA DA RODAMINA 6G EMPREGANDO PEROVSKITA DE NIOBATO DE LÍCIO MODIFICADA COM PRATA
- P-35** DEGRADAÇÃO FOTOCATALÍTICA DA VIOLETA GENCIANA UTILIZANDO UM *COVALENT ORGANIC FRAMEWORK* BIDIMENSIONAL DOPADO COM NIÓBIO
- P-36** DESENVOLVIMENTO DE CATALISADORES PARA A PRODUÇÃO DE HIDROGÊNIO A PARTIR DA ÁGUA POR FOTOELETROCATÁLISE
- P-37** COMPÓSITOS FOTOATIVOS BASEADOS EM NIÓBIO E COBRE PARA A DEGRADAÇÃO DE CORANTES SOB LUZ VISÍVEL
- P-38** DESENVOLVIMENTO DE CATALISADORES A BASE DE HIDROTALCITA PARA APLICAÇÃO EM DEGRADAÇÃO DE CORANTE POR FOTOCATÁLISE

P-39 FOTOCATALISADORES À BASE DE ÓXIDO DE ESTANHO E NIÓBIO PARA DESCOLORAÇÃO DO CORANTE AMARELO REATIVO 4GL

P-40 FOTOCATALISADORES DE ALUMÍNIO E Nb₂O₅ ATIVOS SOB LUZ VISÍVEL

REFINARIA E PETROQUÍMICA

69

O-12 DO RESÍDUO AO RECURSO: DESPOLIMERIZAÇÃO DE PET COM MICROONDAS E CATALISADOR ECAT

O-13 INFLUÊNCIA DOS COMPOSTOS NITROGENADOS NA PRODUÇÃO DE DIESEL S10

O-14 IMPACTO DA MESOPOROSIDADE ESTRUTURADA NA ATIVIDADE E ESTABILIDADE DE CATALISADORES Pt/HUSY EM HIDROCRAQUEAMENTO

O-15 AVALIAÇÃO DA RELAÇÃO METAL NOBRE-CeZrO₂ PARA ATIVIDADE CATALÍTICA E TIORESISTÊNCIA NA REAÇÃO DE DESLOCAMENTO GÁS-ÁGUA

P-41 OLIGOMERIZAÇÃO DE 1-BUTENO CATALISADA POR ZSM-5 DESSILICADA

P-42 DESEMPENHO DO CATALISADOR RuCo/NANO- γ -Al₂O₃ NA REAÇÃO DE FISCHER-TROPSCH

P-43 SUSTAINABLE ASSESSMENT OF A FULLY INTEGRATED CO₂ METHANATION PROCESS WITH A Ni/Al₂O₃ CATALYST

P-44 SUSTAINABILITY ASSESSMENT OF FULLY INTEGRATED DRY METHANE REFORMING USING Ni - CeO₂/MgAl₂O₄ CATALYST

SÍNTESE E CARACTERIZAÇÃO DE CATALISADORES

78

O-17 SÍNTESE E CARACTERIZAÇÃO DE ZEÓLITAS HZSM-5 CRISTALINA E EMBRIONÁRIA IMPREGNADAS COM Ni E Ru PARA APLICAÇÃO EM CONVERSÃO DE CO₂

O-18 EFEITO DA INCORPORAÇÃO DE Zn, Ga E Mg EM MATERIAIS TIPO HIDROTALCITA COM Fe NA DESIDROGENAÇÃO OXIDATIVA DE PROPANO

O-19 DESENVOLVIMENTO DE CATALISADOR NÚCLEO-CASCA DE Co@SiO₂ MESOPOROSO APLICADO À SÍNTESE DE FISCHER-TROPSCH

O-20 ÓXIDOS MISTOS DE LANTÂNIA E CÉRIA COMO CATALISADORES PARA O ACOPLAMENTO OXIDATIVO DE METANO

O-21 SÍNTESE E CARACTERIZAÇÃO DE DIFERENTES ESTRUTURAS DE CATALISADORES DE NÍQUEL-SÍLICA PARA A METANAÇÃO DE CO₂

P-45 EFEITO DAS CONDIÇÕES REACIONAIS NAS PROPRIEDADES DOS NANOTUBOS DE CARBONO

P-46 NANOPARTÍCULAS DE ÓXIDO DE NIÓBIO DISPERSAS EM CARVÃO ATIVADO DE PET PARA A OXIDAÇÃO DO FUNGICIDA PROTIOCONAZOL

- P-47** PRODUÇÃO DE ELETROCATALISADORES BASEADOS EM CARBONOS MESOPOROSOS PARA A PRODUÇÃO DE HIDROGÊNIO
- P-48** CONVERSÃO DE ETANOL A ÁLCOOIS C₄₊ UTILIZANDO CATALISADORES DE Mg_xAlO_y DOPADOS COM Cu E Ru
- P-49** APLICAÇÃO DE CATALISADORES DERIVADOS DE MOF DE COBRE E ALUMÍNIO NA REAÇÃO DE REDUÇÃO DO NO PELO CO
- P-50** DESENVOLVIMENTO E CARACTERIZAÇÃO DE CATALISADORES À BASE DE LA₂O₃ E CeO₂ SUPORTADOS EM SÍLICA PARA O ACOPLAMENTO OXIDATIVO DO METANO
- P-51** SÍNTESE E CARACTERIZAÇÃO DE HIDRÓXIDO DUPLO LAMELAR NiMgAl
- P-52** CATALISADORES À BASE DE FERRO DOPADOS PARA REAÇÕES DE HIDROGENAÇÃO DE CO₂
- P-53** EFEITO DA TEMPERATURA E VELOCIDADE DE AUMENTO DO pH NA ESTRUTURA CRISTALINA DO CATALISADOR Na-Fe₃O₄
- P-54** SÍNTESE E CARACTERIZAÇÃO DE NANOCATALISADORES DE NÍQUEL COM ESTRUTURA CORE-SHELL DE CÉRIA PARA REAÇÃO DE REFORMA DE ETANOL
- P-55** CATALISADORES À BASE DE LANTÂNIO DOPADOS COM CÉRIO PARA ACOPLAMENTO OXIDATIVO DO METANO
- P-56** THE NATURE OF Cu-OXO CATIONS IN A MORDENITE ZEOLITE GENERATED AFTER ACTIVATION WITH AIR OR CO₂: AN INVESTIGATION BY *IN SITU* DR UV-VIS ANALYSES
- P-57** HIDROGENAÇÃO DE CO₂ A METANOL E DME EM CATALISADORES Cu-ZrO₂@SiO₂
- P-58** DESENVOLVIMENTO E AVALIAÇÃO DE CATALISADORES SULFETADOS DE CoMoAlMg PARA HIDRODESSULFURIZAÇÃO SELETIVA A PARTIR DE HDLS
- P-59** CATALISADORES Ni-SiO₂: AVALIAÇÃO COMPARATIVA ENTRE ARQUITETURAS ENCAPSULADA E SUPOSTADA
- P-60** SÍNTESE E CARACTERIZAÇÃO DE GEOPOLÍMEROS PRODUZIDOS A PARTIR DE REJEITOS DE MINERAÇÃO
- P-61** Ni, Cu AND Ni-Cu NANOPARTICLES EMBEDDED IN CeO₂ FOR HYDROGEN PRODUCTION FROM ETHANOL OXIDATIVE STEAM REFORMING
- P-62** HIDROGENAÇÃO DO CO₂ UTILIZANDO FERRO SUPOSTADO EM ZEÓLITAS HIERÁRQUICAS
- P-63** EFEITO DA ADIÇÃO DE NIÓBIA EM CATALISADORES Ni/Al₂O₃ SUPOSTADOS EM MONOLITOS OBTIDOS POR IMPRESSÃO 3D PARA A REFORMA SECA DO METANO
- P-64** DESENVOLVIMENTO DE CATALISADORES MICRO E MESOPOROSOS PARA EPOXIDAÇÃO AMBIENTALMENTE AMIGÁVEL DE OLEFINAS
- P-65** SÍNTESE DE NANOCATALISADORES HÍBRIDOS BIFUNCIONAIS DE COBRE
- P-66** SÍNTESE DE ZEÓLITAS HIERÁRQUICAS BETA A PARTIR DE DESSILICAÇÃO PÓS SÍNTESE

P-67 SÍNTESE, CARACTERIZAÇÃO E AVALIAÇÃO DA ATIVIDADE CATALÍTICA DE SAIS HETEROPOLIÁCIDOS DE ESTANHO

P-68 VARIAÇÃO DA QUANTIDADE DE SÍLICA COMO MOLDE NA SÍNTESE DE CARBONOS MESOPOROSOS

OUTRAS APLICAÇÕES

108

O-22 DIMENSIONALITY REDUCTION APPROACH FOR DRIFTS-MS DATA: APPLICATION ON PURE MgO CATALYST IN ETHANOL TO-1-BUTANOL CONVERSION

P-69 EFEITO DA DESSILICAÇÃO NO DESEMPENHO DE CATALISADORES Cu-ZnO-Al₂O₃/ZSM-5 PARA HIDROGENAÇÃO DE CO₂ PARA PRODUÇÃO DE DME

P-70 EFEITO DA METODOLOGIA DE PREPARO NO DESEMPENHO DE CATALISADORES À BASE DE ZEÓLITAS USY HIERÁRQUICAS NA REFORMA SECA DO BIOGÁS

P-71 APLICAÇÃO DAS ZEÓLITAS ZSM-5 ANTES E APÓS A VIRADA PARA O SÉCULO XXI - UM ESTUDO DE REVISÃO

P-72 CATALISADOR HÍBRIDO DE Fe/Cu EM HZSM-5 APLICADO NA SÍNTESE DIRETA DO DME

P-73 MODELAGEM CINÉTICA DA PIRÓLISE DO ENDOCARPO DE MACAÚBA

P-74 EFEITO CATALÍTICO PROMOVIDO POR UM COMPLEXO DE NIÓBIO NA HIDRÓLISE DE UM ÉSTER DE FOSFATO

P-75 COMPLEXOS SUPRAMOLECULARES COMO CATALISADORES PARA A DEGRADAÇÃO DE ORGANOFOSFORADOS

P-76 CONVERSÃO CATALÍTICA DE ETANOL EM GÁS LIQUEFEITO RENOVÁVEL SOBRE HIDROXIAPATITA

P-77 APRIMORANDO O ENSINO DE CATÁLISE COM O USO DA REALIDADE AUMENTADA: UM APLICATIVO MÓVEL PARA VISUALIZAÇÃO 3D

P-78 CO₂ EMISSIONS ASSOCIATED WITH STEAM METHANE REFORMING - LAB SCALE TESTING



6º Encontro de
Catálise
Regional 2
RJ, MG e ES – 2025



SBCAT
SOCIEDADE BRASILEIRA DE CATÁLISE

CATALISADORES E ADSORVENTES APLICADOS AO MEIO AMBIENTE





Niterói, RJ. 10 e 11 de abril de 2025

MODIFICAÇÃO ESTRUTURAL DE CAULINITA E METACAULINITA PARA APLICAÇÃO EM REAÇÕES DE ESTERIFICAÇÃO: RUMO A CATALISADORES SUSTENTÁVEIS

Joyce R. Oliveira^{1*}, Larissa G. de Souza¹, Abner Luís R. Domingos¹, Ana Luisa A. Simões², Fabio B. Passos³, Sara S. Vieira¹

¹ Grupo de Catálise e Química Ambiental (AmbCat), Instituto de Química, Departamento de Química Inorgânica, Universidade Federal Fluminense, Niterói – RJ

² Departamento de Química, Universidade Federal de Minas Gerais, Belo Horizonte - MG

³ Laboratório de Reatores, Cinética e Catálise (RECAT), Escola de Engenharia, Universidade Federal Fluminense, Niterói - RJ

* joyce_ribeiro@id.uff.br

Este estudo investiga o potencial de catalisadores heterogêneos ácidos, obtidos a partir da caulinita e metacaulinita impregnadas com H_2SO_4 , na esterificação do ácido oleico em oleato de metila. A relevância desta pesquisa reside na busca por materiais catalíticos que sejam econômicos e ambientalmente sustentáveis, com a possibilidade de melhoria na natureza e na força dos sítios ácidos, visando a melhoria da eficiência reacional. A atividade catalítica desses sólidos está diretamente relacionada à presença de diferentes tipos de sítios ácidos, cuja eficiência depende não apenas de sua quantidade e natureza, mas também de sua força e distribuição. Essa diversidade decorre da composição heterogênea dos materiais, dos defeitos estruturais e das variações topológicas na disposição dos sítios ativos. A caracterização dos materiais foi realizada por: análise termogravimétrica (TG), difração de raios X (DRX), fluorescência de raios X (FRX) e análise BET. A análise térmica revelou que o tratamento térmico da caulinita promove sua conversão em metacaulinita, eliminando impurezas e promovendo uma reorganização estrutural. O DRX confirmou, na caulinita, a presença de hematita (Fe_2O_3 - JCPDS-33-664), quartzo (SiO_2 - JCPDS-4610-45), goethita ($FeOOH$ - JCPDS-29-713) e caulinita ($Al_2Si_2O_5(OH)_4$ - JCPDS-14-164). Já a análise por FRX revelou a composição química dos materiais, com teores aproximados de 23,93% de Al, 53,23% de Si, e 8,27% de Fe. Após a impregnação com H_2SO_4 , as amostras foram submetidas a tratamentos térmicos entre 400°C e 600°C. A acidez dos materiais foi determinada por titulação ácido-base (com NaOH), demonstrando um aumento significativo na concentração de sítios ácidos: de 4,43 mmol g⁻¹ para 80Cau₄₀₀ até 6,89 mmol g⁻¹ para 80Cau₆₀₀, e de 4,35 mmol g⁻¹ para 80Meta₄₀₀ até 7,45 mmol g⁻¹ para 80Meta₆₀₀. Esses resultados evidenciaram a influência da temperatura de tratamento nos sítios ativos. Os testes catalíticos, conduzidos sob condições otimizadas (razão molar ácido oleico/metanol de 1:5, 2,5% de catalisador, 100°C e 4 horas), indicaram que os materiais tratados a 400°C e 500°C (80Cau₄₀₀, 80Cau₅₀₀, 80Meta₄₀₀ e 80Meta₅₀₀) alcançaram valores de conversão superiores a 90% na esterificação do ácido oleico. No entanto, o material tratado a 600°C (80Cau₆₀₀) apresentou um desempenho inferior, com uma conversão de apenas 60%. Embora a quantidade de sítios ácidos seja semelhante entre os materiais, a menor conversão observada no 80Cau₆₀₀ pode ser atribuída à modificação da natureza dos sítios ácidos, uma vez que temperaturas superiores a 500°C que podem promover a aglomeração desses sítios, prejudicando a eficiência catalítica. Os resultados destacam a importância da otimização térmica para evitar a aglomeração de sítios ácidos, melhorando o desempenho catalítico.



Niterói, RJ. 10 e 11 de abril de 2025

DESENVOLVIMENTO DE CATALISADORES ZEOLÍTICOS BIFUNCAIONAIS APLICADO NO BENEFICIAMENTO DE HIDROCARBONETOS LEVES PARA OBTENÇÃO DE COMBUSTÍVEL DE AVIAÇÃO SUSTENTÁVEL

Jéssica O. Lyrio¹; Beatriz G. Silva¹; Hugo C. Reis²; Leonardo P. Ozorio¹; Renata J. S. Bravim²; Daniella R. Fernandes¹; Claudio J. A. Mota^{1,2}.

¹Universidade Federal do Rio de Janeiro, Instituto de Química, Av Athos da Silveira Ramos 149, CT BI A, 21949-909 Rio de Janeiro, Brasil.

²Universidade Federal do Rio de Janeiro, Escola de Química, Av Athos da Silveira Ramos 149, CT BI E, 21949-909 Rio de Janeiro, Brasil

A necessidade de frear o aquecimento global torna o uso do CO₂ para a produção de combustíveis sustentáveis um assunto importante. O setor de aviação contribui com cerca de 2% das emissões de CO₂. Nesse contexto, o estudo da hidrogenação de CO₂ para a obtenção do querosene de aviação pode contribuir para a redução desse impacto ambiental. Este estudo analisou a influência de catalisadores zeolíticos bifuncionais na conversão de hidrocarbonetos leves em hidrocarbonetos de maior cadeia (C₅+), visando o desenvolvimento de combustível de aviação de baixo impacto ambiental.

Os catalisadores foram preparados a partir da zeólita H-ZSM-5 contendo metais incorporados por um método adaptado de impregnação úmida. Esta ocorreu em solução aquosa contendo sais dos metais precursores (Ga, Zn e Mo) e a zeólita ácida, sob agitação, durante 12 h. O solvente foi removido em um rotaevaporador e o sólido obtido foi calcinado a 550 °C por 5 horas e caracterizado por FTIR-Py, DRX, FRX e análise textural.

A atividade catalítica foi avaliada em uma unidade PID de fluxo contínuo e dois reatores de leito fixo, o primeiro contendo catalisador de FeNa-CeO₂, usado na hidrogenação de CO₂ a 350 °C e 40 bar, e o segundo, contendo os catalisadores zeolíticos, a 200 °C e 40 bar, com o objetivo de maximizar a produção de hidrocarbonetos C₅+ a partir dos produtos gasosos gerados no primeiro reator. Os produtos foram analisados por cromatografia em fase gasosa em linha com detector FID e TCD. Os catalisadores avaliados no segundo leito foram: Zn(5)/ZSM-5, Ga(5)/ZSM-5, Mo(5)/ZSM-5, além da H-ZSM-5.

A conversão, considerando o catalisador do primeiro leito, foi de 5% enquanto no segundo leito manteve-se em 6%, indicando que a integração do segundo leito não converteu CO₂ adicional. A seletividade aos hidrocarbonetos foi avaliada considerando-se as frações C₁, C₂, C₃, C₄ e C₅+. Observou-se que os catalisadores zeolíticos bifuncionais contendo Zn e Ga aumentaram a fração C₅+ quando comparado aos catalisadores H-ZSM-5 e Mo-ZSM-5.





Niterói, RJ. 10 e 11 de abril de 2025

AVALIAÇÃO CATALÍTICA DE CARVÃO ATIVADO DE PET COM ÓXIDO DE NIÓBIO PARA A OXIDAÇÃO DE CONTAMINANTES EMERGENTES

Maria Eduarda Souza Elias Torres ¹, Cinthia de Castro Oliveira ^{1*}

¹ Departamento de Química, Instituto de Ciências Exatas, Universidade Federal de Minas Gerais – UFMG. Av. Antônio Carlos, 6627, Pampulha, 31270-901, Belo Horizonte – MG, Brasil.

* cinthia.soares.castro@gmail.com

Neste trabalho foi sintetizado um catalisador heterogêneo (CA-Nb) baseado em nanopartículas de óxido de nióbio (Nb_2O_5) dispersas em carvão ativado de PET (CA). Resíduos de PET em pó foram utilizados como precursores do CA, produzido por meio de ativação química com K_2CO_3 . O CA obtido apresentou elevada área superficial específica ($989 \text{ m}^2 \text{ g}^{-1}$). A impregnação de óxido de nióbio 5% (m/m) foi realizada por meio do método de mistura física e tratamento com $\text{H}_2\text{O}_2(\text{aq})$ 35% (v/v). O CA-Nb apresentou elevada área superficial específica ($607 \text{ m}^2 \text{ g}^{-1}$) e volume mesoporoso ($0,58 \text{ cm}^3 \text{ g}^{-1}$). As imagens de microscopia eletrônica de varredura (MEV) e o mapeamento químico por EDS indicaram que a impregnação de Nb_2O_5 foi eficiente e houve boa dispersão das nanopartículas na superfície do suporte. Os testes de avaliação da atividade catalítica foram realizados com o poluente azul de metileno (AM) e o contaminante emergente paracetamol (PA). A avaliação catalítica com AM indicou que o catalisador possui elevada eficiência de remoção do poluente modelo a uma taxa de remoção satisfatória, obtendo uma quantidade removida de $984 \text{ mg}_{\text{AM}} \text{ g}_{\text{cat}}^{-1}$. Na avaliação catalítica com o PA, obteve-se uma quantidade removida de $236 \text{ mg}_{\text{PA}} \text{ g}_{\text{cat}}^{-1}$. A partir dos testes realizados, observou-se que a cinética de remoção apresentada pelo catalisador foi tão rápida quanto a do CA e a eficiência de remoção foi similar ao Nb_2O_5 mássico. Foi proposto que o suporte de CA atuou adsorvendo as moléculas de contaminante, enriquecendo a vizinhança dos sítios ativos, onde ocorre a reação de degradação a partir das propriedades ácidas e oxidantes das nanopartículas de óxido de nióbio. Portanto, a impregnação de Nb_2O_5 aumentou a dispersão da fase ativa e a atividade catalítica, resultando em um catalisador eficiente para remoção de contaminantes orgânicos de meio aquoso.





Niterói, RJ. 10 e 11 de abril de 2025

DESENVOLVIMENTO DE COMPÓSITO A BASE DE ÓXIDO DE GRAFENO E ÓXIDO DE COBALTO PARA CAPTURA DE CO₂

Márcio Soares de Moraes^{1,2*}, Patrícia Viana Rodrigues¹, Clarissa Perdomo Rodrigues¹.

¹Instituto Nacional de Tecnologia, ²Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia do Rio de Janeiro.
marcio.soares@int.gov.br*

O aumento das emissões anuais de dióxido de carbono (CO₂), ocasionado pela intensificação das atividades industriais e queima de combustíveis fósseis, é uma das causas das mudanças climáticas. Pesquisas recentes indicam que o grafeno e seus derivados apresentam um promissor potencial para ser utilizado como material adsorvente na captura de CO₂. Este trabalho teve como objetivo a síntese de óxido de cobalto (Co₃O₄) e do compósito de óxido de grafeno (GO) com óxido de cobalto, para posterior avaliação da captura de CO₂. O Co₃O₄ foi sintetizado usando três procedimentos diferentes, sendo duas amostras sintetizadas em sonificador de ponteira (Co₃O₄-T1-U, Co₃O₄-T2-U) e a terceira (Co₃O₄-T3) em banho ultrassom, todas foram produzidas pelo método de precipitação convencional utilizando o Co(NO₃)₂ como precursor, seguido de calcinação (T = 400°C), quando necessário. O GO foi sintetizado através do método de Hummers modificado e utilizado para a confecção do compósito de GO. A integração do Co₃O₄-T2-U ao GO foi realizada com o auxílio do sonificador de ponteira, que resultou na amostra nomeada GO-Co₃O₄-T2-U. A análise termogravimétrica demonstrou que a temperatura de calcinação de 400°C foi eficiente para promover a conversão total dos precursores para Co₃O₄. Os difratogramas de raios X das amostras antes da calcinação apresentaram picos característicos da fase cristalina de CoCO₃ e Co(OH)₂, e após a calcinação destes materiais apresentaram apenas os picos característicos da fase cristalina de Co₃O₄. Os valores de tamanho de cristalito para as amostras sintetizadas foram 23,81 (Co₃O₄-T1-U), 11,41 (Co₃O₄-T2-U) e 24,78 nm (Co₃O₄-T3). O compósito de GO com óxido de cobalto foi obtido com a amostra Co₃O₄-T2-U, por esta ter apresentado menor tamanho de cristalito, favorecendo a distribuição homogênea pelo GO e aumento da área de contato entre os materiais. O difratograma do compósito GO-Co₃O₄-T2-U apresentou um pico em 11,16° (2θ), referente ao plano 002 do GO, somado aos picos característicos de Co₃O₄. As amostras serão avaliadas em função das propriedades texturais e de sua capacidade de adsorção de CO₂.





Niterói, RJ. 10 e 11 de abril de 2025

APLICAÇÃO DE CATALISADORES BIFUNCIONAIS SUPORTADOS EM CeO_2 NA HIDROGENAÇÃO DIRETA DE CO_2 A HIDROCARBONETOS NA PRODUÇÃO DE QAV

Karla L. Viçoso¹; Hugo C. Reis²; Aryane A. Marciniak²; Claudio J. A. Mota^{1,2}

¹ Universidade Federal do Rio de Janeiro, Instituto de Química, Av Athos da Silveira Ramos 149, CT BI A, 21949-909 Rio de Janeiro, Brasil.

² Universidade Federal do Rio de Janeiro, Escola de Química, Av Athos da Silveira Ramos 149, CT BI E, 21949909 Rio de Janeiro, Brasil.

*Email: karladellima@hotmail.com

A tecnologia de Captura e Utilização de Carbono (CCU) surge como uma solução para reduzir o CO_2 atmosférico, convertendo-o em produtos industriais, como combustíveis líquidos, em destaque o querosene de aviação (QAV) com rotas mais sustentáveis. Essa conversão ocorre por hidrogenação direta de CO_2 em duas etapas: a reação reversa de deslocamento gás-água (RWGS), seguida pela síntese de Fischer-Tropsch (FTS). Estudos recentes destacam o uso de catalisadores bifuncionais à base de ferro e cobalto que sejam ativos para ambas as reações. O uso de promotores básicos, tais como o Na e K, e suportes que sejam cataliticamente ativos, como o CeO_2 , podem promover um aumento na conversão de CO_2 e seletividade a hidrocarbonetos de cadeia longa. Com isso, o objetivo deste estudo é avaliar diferentes catalisadores impregnados em CeO_2 como suporte na hidrogenação direta de CO_2 a hidrocarbonetos, sobretudo C_{5+} . O suporte foi sintetizado a partir de método de precipitação com nitrato de cério amoniacal, e calcinado a $500\text{ }^\circ\text{C}/1\text{h}$. Os metais (15% m/m) e promotores alcalinos (2% m/m) foram incorporados ao suporte via impregnação úmida. Os catalisadores foram testados em reator de leito fixo em uma unidade de fluxo contínuo (PID). A redução foi realizada a $400\text{ }^\circ\text{C}$ por 15 horas, sob fluxo de 10% de H_2 diluído em N_2 (40 mL/min). A reação ocorreu a $350\text{ }^\circ\text{C}$ e 40 bar, com mistura gasosa de H_2/CO_2 (3:1 molar). Os produtos gerados foram analisados por cromatografia gasosa (GC) e detector de condutividade térmica (TCD). Os resultados obtidos indicam que o FeNa@CeO_2 se destaca por apresentar a maior conversão de CO_2 (10%) e a mais alta seletividade para hidrocarbonetos C_{5+} (22%), além de apresentar a menor produção de metano (22%). Ao comparar os catalisadores FeNa@CeO_2 e CoNa@CeO_2 , observa-se que o CoNa@CeO_2 apresenta conversão de CO_2 inferior (5%) e maior seletividade para metano (80%), possivelmente devido a redução do cobalto em altas temperaturas, que favorece a formação de metano. Além disso, ao comparar o catalisador FeK@CeO_2 com o FeNa@CeO_2 , nota-se que a adição de potássio resultou em maior seletividade para metano (54%), em razão da metanação que é promovida pelo potássio na hidrogenação de CO_2 . Atualmente, o projeto busca melhorias que incluem a otimização das condições reacionais para a redução da produção de metano e aumento da seletividade para C_{5+} .





Niterói, RJ. 10 e 11 de abril de 2025

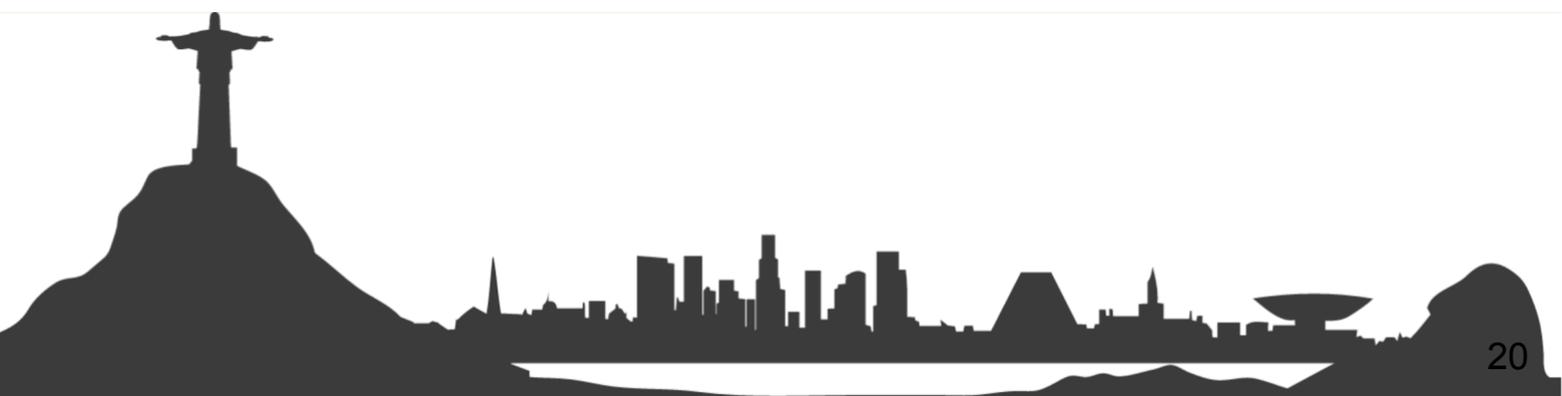
UTILIZAÇÃO DE QUITOSANA COMO ADSORVENTE DO CORANTE TÊXTIL *DIRECT ORANGE-39*

Antonio A. Fernandes de Campos¹, Haroldo C. da Silva¹, Angela S. Rocha¹

¹ Instituto de Química, Programa de Pós-Graduação em Química, Universidade do Estado do Rio de Janeiro (UERJ)

toniofernandes@hotmail.com

A temática ambiental é um assunto cada vez mais debatido geopoliticamente e em nível acadêmico. Neste sentido é possível destacar os níveis alarmantes de poluição, que contribuem para a deterioração de nosso planeta. Com isso, cada vez mais, estudos que envolvam a diminuição dos efeitos poluentes se fazem necessários, valorizados e justificados. Tratando-se especificamente dos corpos d'água, a poluição devido ao descarte de rejeitos industriais e domésticos constitui um desafio que pode ser enfrentado mediante uso de diferentes tecnologias, entre elas o uso de adsorventes. Neste caso, é possível destacar a quitosana, que é um biopolímero que pode ser obtido a partir do exoesqueleto de crustáceos, já sendo encontrado em diversos trabalhos na literatura. Portanto, o objetivo deste trabalho é investigar a adsorção do *Direct Orange-39* – DO39 – utilizando a quitosana. O DO39 é classificado como um corante do tipo AZO, que é prejudicial aos seres dos ambientes aquáticos e potencial carcinogênico quando ingerido por seres humanos, apesar de ser utilizado como corante têxtil. Utilizou-se uma quitosana comercial, que foi previamente purificada por método que começa com sua dissolução em solução de ácido acético 5% v/v por agitação magnética por 24 horas, seguida de filtração em filtro 100% poliéster, de maneira a reter partículas insolúveis, depois a precipitação por adição gota a gota de solução de hidróxido de sódio 1 mol/L. O precipitado final então foi lavado com água destilada e armazenado em dessecador para secagem branda a temperatura ambiente. O precipitado formado é a quitosana purificada e foi caracterizado por Espectroscopia de absorção no infravermelho por transformada de Fourier (FTIR) e difratometria de raios X (DRX). Os testes de adsorção foram realizados utilizando-se 40 mL de solução aquosa 0,04 mmol/L de DO39 e 60 mg de quitosana purificada, durante 60 minutos e 500 rpm. A capacidade de adsorção foi avaliada por meio de medida em espectrofotômetro UV-Vis, a partir da medida de absorvância em 414 nm. A concentração inicial do corante também foi avaliada. Os espectros de FTIR antes e após a purificação indicam a presença da quitosana, e a solubilidade em solução de ácido fraco é compatível com quitosana de alta pureza. O perfil de DRX apresenta os três picos largos e pouco intensos típicos deste biopolímero. A sólido purificado apresentou uma capacidade de adsorção de cerca de 10% da solução 0,04 mmol/L após uma hora, e que estava relacionada com a concentração inicial, como esperado. Este resultado abre a perspectiva de uso deste adsorvente na purificação de efluentes contendo o DO39.





Niterói, RJ. 10 e 11 de abril de 2025

CATALISADORES DE ESPODUMÊNIO IMPREGNADOS COM CÁLCIO PARA TRANSESTERIFICAÇÃO: SINERGIA ENTRE SUPORTE E SÍTIOS BÁSICOS

Khaled M. da Corte,¹ Lara Luporini,^{1*} Larissa G. Souza,¹ Joyce R. Oliveira,¹ Ana Luísa A. Simões,² Fabio B. Passos,³ Sara S. Vieira¹

¹ Universidade Federal Fluminense, Instituto de Química, Departamento de Química Inorgânica, Niterói- RJ

² Universidade Federal de Minas Gerais, ICEX - Departamento de Química. Belo Horizonte – MG

³ Universidade Federal Fluminense, Departamento de Engenharia Química, Niterói- RJ

e-mail: larialuporini@id.uff.br, lgsouza@id.uff.br e sarsilveira@id.uff.br

A intercalação de cátions metálicos na estrutura do espodumênio ($\text{LiAlSi}_2\text{O}_6$) representa uma rota promissora e versátil para a preparação de catalisadores heterogêneos com excelentes propriedades básicas, adequados para reações de transesterificação de óleos vegetais. Neste estudo, avaliou-se a eficácia da inserção de Ca^{2+} na estrutura de rejeitos de mineração de espodumênio, e o sólido obtido foi testado na transesterificação do óleo de soja em meio metílico. O CaO destaca-se como um dos óxidos metálicos mais eficientes e promissores para a reação de transesterificação de óleos vegetais, devido à sua alta atividade catalítica e baixo custo. Contudo, o uso direto do CaO pode levar a problemas de lixiviação, comprometendo sua estabilidade e reutilização. Uma estratégia para mitigar esse problema é a impregnação do CaO , em suportes compostos por sílica. Embora a natureza exata dos sítios catalíticos ainda não esteja completamente elucidada, considera-se que, na estrutura obtida, os íons Ca^{2+} interajam formando espécies básicas do tipo Si-O-Ca que reagem com o metanol, originando metóxido de cálcio, que atua como catalisador da reação. Para a síntese dos catalisadores, espodumênio nas fases α e β foram impregnados com diferentes concentrações de Ca^{2+} (2,5 a 20% m/m), seguido de tratamento térmico a 550 °C por 3 horas. Os materiais foram caracterizados por TG, DRX, EDX e testes de basicidade. As reações foram conduzidas a 100 °C, sob agitação contínua por 4 horas, utilizando razões molares de óleo:metanol de 1:9 e 1:12, com quantidades de catalisador variando entre 2,5 e 10%. Os resultados evidenciaram a influência da estrutura cristalina do suporte (espodumênio α ou β) e do teor de cálcio na eficiência catalítica. O espodumênio α apresentou desempenho catalítico superior ao do espodumênio β , atribuído à sua maior estabilidade cristalina e à eficiência na interação com o cálcio durante a impregnação, resultando em melhor dispersão e formação de sítios catalíticos ativos mais eficientes. Os testes catalíticos revelaram que o aumento do teor de cálcio na matriz do espodumênio α melhorou a conversão até um limite ideal, com o catalisador 10CaEsp550 alcançando conversões próximas a 100%. Esse comportamento sugere uma sinergia entre o suporte e os sítios básicos gerados pelo cálcio, especialmente quando a quantidade de cálcio é suficiente para garantir a formação e a dispersão dos sítios ativos, sem provocar aglomeração ou redução da área ativa. No caso do espodumênio β , a conversão foi inferior, particularmente em baixos teores de cálcio, indicando que sua menor estabilidade estrutural prejudica a formação de sítios catalíticos ativos e, conseqüentemente, sua eficiência na transesterificação. Ainda assim, para teores mais elevados de cálcio (10%), observou-se eficiência catalítica satisfatória ($\approx 85\%$), embora inferior à obtida com o espodumênio α .





Niterói, RJ. 10 e 11 de abril de 2025

PRODUÇÃO DE ÓLEO DIESEL A PARTIR DA CO-PIRÓLISE CATALÍTICA DE BORRA DE PETRÓLEO E POLIOLEFINAS COM UMA ARGILA PILARIZADA COM CROMO

Ana Cristina da Silva Serra¹, Monica Regina da Costa Marques Calderari¹, Jacyra Guimarães Faillace²

¹Programa de Pós-graduação em Química, Universidade do Estado do Rio de Janeiro, RJ, Brasil. anacri.quimica@gmail.com

²Cordenação de química, Instituto Federal de Ciência e Tecnologia do Rio de Janeiro, RJ, Brasil.

As poliolefinas e resíduos da indústria do petróleo, como a borra oleosa, tem elevado conteúdo energético. Entretanto, quando descartados inadequadamente tornam-se fontes de poluição e contaminação do meio ambiente. Métodos de reciclagem química como a pirólise, tem sido muito estudados como alternativas para a degradação desses resíduos. Os catalisadores de argilas pilarizadas com metais de transição, têm sido utilizados nas últimas décadas na pirólise de plásticos e óleos pesados gerando bons rendimentos de combustíveis. O objetivo desse trabalho foi avaliar a eficiência de um catalisador de argila pilarizada com cromo (ARGCr), na pirólise da borra oleosa de petróleo e poliolefinas (PEAD, PEBD e PP) virgens e pós-consumo visando obter líquidos com potencial combustível na fração diesel. Os polímeros utilizados foram os polietilenos de alta densidade (PEAD) e de baixa densidade (PEBD) e o polipropileno (PP). As pirólises foram realizadas em um forno, com reator de leito fixo sob fluxo de nitrogênio à 450 °C por 15 minutos. Os resultados das pirólises com a ARGCr foram comparados com uma argila comercial ácida reestruturada (K10). Na primeira etapa das co-pirólises catalíticas, foram utilizados 1 g de borra previamente seca, 10% (p/p) de catalisador e 10% de poliolefinas (PEAD, PEBD, PP e mistura). Na mistura a proporção entre PEAD:PEBD:PP foi de (1:1:1). Na segunda etapa das co-pirólises a massa de borra seca foi constante (1g), enquanto a % PEAD variou de 10%, 20%, 30%, 40% e 50%. O teor de catalisador foi de 10% em relação a massa de PEAD e borra seca somadas. Com ambos os catalisadores, as co-pirólises catalíticas da borra de petróleo e 10% de poliolefinas foram dominadas pela pirólise da borra seca gerando cerca de 40% de hidrocarbonetos leves na faixa do óleo diesel. Essas co-pirólises apresentaram menores proporções de hidrocarbonetos parafínicos se comparados às das pirólises catalíticas das poliolefinas. Aumentando os teores de PEAD para até 50% nas co-pirólises com a borra de petróleo, os teores de hidrocarbonetos leves na faixa do diesel aumentaram para cerca de 50%, sem mudanças significativas nos teores de parafínicos. Os resultados das co-pirólises sugeriram que os polímeros e a borra pirolisaram de forma independente. A reciclagem química da borra de petróleo e PEAD nas co-pirólises especialmente com a ARGCr mostraram que maior quantidade de resíduos pode ser tratada, gerando um líquido pirolítico com características similares às do óleo diesel.





Niterói, RJ. 10 e 11 de abril de 2025

MODELLING CO₂ ADSORPTION AND DESORPTION ON SiC- INTEGRATED 13X ZEOLITE MATERIAL

de Souza, J.T.¹, Tomaz, M. R. C.¹, Saavedra, J. M. M.¹, Pobleto, I. B. S.¹,
Queiroz, E. A. S.¹, Mota, C. J. A.², Romano, P. N.¹,
de Almeida, J. M. A. R.^{1,2*}

¹ Process Intensification and Catalysis Laboratory, Federal University of Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, Brazil

² Chemistry Institute, Federal University of Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, Brazil

*Email: j.monnerat@iq.ufrj.br

The capture of CO₂ plays an important role in controlling atmospheric CO₂ concentration to mitigate climate change. In this work, we experimentally validated a simplified model of CO₂ adsorption and desorption with potential applications in direct air capture (DAC) technologies. The selected adsorption material was Zeolite 13X, modified with 33wt.% silicon carbide (SiC) to enhance the CO₂ absorption and improve heat transfer during desorption cycles. The adsorption kinetics were described using a double-exponential semi-empirical model, accounting for both chemisorption and intra-particle diffusion mechanisms. CO₂ desorption follows a first-order kinetics model. Adsorption experiments were performed at 35°C, 40°C, 50°C and 70°C for 60 minutes under a pure CO₂ atmosphere (50 mL/min) to ensure accurate assessment of the material's capture capacity. For the desorption step, the temperature was increased to 150 °C at a rate of 10 °C/min and held for 30 minutes under N₂ atmosphere (50 mL/min). The desorption procedure was then repeated at temperatures of 100 °C, 80 °C, and 50 °C. The adsorption and desorption model parameters were temperature-dependent, allowing the calculation of total CO₂ adsorbed/desorbed onto the synthesized modified zeolite (mmolCO₂/g_{zeolite}) at each temperature. The model demonstrated high accuracy with experimental results, with an absolute relative error of less than 2%. The obtained k_1/k_2 ratio exceeded 1 in all temperatures, indicating that CO₂ diffusion through an external layer was the rate-limiting step in the adsorption. This suggests that mass transfer resistance at the gas-solid interface governed the overall process. Desorption results consistently demonstrated that higher temperatures accelerated the CO₂ desorption rate and, consequently, reduced the overall cycle time.





Niterói, RJ. 10 e 11 de abril de 2025

SÍNTESE E CARACTERIZAÇÃO DE CARBONOS MESOPOROSOS UTILIZANDO TRÊS DIFERENTES FONTES DE AÇÚCARES E AEROSIL-200 COMO MOLDE

Talita P. Rosa¹, Mônica R. C. M. Calderari¹, Angela S. Rocha¹

¹ Instituto de Química, Programa de Pós-Graduação em Química, PPGQ/ Universidade do Estado do Rio de Janeiro (UERJ) talitaprosa17@gmail.com

Os chamados carbonos mesoporosos ordenados (CMOs) foram introduzidos em 1999 pelo grupo de Ryoo e Hyeon, empregando a técnica de hard-templating, utilizando uma sílica mesoporosa ordenada como molde. A obtenção dos mesoporosos é dada pelo revestimento de um material à base de sílica, o molde, por precursores carbonáceos, seguida da carbonização em alta temperatura e remoção de molde em soluções ácidas/básicas. Desta forma os mesoporos formados tem estrutura relacionada com a fonte de sílica usada como molde. Os carbonos mesoporosos são materiais com elevada área específica e por isso podem ser utilizados como catalisadores, suportes catalíticos ou até mesmo adsorventes, com a vantagem de possibilitar o acesso de moléculas grandes à superfície, devido ao tamanho dos poros. Dessa forma, o objetivo deste trabalho é sintetizar e caracterizar catalisadores mesoporosos a partir de três fontes de açúcares: Sacarose, Frutose e Glicose, visando à obtenção de materiais com elevada área de mesoporos e avaliação da influência da fonte de carbono nas propriedades dos carbonos obtidos. Os carbonos mesoporosos foram sintetizados utilizando o procedimento experimental adaptado do descrito por Yu (2001) e colaboradores. A primeira etapa consiste na polimerização das três fontes de açúcar sobre a fonte de sílica, Aerosil-200 na presença de ácido sulfúrico e água a 100 °C por 5 h total de reação, seguida da carbonização dos materiais carbonos mesoporosos secos a 800 °C sob vazão de hélio e remoção da sílica com solução aquosa de KOH 1 mol/L a temperatura ambiente por 12 horas. Na etapa final o sólido é lavado com água para eliminação da solução básica e seca a 100 °C. Os materiais foram caracterizados por fisissorção de nitrogênio, FTIR e difratometria de raios X (DRX). Os resultados de FTIR e DRX são compatíveis com materiais carbonáceos do tipo carvões amorfos. Os resultados de análise textural realizados por fisissorção de nitrogênio indicaram que os materiais obtidos a partir das três diferentes fontes de açúcares apresentaram elevadas áreas e volume de poros, além de elevada razão meso/microporos como desejado. Verificou-se que os açúcares Sacarose e Glicose levaram à geração de carbonos mais satisfatórios, o que é uma vantagem pelo ponto de vista econômico, visto que, são açúcares com preços mais acessíveis, quando comparados com a Frutose, indicando a possibilidade de uso destes sólidos como catalisadores ou adsorventes.





6º Encontro de
Catálise
Regional 2
RJ, MG e ES – 2025



SBCAT
SOCIEDADE BRASILEIRA DE CATÁLISE

CONVERSÃO CATALÍTICA DE BIOMASSA E DERIVADOS





Niterói, RJ. 10 e 11 de abril de 2025

OBTENÇÃO DE ÁLCOOL FURFURÍLICO UTILIZANDO CATALISADORES HETEROGÊNEOS A BASE DE ZrO_2

Milena da S. Souza^{1,2}, Elise M. Albuquerque², Marco A. Fraga^{1,2,3}

¹Instituto Militar de Engenharia, IME; ²Instituto Nacional de Tecnologia, INT; ³DEQM / PUC – Rio.

milena.souza@ime.eb.br; marco.fraga@int.gov.br

A biomassa lignocelulósica vem se consolidando como uma alternativa sustentável para a obtenção de insumos químicos de alto valor agregado, contribuindo para a substituição de fontes fósseis na matriz energética. Entre os diversos compostos derivados, o álcool furfurílico (AFF) se destaca como uma molécula plataforma versátil, utilizada na produção de resinas, solventes e biocombustíveis. No entanto, a conversão seletiva de precursores lignocelulósicos em AFF ainda enfrenta alguns desafios, especialmente devido à desativação dos sítios ácidos. Dessa forma, torna-se fundamental o desenvolvimento de catalisadores mais eficientes para otimizar esse processo. O número de sítios ácidos de Lewis está diretamente relacionado as características estruturais e ambientais da superfície, influenciando na força e quantidade dos sítios ativos dispersos no catalisador. Considerando a variedade de catalisadores utilizados para mecanismo de Meerwein-Ponndorf-Verley (MPV), o óxido de zircônio (ZrO_2) tem se demonstrado promissor, especialmente devido à sua estabilidade, atividade e capacidade de regeneração. Estudos mostram que o ZrO_2 apresenta atividade catalítica na redução do 2-propanol a acetona, assim promovendo a hidrogenação no meio reacional. Neste contexto, este trabalho visa estudar ZrO_2 , TiO_2-ZrO_2 e SiO_2-ZrO_2 na conversão do furfural a álcool furfurílico avaliando a influência da água no meio reacional e seu impacto na etapa de hidrogenação via mecanismo de MPV, de forma a minimizar a desativação dos sítios ácidos de Lewis. Os materiais são obtidos na forma de pellets, portanto, foram macerados e peneirados 53 – 63 μm em seguida foram calcinados a 600°C por com taxa de aquecimento de 10°C.min⁻¹ por 4 horas. As reações foram testas em um reator a batelada do tipo Parr, com concentração 83 mmol de furfural em 2-propanol com pressão de 30 bar de N_2 , a 130°C por 6 horas sob agitação constante. Nas reações com 10%vol. de água, pode-se observar que não houve conversão do furfural, tendo sua atividade inibida pela formação de adutos de água na superfície do catalisador. Vale ressaltar que a presença da acetona no meio reacional apresenta indícios de que os diferentes catalisadores realizam a hidrogenação via mecanismo de MPV e que a geração de hidrofobicidade do material ainda é algo a ser estudado. As reações foram monitoras por HPLC-RID-PDA e para as próximas etapas visa estudar (<10%vol.) a interferência da água em diferentes concentrações. Os mesmos catalisadores foram caracterizados por difração de Raios X (DRX), espectrometria de fluorescência de raios X (FRX) e fisissorção de N_2 . Demais caracterizações ainda serão realizadas como dessorção a temperatura programada de amônia (TPD-NH₃) e espectroscopia de infravermelho com adsorção de Piridina (IR-Piridina) para complementar as análises estruturais.





Niterói, RJ. 10 e 11 de abril de 2025

EFEITO DO RÊNIO NA ATIVIDADE CATALÍTICA DE Cu-Re/ZrO₂ PARA A REAÇÃO DE HIDRODESOXIGENAÇÃO DE M-CRESOL

Claudio R. A. de Abreu¹, Lucas R. Francisco², Raimundo C. R. Neto², Rodrigo de P. F. Bonfim¹, Fábio B. Noronha², Priscilla M. de Souza¹, Fabio S. Toniolo^{1*}

¹ Programa de Engenharia Química/COPPE/Universidade Federal do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, Brazil

² Instituto Nacional de Tecnologia, Rio de Janeiro, Brazil.

* E-mail: toniolo@peq.coppe.ufrj.br.

Este estudo investigou o impacto da adição de diferentes teores de Re no desempenho de catalisadores de Cu suportados em ZrO₂ na reação de HDO do m-cresol. O suporte foi sintetizado pelo método hidrotérmico, utilizando NaBH₄ e ZrO(NO₃)₂·5H₂O, enquanto os catalisadores Cu-Re/ZrO₂ foram preparados por co-impregnação ao ponto úmido, utilizando Cu(NO₃)₂·3H₂O e Re₂O₇ como precursores, visando um teor de 5% m/m de Cu e teores de Re variando entre 0,5 e 5% m/m. Após secagem e calcinação a 400 °C, os catalisadores foram caracterizados por adsorção/dessorção de piridina, H₂-TPR e quimiossorção de N₂O. Os testes catalíticos foram realizados em fase gasosa, utilizando um reator de leito fixo a 300 °C e pressão atmosférica de H₂. Observou-se que a adição de Re altera a distribuição dos sítios ácidos nos catalisadores, aumentando a acidez de Brønsted e diminuindo a acidez de Lewis, o que afeta diretamente a atividade catalítica. Os catalisadores bimetálicos Cu-Re, por sua vez, apresentam maior redutibilidade do Cu, indicando interações fortes entre os metais. Contudo, o aumento da carga de Re provoca uma diminuição na dispersão do Cu, devido à cobertura das partículas de Cu pelo Re. Os testes catalíticos mostraram que tanto a taxa de HDO quanto a distribuição dos produtos variam conforme o teor de Re nos catalisadores. Enquanto o catalisador 5Cu se mostra inativo para HDO, produzindo apenas produtos da hidrogenação do anel aromático e da desidratação sequencial, o catalisador 5Re demonstra alta capacidade de HDO, gerando, predominantemente, tolueno (93,2%). Nos catalisadores bimetálicos, a adição de Re ao Cu resulta em um aumento significativo da taxa de HDO e da seletividade para tolueno (82,6%), ao passo que as seletividades para hidrogenação e desidratação diminuem. Os catalisadores 5Cu-2Re e 5Cu-5Re apresentam a mesma taxa de HDO (0,39 mmol_{g_{metal}}⁻¹ min⁻¹), embora a distribuição dos produtos varie com o teor metálico. A presença de Re favorece a desoxigenação, enquanto o Cu impulsiona a hidrogenação, e, assim, a sinergia entre ambos os metais contribui para o aumento da atividade catalítica de HDO.





Niterói, RJ. 10 e 11 de abril de 2025

BIOCARVÃO DE SINGÔNIO FUNCIONALIZADO COM NiO COMO CATALISADOR PARA A PRODUÇÃO DE ÁLCOOL FURFURÍLICO

**Vinicius G. C. Madriaga*¹, Saulo B. Pinheiro¹, Rodrigo D. Santos¹,
Marcelo Avelar¹, Fabio B. Passos², Thiago M. Lima¹**

¹Grupo de Catálise e Valorização da Biomassa, Departamento de Química Inorgânica, Universidade Federal Fluminense, Campus do Valonguinho, Niterói, Rio de Janeiro.

²Laboratório de Reatores, Cinética e Catálise, Departamento de Engenharia Química e Engenharia do Petróleo, Universidade Federal Fluminense, Campus Praia Vermelha, Niterói, Rio de Janeiro.

vinicius_madriaga@id.uff.br

A biomassa lignocelulósica tem se destacado como uma importante fonte renovável para diferentes produtos de valor agregado. Algumas moléculas plataforma como o furfural (FUR), podem ser facilmente obtidas a partir de protocolos bem estabelecidos. A conversão de FUR em outras moléculas de valor agregado, porém, ainda é um campo amplo a ser explorado, especialmente na produção de álcool furfurílico (FA) em condições mais amenas e sem a necessidade hidrogênio molecular. Assim, a conversão de FUR a FA pode ser realizada de maneira mais sustentável por meio da reação de redução do tipo Meerwein–Ponndorf–Verley (MPV) que necessita de um catalisador com sítios de ácido de Lewis. Nesse contexto, este trabalho visa utilizar um biocarvão da planta Singônio (*Syngonium Podophyllum*) funcionalizado com óxido de níquel como catalisador de origem renovável para a reação citada. Inicialmente, o carvão foi obtido através da calcinação do Singônio a 350 °C por 3h, posteriormente, o carvão foi impregnado com 2 mL uma solução aquosa de Ni(NO₃)₂·6H₂O 10%(m/m) e calcinado a 350 °C durante 3h. A análise elementar revelou uma razão molar H/C de 1,04, o que indica que a calcinação foi efetiva na formação do carvão. Além disso, a análise de difração de raios X apresentou os picos correspondentes a formação do NiO, que foi posteriormente confirmada pela técnica de Microscopia Eletrônica de Varredura, onde se observou pequenas partículas de NiO sobre a estrutura carbônica do carvão. A reação foi testada conforme parâmetros já estabelecidos: 28 uL de FUR, 1,5 mL de isopropanol e 100 mg de catalisador, e a conversão obtida foi 11,1% com 76% de seletividade para o FA. Um estudo de parâmetro foi conduzido para avaliar o comportamento da temperatura e da quantidade de catalisador e se observa que em temperaturas mais elevadas e massas mais reduzidas, a conversão apresenta valores mais altos, chegando a 75,1%, devido a efeitos de difusão. Com isso, este catalisador se mostra promissor para a obtenção de álcool furfurílico de uma maneira mais sustentável e utilizado uma biomassa residual como suporte catalítico, além de utilizar um metal como o níquel que possui baixa pegada de carbono quando comparado aos materiais tipicamente utilizados industrialmente a base de paládio e outros metais nobres.





Niterói, RJ. 10 e 11 de abril de 2025

Efeito da acidez de catalisadores de Pd suportado em Nb_2O_5 e em TiO_2 na valorização da lignina

Mateus Freitas Paiva^{1,2}, Affolabi Abdel-Aziz Tidjani^{1,2,3}, Priscilla Magalhães de Souza⁴, Raimundo Crisóstomo Rabelo-Neto¹, Yann le Brech⁵, Robert Wojcieszak^{2,5}, Cristiane Assumpção Henriques³, Fábio Bellot Noronha^{1,2*}

¹Instituto Nacional de Tecnologia, Divisão de Catálise, Biocatálise e Processos Químicos, 20081-312, Rio de Janeiro; ²Université de Lille, CNRS, Unité de Catalyse et Chimie du Solide, F-59000, Lille, França; ³Universidade do Estado do Rio de Janeiro, Programa de Pós-Graduação em Engenharia Química, 20550-900, Rio de Janeiro; ⁴Instituto Alberto Luiz Coimbra de Pós-Graduação e Pesquisa em Engenharia, Programa de Pós-Graduação em Engenharia Química, 21941-914, Rio de Janeiro; ⁵Université de Lorraine, CNRS, Laboratoire Lorrain de Chimie Moléculaire, 54506, Nancy, França.

*fabio.bellot@int.gov.br

A lignina é a maior fonte renovável de compostos aromáticos que pode ser usada para a produção de produtos de alto valor agregado. A despolimerização catalítica redutiva (RCD) se apresenta como uma alternativa promissora para a valorização da lignina, mas os mecanismos de reação ainda não estão completamente elucidados, especialmente quanto à influência das propriedades ácidas dos catalisadores na distribuição dos produtos. Este trabalho estuda o efeito dos sítios ácidos no desempenho de catalisadores de Pd/ TiO_2 e Pd/ Nb_2O_5 para a RCD de 3 ligninas Organosolv (isoladas de diferentes biomassas: a faia, a palha de trigo e o eucalipto) usando etanol como solvente a 250 °C e 40 bar de H_2 . Os catalisadores foram preparados pelo método de imobilização via sol-gel e caracterizados por diferentes técnicas: FRX, fisissorção de N_2 , TPD- NH_3 , FTIR de piridina adsorvida e STEM. A análise de TPD- NH_3 revelou que o catalisador 1%Pd/ Nb_2O_5 apresenta maior concentração de sítios ácidos ($259 \mu\text{mol g}^{-1}$) em comparação ao 1%Pd/ TiO_2 ($231 \mu\text{mol g}^{-1}$), além da presença de sítios ácidos de Brønsted apenas no Pd/ Nb_2O_5 . A reação sem catalisador gerou rendimentos limitados de monômeros fenólicos, sendo a lignina de faia a mais reativa (5,94%). Na presença de Pd/ TiO_2 , o rendimento para monofenóis aumentou significativamente e seguiu a ordem: eucalipto (7,61%) < palha de trigo (30,91%) < faia (37,7%). Pd/ TiO_2 favoreceu as reações de hidrogenação e hidrogenólise dos monômeros fenólicos formados na solvólise da lignina com etanol. Já o Pd/ Nb_2O_5 exibiu uma distribuição de produtos diferente, reduzindo a formação de monômeros fenólicos (7%) e promovendo a formação de alquilfenóis, possivelmente devido aos sítios ácidos de Brønsted e maior acidez total. Os resultados demonstram que as propriedades ácidas dos catalisadores influenciam significativamente o mecanismo da RCD da lignina, permitindo modular a seletividade dos produtos conforme a aplicação desejada. Esse estudo contribui para o desenvolvimento de processos catalíticos mais eficientes e flexíveis para a conversão da lignina em compostos de alto valor.





Niterói, RJ. 10 e 11 de abril de 2025

Hidrocarbonetos Renováveis a partir de Óleo de *Scenedesmus* sp.: Otimização da Seletividade na reação de hidrodeoxigenação (HDO) com Catalisadores $\text{Mo}_2\text{C}/\text{Al}_2\text{O}_3$ e $\text{NiMoC}/\text{Al}_2\text{O}_3$

HJ Mesa¹; Vítor Rodrigo de Melo e Melo²; Pedro Lucas Oliveira Batista², João Monnerat Araujo Ribeiro de Almeida¹; Renata Martins Braga²; Pedro Nothaft Romano^{1*};

¹Laboratório de Intensificação de Processos e Catálise- LIPCAT-Universidade Federal do Rio de Janeiro;

²Laboratório de Tecnologia Ambiental-Universidade Federal do Rio Grande do Norte.

* pedroromano@iq.ufrj.br

A crescente demanda por combustíveis renováveis impulsiona a pesquisa por fontes alternativas ao petróleo, destacando o óleo de microalgas devido à sua elevada produtividade e capacidade de biofixação de CO_2 . No entanto, a alta concentração de oxigênio nesses óleos compromete sua estabilidade térmica e compatibilidade com motores convencionais, exigindo processos de refinamento avançados. A hidrodeseoxigenação (HDO) é uma estratégia eficiente para converter esses óleos em hidrocarbonetos similares aos combustíveis fósseis. Este estudo avalia a eficiência dos catalisadores $\text{Mo}_2\text{C}/\text{Al}_2\text{O}_3$ e $\text{NiMoC}/\text{Al}_2\text{O}_3$ em sua forma carburada na otimização da seletividade dos produtos da HDO do óleo de *Scenedesmus* sp., visando maximizar a conversão em hidrocarbonetos com propriedades similares às do combustível fóssil. Os catalisadores foram caracterizados por difração de Raios-X (DRX), análise de área superficial, dessorção programada de temperatura com amônia (TPD- NH_3) e espectroscopia no infravermelho com piridina (Py-FTIR), indicando aumento da acidez e da área superficial, especialmente no catalisador contendo níquel. O óleo foi extraído por separação física e química utilizando hexano P.A., sendo caracterizado quanto à composição química, com ênfase no teor de oxigênio, visto o baixo teor de compostos nitrogenados (2%). A reação de HDO ocorreu em um reator Parr (100 mL) operando em batelada sob condições controladas de temperatura, pressão de hidrogênio e tempo de reação. Os produtos líquidos foram analisados por cromatografia gasosa acoplada à espectrometria de massas (GC-MS) e a conversão para HDO foi avaliada por espectroscopia no infravermelho por transformada de Fourier (FT-IR) e análises físico-químicas elementares (C, H, N e O). Os catalisadores apresentaram alta eficiência na remoção seletiva de oxigênio, reduzindo seu teor de 12% para menos de 1%, enquanto a redução de compostos nitrogenados foi inferior a 1%. A fração rica em hidrocarbonetos $\text{C}_5\text{-C}_{12}$ apresentou seletividade superior a 40%, com o $\text{NiMoC}/\text{Al}_2\text{O}_3$ favorecendo parafinas lineares e o $\text{Mo}_2\text{C}/\text{Al}_2\text{O}_3$ promovendo parafinas ramificadas. O produto demonstrou propriedades adequadas para aplicação como bio-hidrocarboneto renovável, sendo compatível com combustíveis convencionais. Esses achados reforçam o potencial do óleo de microalgas para a produção de combustíveis avançados e demonstram a viabilidade dos catalisadores Mo e NiMo na otimização da seletividade da HDO, contribuindo para tecnologias sustentáveis e para a redução de emissões de carbono.





Niterói, RJ. 10 e 11 de abril de 2025

CONVERSÃO DIRETA DE ETANOL EM ÓXIDO DE ETILENO SOBRE CATALISADOR BIFUNCIONAL DO TIPO CORE-SHELL DE NANOPARTÍCULAS DE PRATA RECOBERTAS EM ALUMINA.

Raissa E. C. Cruz^{1*}, Leonardo P. Ozorio¹, João M. A. R. Almeida^{1,2}, Claudio J. A. Mota^{1,2}

¹ Universidade Federal do Rio de Janeiro, Instituto de Química, Av Athos da Silveira Ramos 149, CT Bl A, 21949-909 Rio de Janeiro, Brasil.

² Universidade Federal do Rio de Janeiro, Escola de Química, Av Athos da Silveira Ramos 149, CT Bl E, 21949-909 Rio de Janeiro, Brasil

*raissaecard@pos.iq.ufrj.br

O óxido de etileno é um intermediário essencial na produção de etilenoglicol, etanolaminas e surfactantes não iônicos. Devido ao alto custo e à limitação dos recursos petrolíferos, alternativas vêm sendo exploradas, como o uso do bioetanol. Entretanto, a conversão direta de etanol em óxido de etileno ainda é limitada, envolvendo a desidratação do etanol para etileno e posterior oxidação da olefina, mas com custo elevado. Neste estudo, investigamos um catalisador core-shell para essa reação em cascata. As nanopartículas de prata (AgNPs) foram sintetizadas por um método modificado, no qual nitrato de prata (AgNO_3) foi adicionado à uma solução de etilenoglicol (EG) e polivinilpirrolidona (PVP), aquecido a 145°C por 6 minutos. Após ultrassom, adicionou-se isopropóxido de alumínio em ciclohexano para recobrir as AgNPs com alumina. O material foi centrifugado, seco e caracterizado por UV-Vis, DLS, XRF, TEM e testes de acidez. As AgNPs apresentaram bandas plasmônicas em torno de 80 nm, com distribuição bimodal de tamanhos (6% com 7 nm e 94% com 99 nm). Após o revestimento com alumina, a análise por XRF confirmou 15% de prata e área superficial de 3,5 m²/g. A acidez, predominantemente do tipo Lewis, foi examinada por FTIR-Py. Os ensaios catalíticos foram realizados em um reator de leito fixo, com 250 mg do catalisador e 250 mg de carvão de silício, com condições variadas. O catalisador foi reduzido sob N_2/H_2 (9:1) a 350°C por 2 horas antes da introdução do etanol. No primeiro teste (4 bar, 350°C, $\text{N}_2/\text{ar} = 7:3$), o principal produto foi acetaldeído, seguido de acetato de etila e éter etílico, indicando que a desidrogenação do etanol foi preferencial. A seletividade inicial para etileno foi de 40%, mas foi diminuindo com o tempo. O segundo teste (7 bar, 350°C, $\text{N}_2/\text{O}_2 = 7:3$) mostrou que catalisador manteve a atividade por três dias, com seletividade máxima de 1,6% para óxido de etileno. Testes sob maior pressão (20 bar, 350°C, $\text{N}_2/\text{O}_2 = 7:3$) indicaram aumento na produção de etileno e subsequente oxidação para óxido de etileno. Esses resultados mostram um catalisador promissor para a formação de óxido de etileno a partir do etanol.





Niterói, RJ. 10 e 11 de abril de 2025

USO DE CATALISADORES TANDEM PARA OLIGOMERIZAÇÃO DE ETENO VISANDO A PRODUÇÃO DE SAFS

Tadeu Kassuga Roxo¹, Débora da Silva Fernandes¹, Cristiane Assumpção Henriques¹

¹ UERJ – Instituto de Química – Programa de Pós-graduação em Engenharia Química, Rua São Francisco Xavier, 524 – Maracanã – Rio de Janeiro – Brasil – CEP: 20550-900. *email: cah@uerj.br¹

O aumento do consumo global de querosene de aviação juntamente com a necessidade de reduzir as emissões de CO₂, tem incentivado a busca por combustíveis de aviação sustentáveis (SAFs), particularmente para voos de longa distância, onde seu uso impacta diretamente na redução das emissões de carbono contribuindo para a sustentabilidade ambiental na indústria da aviação. Uma das rotas para obtenção de SAFs utiliza etanol como matéria prima e envolve a desidratação do etanol a eteno, seguida da oligomerização deste a olefinas maiores. Devido a problemas ambientais como uso de solventes orgânicos e dificuldades na separação e reutilização de catalisadores homogêneos a catálise heterogênea tem se destacado como uma alternativa para essas reações. Este trabalho avalia o desempenho de catalisadores tandem formados pelo catalisador Ni-SiO₂-Al₂O₃ (Ni/SA) com a zeólita ZSM-5 de SAR 30, obtidos a partir da mistura física dos catalisadores, realizada na proporção 1:1. O catalisador de Ni foi obtido através da impregnação ao ponto úmido, onde uma solução de Ni (NO₃)₂ foi adicionada a sílica alumina comercial (SRAL 40– SASOL) para se obter um catalisador com 2% de Ni em massa. Como etapa inicial do estudo os testes catalíticos foram conduzidos a pressão atmosférica, por 210 minutos, com pressão parcial de eteno = 0,12 atm. O tempo de contato (τ) e a temperatura de reação (T) foram variados buscando obter os produtos de interesse. Na reação realizada a 500°C e $\tau=0,15$ h observou-se que o Ni/SA gera conversões muito baixas tendendo a zero enquanto o catalisador tandem promove um aumento na conversão (35%) e forma principalmente propeno. Para a reação conduzida em T =300°C e $\tau=0,43$ h nota-se uma conversão baixa para o Ni/SA (10%) e o catalisador se desativa completamente após 65 minutos de reação. Nesta mesma circunstância, a zeólita ZSM-5 começa com uma conversão de 80%, atingindo 15% após 65 minutos de reação. Por outro lado, o catalisador Ni/SA -ZSM-5 começa com uma conversão de 60% e alcança 26%. Ao utilizar o Ni/SA há formação predominante de parafinas e compostos com 5 carbonos. A introdução da zeólita ZSM-5 modifica o perfil dos produtos formados favorecendo a formação de butenos. Nesta mesma condição a zeólita ZSM-5 pura forma principalmente propeno e butenos. Desse modo, foi possível verificar alterações tanto no rendimento aos produtos como na estabilidade dos catalisadores nas condições reacionais empregadas.





Niterói, RJ. 10 e 11 de abril de 2025

AVALIAÇÃO CATALÍTICA DA RESINA AMBERLYST-15 E DA ZEÓLITA HY NA REAÇÃO DE CETALIZAÇÃO DO LEVULINATO DE ETILA COM DIÓIS DE CADEIA LONGA

Hugo Dias¹, Daniella R. Fernandes¹, Elizabeth Roditi Lachter¹

¹ Universidade Federal do Rio de Janeiro, Instituto de Química, hugodias@pos.iq.ufrj.br

O levulinato de etila, derivado da biomassa lignocelulósica, é uma alternativa promissora para a produção de diversos produtos químicos a partir de fontes renováveis. Dentre suas transformações podemos citar a cetalização com a formação de cetais, os quais podem ser utilizados como plastificantes, solventes e aditivos nas indústrias alimentícia e cosmética. No entanto, devido à presença de grupos funcionais reativos, torna-se necessário a avaliação do processo catalítico para maximizar a conversão e a seletividade ao produto de interesse – o cetal. Neste trabalho, investigou-se como sólidos ácidos a Resina Amberlyst-15 e a zeólita HY como catalisadores heterogêneos na reação de cetalização do levulinato de etila com dióis geminais de cadeia longa: 1,2-octanodiol (C8), 1,2-decanodiol (C10) e 1,2-dodecanodiol (C12). As reações foram conduzidas a 80 °C e 125 °C (temperatura do banho de óleo), relação molar de 1:2 entre o diol e o éster, e quantidades de catalisador entre 0,5% (m/m) e 10% (m/m). Os produtos foram isolados por cromatografia líquida em coluna aberta e caracterizados por métodos espectroscópicos (RMN de ¹H, ¹³C, IV) e espectrometria de massas (EM). A zeólita foi caracterizada por fluorescência de raios X (FRX), difração de raios X (DRX), adsorção e dessorção de nitrogênio (ASAP) e espectroscopia no infravermelho com adsorção de piridina (PY-FTIR). Sob condições de reações de 80 °C, 1% (m/m) de catalisador em relação ao reagente limitante e tempo de 120 minutos, ambos os sólidos ácidos apresentaram atividade catalítica, levando à formação dos cetais. Os testes catalíticos mostraram conversões dos dióis C8, C10 e C12 com a Amberlyst-15 de 90%, 85% e 82%, respectivamente; e com a zeólita HY de 38%, 37% e 34%, respectivamente. A seletividade ao produto de interesse foi de 100% em todas essas reações, nessas condições. Entretanto, foi observado que o aumento da temperatura levou à um incremento da conversão dos dióis em cetal sobre ambos os sólidos, porém, a seletividade para a formação do cetal foi reduzida na presença da resina, o que não foi observado na presença da zeólita HY. Testes de reuso mostraram que a Amberlyst-15 pode ser aplicada em até três ciclos sem perda considerável de atividade quando comparada a zeólita, que logo perde sua atividade, considerando a regeneração por lavagem com etanol e hexano, além da secagem sob temperatura. Entretanto, a zeólita pode ser reutilizada após calcinação sem perda de atividade.





Niterói, RJ. 10 e 11 de abril de 2025

HIDRÓLISE DO AMIDO DA AMÊNDOA DA MANGA (*MANGIFERA INDICA*) EM GLICOSE SOBRE NbOPO₄

Alannah Montenegro Calazans^{1,2*}, Simone de Jesus Canhaci², Marco A. Fraga^{1,2,3}

¹Instituto Militar de Engenharia; ²Instituto Nacional de Tecnologia; ³DEQM/PUC – Rio; alannahcalazans@gmail.com

Com os impactos ambientais causados pelo uso desenfreado de combustíveis fósseis, fontes renováveis, como a biomassa amilácea, tem sido amplamente exploradas para a produção de moléculas de alto valor agregado na indústria química. Nesse contexto, este trabalho investigou a obtenção de glicose a partir do amido presente na amêndoa da manga, um resíduo agroindustrial, considerando sua relevância como uma molécula plataforma. Foram avaliados catalisadores heterogêneos ácidos a base de nióbio na hidrólise de diferentes amidos: o nativo da amêndoa da manga, o amido nativo tratado com hidróxido de sódio (NaOH) e o amido comercial da batata (Sigma-Aldrich). As caracterizações físico-químicas dos amidos apresentaram variações nos teores de amilose (20-24%) e amilopectina (74-80%), além de diferenças nas estruturas cristalinas, com o amido da manga (*Mangifera indica*) apresentando o tipo A (comum em cereais) e o amido comercial o tipo B (comum em tubérculos). Os testes catalíticos foram realizados em um reator batelada a 150°C por 8 h, retirando alíquotas a cada 1 h, com monitoramento da conversão do amido por solução de lugol. Os resultados indicaram que todos os catalisadores a base de nióbio mostraram atividade catalítica na conversão do amido nativo, especialmente o NbOPO₄ calcinado a 300°C (NbOPO₄ – 300) e NbOPO₄ calcinado a 600°C (NbOPO₄ – 600), que resultaram em maiores rendimentos de maltooligossacarídeos (MOS), glicose e hidroximetilfurfural (HMF). A partir das caracterizações físico-químicas dos catalisadores observou-se que as características físicas não impactaram diretamente a distribuição dos produtos finais, contudo a variação na distribuição de força e na acidez total dos catalisadores podem ter influenciado esse processo. Os testes catalíticos também revelaram que o amido nativo foi hidrolisado mais facilmente que o amido comercial, devido às suas propriedades químicas e estruturais distintas. Esses resultados são relevantes para o aproveitamento de resíduos agroindustriais, como a amêndoa da manga, na produção de bioprodutos de alto valor agregado.





Niterói, RJ. 10 e 11 de abril de 2025

EFEITO PROMOTOR DO COBRE NA HIDROXIAPATITA PARA ACOMPLAMENTO DE ETANOL EM COMPOSTOS C4+

Renato Dias Barbosa¹; Henrique Poltronieri Pacheco¹

¹ Instituto Alberto Luiz Coimbra de Pós-Graduação e Pesquisa de Engenharia (COPPE), Universidade Federal do Rio de Janeiro (UFRJ), Rio de Janeiro, RJ, Brasil. E-mail: rbarbosa@peq.coppe.ufrj.br.

A busca por soluções inovadoras para a transição energética tem impulsionado o desenvolvimento de combustíveis com baixas emissões de carbono. Nesse contexto, a conversão catalítica do etanol em produtos C4+, de maior valor agregado, surge como uma alternativa promissora. Este trabalho investiga a influência de cobre como promotor da hidroxiapatita (HAP) aplicada à conversão catalítica do etanol em produtos oxigenados e hidrocarbonetos na faixa de gasolina e diesel. Catalisadores à base de HAP $[Ca_{10}(PO_4)_6(OH)_2]$ promovido por Cu em baixo teor (0,5%), foram sintetizados e caracterizados por diversas técnicas, incluindo DRX, ICP e fisissorção de N_2 . Os testes catalíticos foram conduzidos em unidade de avaliação reacional de leito fixo em escala de bancada (100 mg), operando em temperaturas de 350 °C e pressão atmosférica. A conversão do etanol e a distribuição dos produtos foram analisadas por cromatografia gasosa (GC). A HAP pode ser considerada um catalisador de referência (benchmark) para a reação de acoplamento de etanol, apresentando alta seletividade, mas com conversão limitada e rápida desativação. Suas propriedades anfotéricas (ácido-básicas), são particularmente interessantes, sendo frequentemente empregada em formulações não estequiométricas, o que permite a modulação de suas características pela variação da (razão Ca/PO_4^{3-}): valores mais baixos aumentam a acidez, enquanto valores mais altos favorecem a basicidade. O equilíbrio entre a densidade e a força dos sítios ácidos e básicos é um fator crítico nesse processo. Além disso, a HAP pode sofrer troca catiônica parcial com metais de transição, o que pode melhorar sua atividade catalítica e estabilidade pela adição de sítios metálicos. Os resultados iniciais indicam que a adição de cobre à hidroxiapatita proporcionou um aumento significativo na conversão, de 20% para 65%, nas mesmas condições reacionais. Além disso, a presença de sítios metálicos de cobre modificou a seletividade do sistema, favorecendo não apenas o acoplamento do etanol a butanol via rota de Guerbet, mas também a formação de compostos olefínicos como butenos e butadieno, além de outros compostos oxigenados (C4+). Esses achados destacam o potencial da modificação da composição catalítica para otimizar a rota de conversão do etanol, consolidando-se como uma estratégia promissora para a produção de biocombustíveis sustentáveis. Os resultados obtidos indicam que a densidade de sítios ácidos, básicos e metálicos impacta diretamente a conversão e a seletividade do sistema.





Niterói, RJ. 10 e 11 de abril de 2025

EFEITO DA HIERARQUIZAÇÃO DA ZEÓLITA BETA NA SÍNTESE DO LEVULINATO DE ISOPROPILA VIA REAÇÃO DOMINÓ

Beatriz Teixeira Silva¹, Marcelo A. do Nascimento¹, Maria H. F. Fógos¹, Pâmella Cordeiro¹, Gabriela S. Gomes¹, Vinicius G. C. Madriaga¹, Vinicius Rossa¹, Fabio B. Passos², Thiago M. Lima¹

¹Departamento de Química Inorgânica - Instituto de Química, Universidade Federal Fluminense, Niterói, RJ, Brasil.

² Laboratório de Reatores, Cinética e Catálise, Departamento de Engenharia Química e Engenharia do Petróleo, Universidade Federal Fluminense, Campus Praia Vermelha, Niterói, Rio de Janeiro.

* beatrizts@id.uff.br

O presente estudo teve como objetivo investigar a síntese e caracterização de zeólitas hierárquicas do tipo beta com diferentes razões Si/Al, visando sua aplicação na conversão de compostos derivados da biomassa lignocelulósica, especialmente o furfural (FUR), em produtos de alto valor agregado. As zeólitas modificadas foram produzidas por meio do tratamento básico (hidróxido de sódio – 25-NaOH e 35-NaOH e hidróxido de amônio – 25-NH₄ e 35-NH₄) visando a desilicalização e ácido (ácido oxálico – 25-OXA e 35-OXA e ácido nítrico – 25-HNO₃ e 35-HNO₃) visando a desaluminação. A caracterização foi realizada por difração de raios X (DRX), dessorção de amônia sob temperatura programada (TPD-NH₃) e avaliação textural pela fisissorção de N₂, confirmando a formação de mesoporos e sistema hierárquico e influência na acidez conforme o método empregado. Os produtos foram analisados por cromatografia gasosa acoplada a espectrometria de massas (GC-MS). As avaliações catalíticas foram conduzidas aplicando os catalisadores na reação dominó entre FUR e isopropanol. Os ensaios foram inicialmente realizados a 130°C por 24h, com 50 mg de catalisador previamente calcinado a 550 °C. Os resultados demonstraram que o tratamento da zeólita com razão Si/Al 25 com ácido nítrico (25-HNO₃) promoveu um aumento significativo de aproximadamente 15% na conversão, enquanto os valores de seletividade para levulinato de isopropila (PL) permaneceram semelhantes aos observados para a zeólita não tratada (51%). Além disso, foi observada a formação de aproximadamente 4% de lactonas e produtos de condensação aldólica, que são precursores de combustíveis sustentáveis de aviação. Para o tratamento com hidróxido de sódio, foram observados valores de conversão de 42% e 92% para 25-NaOH e 35-NaOH, respectivamente, sugerindo que a conversão está diretamente relacionada à razão Si/Al, sendo favorecida em valores mais elevados. Em contraste, as zeólitas tratadas com hidróxido de amônio e ácido oxálico apresentaram maior conversão e seletividade para levulinato de isopropila (PL) em razões Si/Al mais baixas, alcançando conversões de 89% e 48%, respectivamente, e uma seletividade de 71% na presença de 25-OXA.. Esse desempenho pode estar associado à presença de mesoporos, os quais favorecem a difusão dos reagentes até os sítios ativos, além do controle da força ácida dos materiais. Dentre os desafios enfrentados, destacam-se a necessidade de otimização das condições reacionais para preservar a estrutura das zeólitas e a ampliação dos estudos com diferentes tipos de catalisadores. Os próximos passos incluem a avaliação da estabilidade dos materiais, testes de reuso e ampliação da escala das reações. Os resultados obtidos até o momento demonstram o potencial das zeólitas hierárquicas como catalisadores promissores na valorização de biomassa lignocelulósica.





Niterói, RJ. 10 e 11 de abril de 2025

CATALISADORES DE Ni E Ni/Re SUPORTADOS EM HZSM-5 NA DESOXIGENAÇÃO DO ÁCIDO OLEICO

Camilla R. de O. Fontoura¹; Cristiane A. Henriques^{1,2}; Fabio S. Toniolo^{1*}

¹Programa de Engenharia Química/COPPE/UFRJ, Universidade Federal do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, 21941-972

²Instituto de Química/UERJ, Universidade do Estado do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, 20550-900

*toniolo@peq.coppe.ufrj.br

Este trabalho visa sintetizar, caracterizar e avaliar catalisadores de Ni promovidos com Re suportados em HZSM-5 (SAR = 25) na desoxigenação do ácido oleico. A introdução de Re, um metal oxofílico, visa favorecer a clivagem de ligações C-O em detrimento da clivagem de ligações C-C. Os catalisadores foram preparados por impregnação com excesso de solvente, contendo 6% de Ni e 2% de Re. Para proteger a fase metálica, utilizou-se sacarose como precursor de encapsulamento com carbono, seguida de calcinação sob fluxo de N₂. Os ensaios catalíticos ocorreram em um reator de aço inoxidável com 200 mg de catalisador (WHSV = 25 h⁻¹), empregando uma solução de 20% de ácido oleico em ciclo-hexano, com razão H₂/carga reacional de 200 (v/v). As reações foram conduzidas a 280°C e 30 bar por 24 h, e os produtos analisados em cromatógrafo a gás Shimadzu com detector FID. As micrografias revelaram regiões de distribuição não uniforme das partículas metálicas, com tamanhos variando de 2,4 a 26,5 nm para Ni@C/HZSM-5 (d_{médio} = 5,90 ± 3,56 nm) e de 3,2 a 20,4 nm para NiRe@C/HZSM-5 (d_{médio} = 7,07 ± 3,24 nm). A presença de carbono amorfo envolvendo as partículas metálicas foi confirmada e a acidez dos catalisadores reduziu-se significativamente em relação à zeólita parental, cuja acidez correspondia a 1903 mmol/g (acidez de 896 mmol/g para Ni@C/HZSM-5 e 510 mmol/g para NiRe@C/HZSM-5), possivelmente devido à oclusão de microporos por carbono, como indicado pela diminuição do volume de poros e da área específica. Nos testes catalíticos, o Ni@C/HZSM-5 apresentou conversão inicial de 99%, reduzindo para 54% após 24 h. O NiRe@C/HZSM-5 iniciou com 59%, caindo para 33% no mesmo período. Ambos favoreceram mecanismos de DCO_x, seletivos a C₁₇ em detrimento de C₁₈, mas o principal produto foi o ácido esteárico (58% e 77%, respectivamente), sugerindo um ambiente favorável à hidrogenação. Para promover maior tempo de contato e conversão do ácido esteárico, testes com WHSV = 5 h⁻¹ possibilitaram que o Ni@C/HZSM-5 mantivesse conversão de 99% por 24 h, gerando C₁₇ (45%), C₁₈ (22%) e ácido esteárico (17%) como principais produtos, sem formação de compostos de craqueamento. O método de síntese está sendo aprimorado para minimizar a aglomeração das partículas metálicas e a oclusão de poros do suporte, o que inclui a impregnação sequencial do Re, bem como a redução do seu teor para 1%. Adicionalmente, a otimização das condições reacionais será conduzida, incluindo aumento do tempo de contato e da temperatura e diminuição da pressão parcial de hidrogênio, a fim de maximizar a eficiência da desoxigenação frente à hidrogenação.





Niterói, RJ. 10 e 11 de abril de 2025

Ni-Al₂O₃ suportado em monólito metálico impresso em 3D com estrutura TPMS aplicada na reforma a seca e a vapor de metano

Débora Morais Bezerra¹; Arthur Alvarez Mascheroni²; Pedro Henrique Batista Mendes¹; José Maria Mascheroni²; Fabio Souza Toniolo^{1*}

^{1*} Programa de Engenharia Química, COPPE, Universidade Federal do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, CEP 21941-972, Brazil.

² Alkimat. Tecnologia Ltda., Rua Abelardo Manoel Peixer, 142 - Barreiros, São José, Santa Catarina - 88110-055, Brazil.

Este estudo investiga o uso de monólitos produzidos por manufatura aditiva como suportes nos processos de reforma a vapor e reforma seca do metano (CH₄), propondo uma abordagem inovadora para a personalização das propriedades catalíticas, visando maior eficiência e sustentabilidade. Para a fabricação dos monólitos de Inconel, empregou-se a técnica de impressão 3D por fusão seletiva a laser, resultando em estruturas do tipo superfície mínima tripla periódica (TPMS). Essa estrutura porosa complexa com periodicidade contínua oferece grande área específica e alta conectividade entre os canais. Esses monólitos foram utilizados como suporte para catalisadores de Ni/Al₂O₃ (15% em massa de Ni), preparados por três variações do método washcoating, originando os catalisadores Ni/Al₂O₃ -W₁/MM, Ni/Al₂O₃ - W₂/MM e Ni/Al₂O₃ -W₃/MM. As amostras foram caracterizadas por testes de aderência, difração de raios X (DRX), microscopia eletrônica de varredura, fisissorção de N₂, redução a temperatura programada (TPR), espectroscopia Raman e microtomografia computadorizada (micro-CT). Os testes de aderência e as imagens de microscopia confirmaram a deposição uniforme e completa do Ni/Al₂O₃ sobre a superfície dos monólitos. Nos ensaios de reforma seca realizados a 700–800 °C por 45 horas, os catalisadores Ni/Al₂O₃ -W₁/MM, Ni/Al₂O₃ -W₂/MM e Ni/Al₂O₃ -W₃/MM apresentaram conversões de CH₄ entre 40% e 80% e uma razão H₂/CO entre 0,8 e 0,9, valores comparáveis aos obtidos com um catalisador cerâmico de cordierita em estrutura colmeia com mesmo teor de Ni (catalisador de referência). No entanto, os monólitos metálicos demonstraram maior estabilidade e resistência mecânica, enquanto o catalisador cerâmico sofreu intensa formação de carbono e colapso estrutural. Na reforma a vapor, os catalisadores metálicos exibiram excelente desempenho, com conversões de CH₄ entre 70% e 80%, razão H₂/CO entre 2,5 e 3 e baixa seletividade para CO₂. Em comparação, o catalisador de referência em pó, Ni/Al₂O₃, obteve 60% de conversão de CH₄ e uma razão H₂/CO inferior a 1. O desempenho superior dos monólitos pode ser atribuído à melhora na transferência de calor e pela geometria dos canais, resultando em maior conversão de CH₄ e menor formação de coque.





Niterói, RJ. 10 e 11 de abril de 2025

CONDENSAÇÃO ALDÓLICA DO FURFURAL E ACETONA CATALISADA POR ZEÓLITAS HIERÁRQUICAS

Maria H. F. Fógos¹, Marcelo A. do Nascimento¹, Pâmella Cordeiro¹, Gabriela S. Gomes¹, Beatriz Teixeira Silva¹, Vinicius G. C. Madriaga¹, Vinicius Rossa¹, Fabio B. Passos², Thiago M. Lima¹

¹Grupo de Catálise e Valorização de Biomassa -GCVB-UFF -Instituto de Química, Universidade Federal Fluminense, Niterói, RJ, Brasil.

²Laboratório de Reatores, Cinética e Catálise, Departamento de Engenharia Química e Engenharia do Petróleo, Universidade Federal Fluminense, Campus Praia Vermelha, Niterói, Rio de Janeiro.

*mariafogos@id.uff.br

A conversão da biomassa lignocelulósica em produtos de alto valor agregado representa uma alternativa sustentável para reduzir a dependência de fontes não renováveis. Neste estudo, o objetivo foi investigar o desempenho catalítico de zeólitas hierárquicas em duas reações estratégicas envolvendo furfural (FUR) como material de partida. A primeira foi a reação de condensação aldólica, que é essencial para o aumento da cadeia carbônica (visando posterior aplicação para biocombustíveis de aviação sustentáveis). A segunda reação é a dominó, que converte o FUR em levulinatos de alquila, usados como solventes verdes e aditivos para combustíveis. As zeólitas comerciais estudadas foram a mordenita (HMOR, HMOR-T), faujasita (NaY, HY, HY-T) e ZSM-5 (HZSM-5, HZSM-5-T), onde a letra “T” simboliza as zeólitas modificadas. Para gerar porosidade secundária, 7,5 g da zeólita foi adicionado a uma solução aquosa de NH_4F (25%) e submetido a ultrassom por 1 h a 25 °C. Em seguida, o material foi filtrado, lavado e seco a 70 °C durante a noite. Para a troca catiônica, os catalisadores tratados foram agitados em solução de NH_4Cl 0,1 mol/L por 3 h a 80 °C. Após filtração, o material foi lavado até a completa remoção de íon Cl^- e, posteriormente, calcinados. A caracterização foi realizada por DRX, FTIR, fisissorção de N_2 e infravermelho com adsorção de piridina (pir-FTIR) para avaliação da acidez. Os testes catalíticos foram inicialmente conduzidos a 100 °C por 24 h e analisados por cromatografia gasosa acoplada a detector de espectrometria de massas (GC-MS) e cromatografia líquida de alta eficiência (CLAE). Os resultados indicam que a zeólita HY-T apresentou alta eficiência catalítica, com 52% de conversão e 80% de seletividade para levulinato de isopropila (PL). Esse desempenho pode estar relacionado ao aumento da área superficial específica ($\text{SBET} = 858 \text{ m}^2/\text{g}$) e do volume de mesoporos ($V_m = 0,124 \text{ cm}^3/\text{g}$) em comparação à forma não tratada (HY) ($\text{SBET} = 524 \text{ m}^2/\text{g}$, $V_m = 0,055 \text{ cm}^3/\text{g}$). Na condensação aldólica, HY-T atingiu 61% de conversão e 99% de seletividade para 4-(2-Furil)-3-buten-2-ona (FAC), superando os catalisadores não modificados. A criação de mesoporos melhorou a difusão dos reagentes e a acessibilidade aos sítios ácidos, aumentando a eficiência catalítica. Após três ciclos de reuso, a conversão caiu 17%, possivelmente devido a presença de resíduos orgânicos, conforme indicado por TGA e infravermelho. O planejamento experimental (CCRD) mostrou que o volume de acetona e a temperatura são fatores críticos na conversão de furfural. O catalisador HY-T manteve alta conversão e seletividade após três ciclos, demonstrando sua viabilidade.





Niterói, RJ. 10 e 11 de abril de 2025

Conversão *one-pot* de furfural a levulinato de isopropila sobre zeólita beta recristalizada e substituída com zircônio

Mateus Gonçalves dos Santos^{1,2} Ernesto A. Urquieta-Gonzalez^{1,2}

¹Programa de Pós-Graduação em Engenharia Química (PPGEQ), Universidade Federal de São Carlos (UFSCar)

²Centro de Pesquisas em Materiais Avançados e Energia, Departamento de Engenharia Química, UFSCar, Rodovia Washington Luís, Km 235, CEP 13565-905, São Carlos, SP, Brasil.

mateus47@estudante.ufscar.br

A biomassa de resíduos lignocelulósicos é considerada uma promissora fonte renovável e sustentável de carbono, com potencial para atender às necessidades de energia no mundo. A produção de biocombustíveis ou aditivos, como a gama valerolactona (GVL), o levulinato de isopropila (LI) e α -angélica lactona (α -AgL) oriundos de moléculas plataforma de origem vegetal, como o furfural (FUR), contribui para o equilíbrio na emissão e captura de carbono na atmosfera. No entanto, a conversão do FUR em combustíveis ou outras moléculas plataforma de interesse via catálise heterogênea, utilizando H-zeólitas comerciais apresenta alguns obstáculos, como a formação de compostos indesejados, baixo rendimento e elevado tempo de reação devido à microporosidade e baixa acidez de Lewis, intrínsecos destes materiais. A realização de procedimentos pós-síntese nas zeólitas comerciais pode contornar estas barreiras. Neste trabalho, partindo da zeólita beta (Si/Al=11), o objetivo foi gerar porosidade hierárquica por recristalização utilizando CTAB e produzir sítios ácidos de Lewis por substituição isomórfica de Zr (2, 5 e 10%/m), seguindo o método de metalização no estado sólido. Os zeótipos produzidos foram caracterizados por diferentes técnicas e aplicados na conversão *one-pot* do FUR. A difratometria de raios X mostrou que a formação dos mesoporos após recristalização, apesar de preservar a estrutura cristalina da zeólita beta, reduziu ligeiramente a cristalinidade do material. Os difratogramas raios X revelaram, também, o surgimento de picos de baixa intensidade, em torno de 30°, atribuídos à formação do óxido de zircônio (ZrO₂). A análise de área superficial apresentou isotermas com características dos tipos I e IV, atribuídas à materiais micro e mesoporosos, com distribuição do tamanho de poros em torno de 4 nm (mesoporos). A concentração dos sítios ácidos determinada por FTIR de piridina adsorvida *in situ*, revelou um aumento na acidez de Lewis nas amostras contendo Zr, enquanto que as concentrações dos sítios ácidos de Brønsted reduziram. A termodessorção da piridina a 350°C mostrou maior presença de sítios ácidos fortes, quando comparado ao material precursor. Os testes catalíticos em reator *one-pot* mostraram resultados promissores para a obtenção de LI utilizando os zeótipos contendo Zr. A zeólita beta não modificada e o zeótipo com 2% de Zr apresentaram conversão do furfural de 13 e 65% após 1 hora de reação, respetivamente. A produtividade para o LI foi de 0,45 para 0,82 mmol.g⁻¹.h⁻¹, enquanto que para a α -AgL aumentou de 0,33 para 0,54 mmol.g⁻¹.h⁻¹. Dessa forma, os resultados evidenciaram que as modificações pós-síntese na zeólita Hbeta melhoraram o rendimento ao LI, o qual apresenta maior valor agregado e aplicações de interesse.





Niterói, RJ. 10 e 11 de abril de 2025

CATALISADORES A BASE DE CARVÃO ATIVADO A PARTIR DE BIOMASSA PARA REAÇÃO DE ODH DO PROPANO

Mariana Soares S. Alonso^{1,2}, Priscila S. da Silva¹, Victor D. Santos², Karen G. Rachele¹, Rodrigo B. Nogueira¹, Alexandre B. Gaspar¹, Fabiana T. Mendes¹, Lídia Oazem O. da Costa¹ e Paulo Gustavo P. de Oliveira¹

¹Instituto Nacional de Tecnologia, ²Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia do Rio de Janeiro. lidia.oazem@int.gov.br*

A reação de desidrogenação oxidativa do propano (ODH) é uma alternativa ao craqueamento da nafta para a produção de propeno, um intermediário essencial na síntese do polipropileno. Neste trabalho, a intenção é utilizar o carvão ativado, como suporte para catalisadores na reação de ODH. Foram preparadas duas famílias de catalisadores: a primeira compreende catalisadores à base de vanádio e magnésio suportados em carvão ativado comercial fornecido pela CABOT/NORIT (CA); a segunda, catalisador a base de grafeno incorporado ao carvão ativado sintetizado a partir da casca do guaraná (CAG). Os materiais foram caracterizados por MEV/EDS, DRX e Análise Textural, adsorção-dessorção de N₂. O catalisador à base de vanádio e magnésio suportado em CA denominado, VMgO/CA, foi avaliado na reação ODH do propano. Para a síntese do CAG, a casca do guaraná foi macerada, peneirada, seca e impregnada com H₃PO₄ (85% p/p) em razão mássica ácido/casca 3:1. Após a secagem, foi tratado termicamente a 500 °C por 2 horas, sob fluxo de N₂ (60 mL/min), lavado com água destilada a 60 °C até pH próximo de 5,0, seco e peneirado. O CAG foi submetido a um novo tratamento térmico a 900 °C com fluxo de gás inerte, para a obtenção do catalisador CAG-grafeno. No caso do suporte comercial, o catalisador VMgO/CA foi preparado para comparação com o catalisador CAG-grafeno. Foram depositados V e Mg em uma razão molar Mg/V=1 a partir de 8% de V em peso. Soluções de NH₄VO₃ e Mg(CH₃COO)₂ foram preparadas, misturadas e agitadas por 24 h. O carvão ativado foi adicionado à solução resultante, tratado no rotavapor sob vácuo e seco em estufa. O material foi calcinado a 250 °C por 12 h, em fluxo de ar (30 mL/min), e armazenado. O catalisador VMgO/CAC foi avaliado na reação de ODH do propano, com cromatografia gasosa acoplada para a análise dos produtos. Os carvões ativados obtidos apresentaram alta área superficial e ampla faixa de distribuição de poros (micro e mesoporos), mostrando-se uma boa alternativa para serem usados em catálise como suportes sustentáveis. Através da reação de ODH, observou-se para o CABOT/NORIT uma conversão média de 6% e seletividade em propeno de 12%. Entretanto, espera-se um aumento da seletividade em propeno com aprimoramento do catalisador contendo grafeno. Novos estudos estão sendo conduzidos.





Niterói, RJ. 10 e 11 de abril de 2025

CATALISADORES DE Zr e Nb NA PRODUÇÃO DE BIOCOMBUSTÍVEIS A PARTIR DE COMPOSTOS ORIUNDOS DA BIOMASSA LIGNOCELULÓSICA

Eric T.T. Shimabukuro^{1*}, Daniel G.S. Quattrociochi², Marcelo A. Nascimento¹, Roberto O. Fernandes¹, Ruan S. A. Ribeiro¹, Sancler C. Vasconcelos¹, Vinicius G. Madriaga¹, Vinicius Rossa¹, Fabio B. Passos,³Thiago M. Lima¹.

¹Departamento de Química Inorgânica, Universidade Federal Fluminense,, Niterói, Rio de Janeiro, Brasil;

²Departamento de Química Inorgânica, Universidade federal de Roraima, Boa Vista, Roraima, Brasil;

³Escola de Engenharia, Universidade Federal Fluminense, Niterói, Rio de Janeiro, Brasil.

*ericthomas@id.uff.br

A biomassa lignocelulósica, material renovável mais abundante do planeta, tem potencial para síntese dos mesmos e outros produtos obtidos a partir do petróleo, consolidando um cenário promissor para o desenvolvimento de novas tecnologias no mercado de bioenergia, moléculas plataforma e química fina. Nesse contexto, torna-se necessária a busca por processos catalíticos mais econômicos, ambientalmente amigáveis e que também apresentam melhor conversão e seletividade. Desse modo, a síntese e caracterização de catalisadores altamente dispersos ou atômicos (SACs) dão um passo adiante na ciência dos nanomateriais, com a proposta de formação de sítios ativos em átomos isolados. Vale notar, portanto, que esses catalisadores se comportam simultaneamente como homogêneos e heterogêneos, combinando suas vantagens características e potencializando a eficiência dos processos de conversão catalíticos convencionais, em especial para conversão de compostos oriundos da biomassa lignocelulósica, como a dihidróxiacetona em ácido láctico e seus ésteres, que são muito visados industrialmente como blocos construtores, solventes verdes e na produção do PLA, filamento em impressão 3D. Desse modo, o suporte catalítico (g-C₃N₄) foi obtido por polimerização térmica da ureia, seguida da impregnação com metais de zircônio ou nióbio (acidez de Lewis) via química úmida. Em primeira instância, o catalisador foi avaliado com respeito a manutenção da sua estrutura química e ausência dos traços de formação de óxidos metálicos (DRX, FTIR, MET), seguida da avaliação de atividade catalítica na reação de conversão da DHA em lactato de etila, utilizando o etanol como solvente e reagente por transferência catalítica de hidrogênio. Em suma, o material apresentou indícios de boa dispersão metálica e foram altamente ativos na conversão da triose de estudo (97,19%) em produtos de maior valor agregado (29,53% hemiacetal, 22,6 acetal 22,28% lactato de etila).





Niterói, RJ. 10 e 11 de abril de 2025

CARVÃO DE LODO DE ESGOTO COMO CATALISADOR PARA REAÇÃO DE CONDENSAÇÃO ALDÓLICA DO FURFURAL

Phellipe L.A. Corrêa ^{1*}, Ruan Sardinha ¹, Aynã Felix ¹, Paula R.R. De Oliveira ¹, Vinicius G.C. Madriaga ¹, Roberto O. Fernandes ¹, André V.H. Soares ², Fabio B. Passos², Thiago M. Lima ¹

1 Grupo de Catálise e Valorização da Biomassa, Departamento de Química Inorgânica, Universidade Federal Fluminense, Campus do Valonguinho, Niterói, Rio de Janeiro.

2 Laboratório de Reatores, Cinética e Catálise, Departamento de Engenharia Química e Engenharia do Petróleo, Universidade Federal Fluminense, Campus Praia Vermelha, Niterói, Rio de Janeiro.

*phlucas@id.uff.br

Na busca por fontes de energia alternativas, a biomassa lignocelulósica tem se destacado na produção de biocombustíveis e produtos de valor industrial agregado. A partir do pré-tratamento da biomassa é possível obter moléculas plataforma, como a molécula de furfural (FUR), que possuem grande relevância industrial. A reação de condensação entre o FUR e cetonas rende produtos oxigenados contendo de 8 a 16 carbonos, que são ideais para aditivos de combustíveis como diesel e precursores de bioquerosene de aviação. A conversão do furfural ao trans-2-furanil 3-buten-2-ona (FAC) é catalisada por sítios básicos ou ácidos de Brønsted. Nesse contexto, carvões de lodo de esgoto são potenciais catalisadores para a reação, uma vez que o lodo de esgoto pode conter os sítios desejados. Assim, o objetivo deste trabalho é utilizar carvão de lodo de esgoto como catalisador na reação de condensação do FUR com acetona. O lodo foi adquirido em uma estação de tratamento de esgoto de Arraial do Cabo (PROLAGOS) e foi pirolisado a 450°C em atmosfera inerte, e foi caracterizado por diferentes técnicas. Os resultados da Espectroscopia por Fluorescência de raios X apontam para a presença de materiais inorgânicos como Cálcio, Ferro, Enxofre, Silício, dentre outros componentes em baixa percentagem. Em conjunto, a análise por Difração de raios X indicou a presença dos seguintes componentes: carbonato de cálcio, óxido de cálcio, silicato de cálcio, óxido de silício, sulfato de cálcio e hidróxido de ferro. A reação foi realizada por 24 horas a 115°C, utilizando-se 166 µL de FUR, 100 mg do carvão de lodo de esgoto (catalisador) e 1,5 mL de acetona. Em condições ainda não otimizadas, a reação resultou em uma conversão de 8,7% do FUR, com total seletividade para FAC. Analisando o resultado obtido é possível concluir que o carvão de lodo de esgoto é um potencial catalisador para a reação de condensação aldólica, visto que, é possível maximizar a conversão com um ajuste de parâmetros.





Niterói, RJ. 10 e 11 de abril de 2025

SÍNTESE E APLICAÇÃO DE CATALISADORES DE $Mg_xAlO_y-SiO_2$ DOPADOS COM Re OU Ru PARA A CONVERSÃO DE ETANOL EM 1,3-BUTADIENO

Maynara L.A. Santos¹; Henrique P. Pacheco¹; Fabio S. Toniolo^{1*}

¹Programa de Engenharia Química/COPPE/UFRJ, Universidade Federal do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, 21941-972

*toniolo@peq.coppe.ufrj.br

O etanol como plataforma química é capaz de gerar uma ampla gama de produtos economicamente e industrialmente valiosos, entre eles o 1,3-butadieno (BD). A síntese de BD a partir do etanol é altamente complexa, com diversas reações paralelas competindo entre si, de modo que a escolha do catalisador é crítica, pois determina a atividade da reação e a distribuição dos produtos. Desta forma, o principal objetivo deste trabalho é a síntese, caracterização e aplicação na reação de *upgrade* de etanol de catalisadores $Mg_xAlO_y-SiO_2$ incorporado com metais promotores, Re e Ru. Para isso, catalisadores foram preparados por coprecipitação e os metais foram incorporados por impregnação incipiente em fração mássica de 0.1 %. Algumas das técnicas de caracterização utilizadas incluem: DRX para detectar as fases presentes; fisissorção de N_2 para avaliar as propriedades texturais; DRX *operando* com radiação síncrotron para identificar potenciais mudanças estruturais durante a reação; entre outras. Os testes catalíticos foram realizados em um reator “U” de quartzo contendo 100 mg de catalisador. O fluxo de alimentação consistia em Ar saturado com 5 % de etanol, fluindo a uma taxa de $25 \text{ cm}^3 \cdot \text{min}^{-1}$ ($GHSV = 0,25 \text{ cm}^3 \cdot \text{mg}^{-1} \cdot \text{min}^{-1}$). Os ensaios foram realizados a 673 K e 1 bar. A saída do reator foi conectada a um cromatógrafo a gás Shimadzu GC-2014 equipado com duas colunas, uma alimentando um detector FID e a outra um TCD. Antes da reação, o catalisador foi submetido a um tratamento de redução sob fluxo de H_2 a 773 K ($10 \text{ K} \cdot \text{min}^{-1}$) por 60 min, conforme os resultados de TPR. Os resultados de DRX *operando* do catalisador não impregnado (Mg:Al:Si 3:1:1) confirmaram a formação da fase cristalina MgO , típica de derivados de hidrotalcita, e evidenciaram a estabilidade estrutural durante a reação, com intensidade e posição dos picos invariáveis. A espectroscopia de DRS UV-Vis, para os catalisadores impregnados, revelou a transição dos estados de oxidação dos metais, com formação de Ru^0 metálico e Re^{7+} após redução. A avaliação catalítica dos materiais incorporados com Ru e Re revelou uma extensa distribuição de produtos, o que está em conformidade com a alta reatividade do etanol sob as condições empregadas, sendo os principais etileno, acetaldeído, BD (juntamente com butenos), dietil éter e 1-butanol. Ambos os materiais apresentaram alta seletividade para o acetaldeído (superando 40%), demonstrando que Ru e Re atuam como eficientes metais promotores de desidrogenação. O catalisador impregnado com Re apresentou menor seletividade para os produtos de desidratação do etanol, como etileno e dietil éter, devido à menor densidade de sites ácidos em comparação com o catalisador de Ru. Isso também reduziu a seletividade para o BD (que necessita de sítios ácidos para a etapa final de desidratação), com valores de 9 % para Re contra 15 % para Ru. Embora o catalisador com Re tenha mostrado maior conversão inicial de etanol (mais de 45 % contra 30 % do Ru), sua desativação foi mais atenuada, com uma queda de 15 % após 70 h de reação, em comparação com a perda de apenas 7 % para catalisador com Ru.





Niterói, RJ. 10 e 11 de abril de 2025

CONVERSÃO DE ÁLCOOL FURFURÍLICO A PENTANODIOIS SOBRE Cu/Al₂O₃, Cu/MgAl₂O₄ e Cu/MgO

Cleuber F. P. Mendes^{1,2}, Elise M. Albuquerque²; Marco A. Fraga^{1,2,3}

marco.fraga@int.gov.br

¹Instituto Militar de Engenharia, IME – Praça Gen. Tibúrcio, 80, Urca, Rio de Janeiro/RJ, Brasil. ²Instituto Nacional de Tecnologia, INT – Av. Venezuela, 82, Saúde, Rio de Janeiro/RJ, Brasil., ³DEQM/PUC – Rio – Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro – PUC – PUC RJ, R. Marques de São Vicente, Gávea, Rio de Janeiro/RJ, Brasil.

A busca por produção de energia a partir de fontes renováveis ainda é um desafio na sociedade e possui grande importância na busca de um futuro sustentável. O uso de catalisadores de cobre suportados na conversão de álcool furfurílico (FFA) em compostos com alta demanda industrial como os pentanodios (PeD) tem chamado atenção no contexto de melhor aproveitamento da biomassa e seus derivados. Nesse contexto, foram sintetizados catalisadores de Cu suportados em Al₂O₃, MgAl₂O₄ e MgO para avaliar o efeito da cooperação entre o suporte e o Cu na atividade catalítica e na seletividade a pentanodios. As condições reacionais estabelecidas no desenvolvimento do trabalho foram: 500 mg FFA em 25 mL de etanol, massa de catalisador = 300 mg, P(H₂) = 40 bar, T = 140 °C e 8 h, com pré tratamento em fluxo de H₂ a 350 °C por 2h para os 3 catalisadores. Os catalisadores foram preparados e caracterizados por FRX, TPR, TPD-CO₂, DRX e TEM/HRTEM e avaliados na obtenção de 1,2-PeD e 1,5-PeD a partir do FFA. Os resultados de FRX indicaram um teor de cobre de aproximadamente 8,5% para Cu/Al₂O₃ e Cu/MgAl₂O₄ e 11% para Cu/MgO. A análise de TPR apontou a existência de duas espécies de cobre (Cu²⁺, Cu⁺) que são reduzidas a cobre metálico (Cu⁰) na faixa entre 200 – 260 °C. A dispersão de Cu nos catalisadores, determinadas por titulação de N₂O, são de 3% para Cu/Al₂O₃ e Cu/MgO e 4% para Cu/MgAl₂O₄, com diâmetros médios de 29, 36 e 24 nm, respectivamente. Os resultados do desempenho dos catalisadores apontam uma conversão variando entre 21 e 32%. Observa-se que para o Cu/Al₂O₃ a seletividade aos PeDs (1,2-PeD e 1,5-PeD) foi de 58% enquanto para Cu/MgAl₂O₄ e Cu/MgO foi de 74% e 80% no somatório, respectivamente. Também foi observado a formação de 2-metilfurano (2-MF), com maior seletividade para o Cu/Al₂O₃ (38%) e menores seletividades para Cu/MgAl₂O₄ (15%) e Cu/MgO (6%). Também vale ressaltar a formação de 1-pentanol com seletividades de 3% para Cu/Al₂O₃, de 11% para Cu/MgAl₂O₄ e de 13% para Cu/MgO. Os resultados apontam que a basicidade do suporte tem papel importante na distribuição dos produtos, sendo que o catalisador com propriedades básicas se mostrou mais seletivo para 1,5-PeD como evidenciado pela razão 1,2/1,5-PeD de 3,8 para o Cu/Al₂O₃, de 2,5 sobre o Cu/MgAl₂O₄ e 2,1 para Cu/MgO. A diminuição na seletividade a 2-MF é evidente, sendo também atribuída às diferenças nas propriedades básicas dos catalisadores. O THFA não apresentou diferença na seletividade enquanto o 1-pentanol teve um aumento significativo para o Cu/MgAl₂O₄ e Cu/MgO, o que já era esperado em catalisadores com propriedades básicas. É sugerido neste trabalho que a diferença na distribuição dos produtos é consequência do papel do sítio básico na adsorção da molécula do FFA determinando o mecanismo de reação.





Niterói, RJ. 10 e 11 de abril de 2025

Reactivation Mechanisms of Mo₂C Catalysts in HDO reactions: A DFT and Experimental Study

Eugenio F. Souza¹, Leticia Forer¹, Lucas R. Francisco², Raimundo C. R. Neto², Priscilla M. de Souza¹, Fabio S. Toniolo^{1*}, Fábio B. Noronha^{2*}

¹ Programa de Engenharia Química/COPPE/Universidade Federal do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, Brasil

² Instituto Nacional de Tecnologia, Rio de Janeiro, Brasil.

eugenio@peq.coppe.ufrj.br, *toniolo@peq.coppe.ufrj.br, *fabio.bellot@int.gov.br

Understanding the surface chemistry of transition-metal carbides is crucial for optimizing their catalytic performance. Here, we combine DFT calculations with experiments to investigate the reactivation process of molybdenum carbide (Mo₂C) in hydrodeoxygenation (HDO) conditions. Our theoretical approach, based on ab initio thermodynamics (AITD), provides insights into the thermodynamic stability of oxycarbide-like surfaces and their transformation under reduction. By analyzing surface free-energy changes, we predict the temperature-dependent removal of O species and correlate with catalytic activity. DFT adsorption studies further reveal that O coverage significantly affects the interaction of *m*-cresol with active sites, supporting experimental observations. Our results highlight the role of Mo-terminated surfaces in the catalytic cycle and provide a framework for future catalyst optimization. The calculations were performed using the Quantum-Espresso suite, plane-wave basis sets, pseudopotentials and van der Waals dispersion corrections. A supercell model was used to describe the oxycarbide-like surfaces of Mo₂C, and structural optimizations were carried out to evaluate their stability across a broad temperature range. The HDO of the *m*-cresol reaction was performed in a vapor-phase fixed-bed flow reactor system, operating at atmospheric pressure of H₂ and 300 °C. Experiments indicate that passivation of Mo₂C significantly hinders catalytic activity. DFT-based AITD modeled the formation free-energy of Mo- and C-terminated surfaces as a function of temperature. The theoretical results suggest that the C-terminated surface loses O readily, becoming largely O-free around 160°C. In contrast, the Mo-terminated surface retains oxygen at lower temperatures but gradually releases it with increasing reduction, correlating well with our experiments. A notable increase in catalytic performance was observed at 300°C, where DFT calculations predict significant oxygen loss (~40-50% of active sites freed). However, minimal additional improvement was noted at 400°C, aligning with calculations indicating a plateau in oxygen desorption. A marked enhancement in catalytic activity was achieved at 500°C, where the oxygen coverage dropped to ~0.125 monolayers, corresponding to an 85-90% exposure of active sites. Further DFT simulations of *m*-cresol adsorption revealed that oxygen inhibits adsorption, with weaker interactions observed for surfaces with high O coverage. These findings provide insights into catalyst reactivation, confirming that effective HDO conversion requires sufficient Mo site exposure. The study also highlights the importance of reactivation in optimizing catalytic performance underscoring the utility of first-principles modeling in guiding future catalyst design strategies. Besides, it offers predictive insights into the reactivation and performance of metal-carbide catalysts for bio-oil upgrading applications.





Niterói, RJ. 10 e 11 de abril de 2025

USO DE BIOCÁRVÕES DE LODO DE ESGOTO COMO CATALISADORES PARA CONVERSÃO DE FURFURAL EM ÁLCOOL FURFURÍLICO

Aynã Felix ^{2*}, Paula R. R. Oliveira ¹, Phellipe L. A. Corrêa ¹, Ruan Sardinha ¹, Roberto O. Fernandes ¹, Vinicius G.C. Madriaga ¹, André V. H. Soares ², Fábio B. Passos ², Thiago M. Lima ¹.

¹ Departamento de Química Inorgânica, Universidade Federal Fluminense, Niterói, Rio de Janeiro, Brasil.

² Escola de Engenharia, Universidade Federal Fluminense, Niterói, Rio de Janeiro, Brasil.

*e-mail: aynafelix@id.uff.br

A biomassa lignocelulósica é fundamental na indústria de química fina pois o seu fracionamento e conversão catalítica permitem a obtenção de diversos compostos de valor agregado. Dentre eles, o furfural – uma molécula plataforma obtida a partir da fração hemicelulósica - pode ser convertido em álcool furfurílico, importante para combustíveis, construção civil e obtenção de resinas. Uma alternativa interessante aos catalisadores tradicionalmente empregados nesse processo, que tipicamente são a base de metais nobres, é o biocárvão produzido pela pirólise de lodo de esgoto, visto que é um material de baixo custo e rico em metais com potenciais sítios catalíticos. Neste estudo, o lodo coletado na Estação de Tratamento Alegria, no Rio de Janeiro, foi pirolisado a 450°C, caracterizado por diferentes técnicas analíticas e usado como catalisador na conversão do furfural através da reação dominada usando isopropanol como solvente e doador de H a 130°C. A análise da fração inorgânica do carvão por espectroscopia de raios X por energia dispersiva (EDX) revelou a presença de ferro (50,3%), silício (13,3%), cálcio (9,8%) e potássio (5,1%). De forma complementar, a difração de raios X (DRX), possibilitou identificar a presença de compostos como CaCO₃, Fe₃O₄, Ca(AlSi₂O₆)₂·4H₂O, AlPO₄ e SiO₂. Na caracterização por espectroscopia no infravermelho (FTIR), foram observadas bandas em 1527 e 1590 cm⁻¹ relacionadas ao estiramento C=C (anéis aromáticos) e estiramento C=O (carbonilas e carboxilas), uma banda em aproximadamente 413 cm⁻¹ que sugere a presença de óxidos metálicos e minerais como Fe-O ou Si-O. As bandas entre 1000-1358 cm⁻¹ que indicam a presença de grupos funcionais oxigenados (ésteres, álcoois, fenóis) e deformações CH e NO₂ (nitratos), que podem contribuir para a reatividade do biocárvão. No decorrer dos testes catalíticos, foi alcançada uma conversão de 53,4%, com seletividade de 68,6% para o álcool furfurílico. Esses resultados demonstram que o biocárvão, além de possibilitar a redirecionamento de resíduos potencialmente prejudiciais ao meio ambiente, apresenta um desempenho eficiente na síntese de um produto de grande interesse industrial.





6º Encontro de
Catálise
Regional 2
RJ, MG e ES – 2025



SBCAT
SOCIEDADE BRASILEIRA DE CATÁLISE

Niterói, RJ. 10 e 11 de abril de 2025

CONVERSÃO DO FURFURAL À ALCOOL FURFURÍLICO VIA REAÇÕES DOMINÓ UTILIZANDO CARVÕES DE LODO DE ESGOTO

Ruan Sardinha,^{1*} Phellipe L.A. Corrêa,¹ Aynã Felix,¹ Paula R.R. De Oliveira,¹ Vinicius G.C. Madriaga,¹ Roberto O. Fernandes,¹ André V.H. Soares,² Fabio B. Passos,² Thiago M. Lima¹

1 Grupo de Catálise e Valorização da Biomassa, Departamento de Química Inorgânica, Universidade Federal Fluminense, Campus do Valonguinho, Niterói, Rio de Janeiro.

2 Laboratório de Reatores, Cinética e Catálise, Departamento de Engenharia Química e Engenharia do Petróleo, Universidade Federal Fluminense, Campus Praia Vermelha, Niterói, Rio de Janeiro.

*ruansardinha@id.uff.br

Mediante as transições energéticas globais, a biomassa lignocelulósica vem se tornando uma fonte promissora de biocombustíveis e moléculas de valor agregado nas indústrias. O Furfural (FUR), que é obtido através da hidrólise da hemicelulose, é uma importante molécula plataforma para produtos de valor agregado, como por exemplo o Álcool Furfurílico (FA). A conversão do FUR à FA ocorre via reação do tipo MPV catalisada por sítios ácidos de Lewis. Dessa forma, os carvões de lodo de esgoto demonstram um potencial como catalisadores para a reação, visto que o lodo de esgoto carrega diversos metais que podem funcionar como sítios ácidos. O objetivo deste trabalho foi a aplicação de um carvão de lodo de esgoto como catalisador para a reação de conversão do FUR à FA via reação do tipo MPV. O lodo foi recolhido na Estação de tratamento de Prolagos e pirolisado a 450°C em atmosfera inerte. Posteriormente, o carvão foi caracterizado por diferentes técnicas. Os resultados de Espectroscopia de Fluorescência de Raios X mostraram altas quantidades de ferro e cálcio na estrutura, junto a isso, a Difração de Raios X indicou a presença de Óxido de Cálcio (CaO) e de Ferro (Fe₂O₃). A reação de conversão do FUR à FA foi realizada utilizando 28 µL de FUR, 100 mg do carvão (catalisador) e 1,5 mL de Isopropanol como solvente. Os resultados da reação foram uma conversão do FUR de 66,8%, com uma seletividade de 86,1% para o FA, ainda em condições não otimizadas. Portanto, com base nos resultados, é possível afirmar que, como catalisador, o carvão proveniente do lodo de esgoto demonstra grande potencial na conversão de FUR a produtos de valor agregado como o FA, visto que o mesmo pode possuir diversos sítios catalíticos em sua estrutura.



Niterói, RJ. 10 e 11 de abril de 2025

CATALISADORES METÁLICOS SUPORTADOS APLICADOS À CONVERSÃO DE ÁCIDO LEVULÍNICO

Luiz Fernando Martins Bandeira^{1,2,*}; Marcio de Figueiredo Portilho¹; Fabio Souza Toniolo²; Cristiane Assumpção Henriques^{2,3}

¹Centro de Pesquisas, Desenvolvimento e Inovação Leopoldo Américo Miguez de Mello – CENPES/PETROBRAS.

²Universidade Federal do Rio de Janeiro, Programa de Engenharia Química – COPPE – UFRJ.

³Universidade do Estado do Rio de Janeiro, Instituto de Química – UERJ

* e-mail do autor correspondente: lbandeira@petrobras.com.br

O ácido levulínico (AL), que pode ser derivado da biomassa lignocelulósica, é uma molécula plataforma promissora para a produção de compostos valiosos, como a gama-valerolactona (GVL), 1,4-pentanodiol (1,4-PDO) e 2-metil-tetra-hidrofurano (2-MTHF). O objetivo do trabalho foi estudar a conversão de AL em um sistema batelada, usando 300 mg de catalisadores metálicos em temperatura de reação de 200 °C, pressão de hidrogênio de 70 bar, tempo de residência de 24 h e água ou 1,4-dioxano como solvente. Foram realizados testes com catalisadores metálicos de rutênio e/ou molibdênio suportados em zeólita H-Beta ou gama-alumina, com alteração de propriedades superficiais como acidez do suporte para favorecer a ocorrência das reações desejadas, bem como com catalisador de referência Ru/C. As análises por difração de raios-X, fisissorção de nitrogênio e redução a temperatura programada (TPR) com hidrogênio foram utilizadas para caracterização dos catalisadores. As fases líquidas foram analisadas por cromatografia em fase gasosa acoplada a espectrometria de massa (CG-EM) e ressonância magnética nuclear de prótons (RMN de ¹H). O melhor resultado para obtenção do 2-MTHF foi alcançado com o catalisador 5% Ru suportado em zeólita H-Beta, sendo a conversão do AL de 100% e seletividade a 2-MTHF de 28%, usando 1,4-dioxano como solvente. A zeólita H-Beta apresentou uma área específica BET de 618 m² . g⁻¹ e volume de microporos de 0,18 cm³ . g⁻¹. Para a zeólita H-Beta, a área BET foi de 177 m² . g⁻¹ e volume de mesoporos de 0,50 cm³ . g⁻¹. A zeólita H-Beta também potencialmente possui sítios mais ácidos do que a gama-alumina, importantes, juntamente com os sítios metálicos do Ru, para a conversão de AL. Para a obtenção de 2-MTHF, cuja formação requer a desidratação do 1,4-PDO, uma reação prejudicada em meio aquoso, verificou-se que a presença de rutênio na composição do catalisador é essencial por causa dos sítios metálicos necessários para a reação de hidrogenação do AL e produção do ácido 4-hidroxipentanóico. Além disso, a escolha da zeólita H-Beta como suporte foi motivada por sua elevada acidez por favorecer às reações de desidratação do ácido 4-hidroxipentanóico e do 1,4-PDO. O uso de 1,4-dioxano como solvente também se mostrou fundamental para a obtenção do 2-MTHF, já que o meio aquoso inibe a reação de desidratação do 1,4-PDO.





Niterói, RJ. 10 e 11 de abril de 2025

LODO DE ESGOTO PIROLISADO COMO CATALISADOR PARA OBTENÇÃO DE ÁLCOOL FURFURÍLICO VIA REAÇÃO DOMINÓ DO FURFURAL

Paula R. R. Oliveira ^{1*}, Aynã Félix ¹, Ruan Sardinha ¹, Phelipe L. A. Correia ¹, Roberto Fernandes ¹, Vinicius G. C. Madriaga ¹, André V.H. Soares², Fabio B. Passos ², Thiago M. Lima ¹.

¹ Departamento de Química Inorgânica, UFF, Niterói, Rio de Janeiro, Brasil.

² Escola de Engenharia, UFF, Niterói, Rio de Janeiro, Brasil.

*paula_rocha@id.uff.br

O uso de excessivos combustíveis fósseis e aumento de sua dependência com o crescimento populacional, resulta em impactos ambientais consideráveis no meio ambiente, como o aquecimento global. Diante desse quadro, torna-se indispensável a busca por alternativas mais sustentáveis para a produção de compostos de valor agregado. Nesse ponto, a biomassa lignocelulósica aparece como uma alternativa promissora devido a ampla diversidade de aplicações de seus derivados, como o álcool furfurílico. Este projeto investiga a possibilidade do uso de lodo de esgoto pirolisado como catalisador na obtenção de álcool furfurílico a partir da conversão do furfural (FUR) via reação dominó. O lodo de esgoto é um material de baixo custo e rico em metais, apresentando potencial para aplicações químicas. A amostra de lodo de esgoto foi coletada na estação de tratamento de esgoto (ETE) Prolagos, na cidade de Arraial do Cabo (RJ), e posteriormente submetido à pirólise e reator contínuo a temperaturas de 400 °C e 500 °C. As análises estruturais do catalisador foram realizadas por difração de raios X (DRX) e espectroscopia de fluorescência de raios X por energia dispersiva (EDX), revelando a presença de cátions como o ferro e alumínio nas cinzas, podendo agir como sítio ácido de Lewis, necessários para conversão do FUR. A análise por espectroscopia de infravermelho confirmou a ausência de bandas acima de 3000 cm⁻¹, relativas a CH₂ e CH₃, indicando a completa e bem sucedida pirólise da amostra. A reação catalítica foi conduzida em um tubo selado tipo Ace tube® em banho de areia, utilizando 28 µL de FUR, 100 mg de catalisador e 1,5 mL de isopropanol a uma temperatura de 130° C. Os resultados demonstraram uma conversão de 67,8% e uma seletividade de 82,2% para álcool furfurílico. Além do potencial de reaproveitamento de resíduos urbanos para a produção de produtos de valor agregado, este estudo propõe um catalisador de origem renovável e traz uma perspectiva mais verde a processos de valorização da biomassa.





Niterói, RJ. 10 e 11 de abril de 2025

NITRETOS DE CARBONO SULFONADOS COMO CATALISADORES PARA REAÇÃO DE CONDENSAÇÃO ALDÓLICA DO FURFURAL

Roberto O. Fernandes ^{1*}, Phellipe L.A. Corrêa ¹, Aynã Felix ¹, Vinicius G. C. Madriaga ¹, Fabio B. Passos ² e Thiago M. Lima ¹

¹ Departamento de Química Inorgânica, Universidade Federal Fluminense, Niterói, Rio de Janeiro, Brasil.

² Escola de Engenharia, Universidade Federal Fluminense, Niterói, Rio de Janeiro, Brasil.

* robertof@id.uff.br

Com as crescentes demandas por fontes energéticas mais sustentáveis, a biomassa lignocelulósica surge como alternativa aos combustíveis fósseis devido a seu caráter renovável e diversidade de aplicação de seus derivados. Como exemplo, por meio da reação de condensação aldólica do furfural (FUR), é formado o 4-(2-Furil)-3-buten-2-ona (F-Ac), molécula precursora de bioquerosene de aviação. Entretanto, ainda é necessário buscar estratégias de catálise heterogêneas que sejam mais baratas e sustentáveis, uma vez que catalisadores homogêneos empregados atualmente são de difícil recuperação e reuso, gerando grande quantidade de resíduos. Nesse sentido, os nitretos de carbono grafítico ($g-C_3N_4$) são uma alternativa promissora, dado o baixo custo de produção, estabilidade térmica e estrutura interessante para agir como suporte para grupos sulfônicos, formada por nanofolhas de unidades de tri-s-triazina. Assim, este trabalho visou a síntese de nitreto de carbono sulfonado e aplicação na reação de produção do F-Ac. A síntese do $g-C_3N_4$ foi feita através da polimerização térmica da ureia a 500°C por 2 h. Logo após, a funcionalização ácida ocorreu sob agitação à temperatura ambiente, com 1 g do suporte, 50 mL de diclorometano e variando o volume de ácido clorossulfônico (0,5 mL; 1,0 mL; 1,5 mL; 2,0 mL) a fim de avaliar o impacto desse parâmetro na reação. A presença do grupo sulfônico foi confirmada através de alta porcentagem de enxofre presente nas análises por espectroscopia de raios X por energia dispersiva, além da presença de uma banda em 1045 cm^{-1} na espectroscopia de infravermelho, relativa aos estiramentos simétricos de grupos S=O. Os testes catalíticos foram conduzidos em tubo selado a 100°C, com 100 mg de catalisador, 144 μL de FUR e 1,5 mL de acetona. O catalisador com 2 mL de ácido clorossulfônico teve a melhor atividade, ainda em condições não otimizadas, com 13,10% de conversão do material de partida e seletividade total para o F-Ac.





Niterói, RJ. 10 e 11 de abril de 2025

INFLUÊNCIA DO TEMPO DE SULFATAÇÃO NAS PROPRIEDADES DE NIÓBIAS FUNCIONALIZADAS COMO CATALISADORES ÁCIDOS

Paloma K. B. Teixeira¹, Bruno M. Braga¹, Angela S. Rocha¹

¹ Programa de Pós-Graduação em Química, Instituto de Química, Universidade do Estado do Rio de Janeiro (UERJ)

angela.sanches.rocha@gmail.com

Catalisadores sólidos ácidos são utilizados em diversos processos industriais e o desenvolvimento de materiais ativos, seletivos e estáveis é uma área de contínua pesquisa. Por outro lado, como o Brasil é o grande produtor de nióbio do mundo, gerar tecnologias em que este elemento seja usado é importante para o país. O óxido de nióbio (nióbia) é um sólido que apresenta tanto acidez de Lewis quanto de Brønsted, mas sua funcionalização é uma estratégia possível para incrementar a acidez de Brønsted. Em trabalhos anteriores, estudou-se nióbias sulfatadas e fosfatadas com soluções aquosas de ácido sulfúrico e fosfórico, respectivamente, em que foi comprovado o aumento da acidez. No entanto, apesar das nióbias sulfatadas terem sido os catalisadores muito ativos para esterificação, a incorporação superficial de sulfato ficava limitada pelo método usado, em que o tratamento era realizado por uma hora, mesmo usando soluções concentradas de ácido sulfúrico. Sendo assim, o objetivo deste trabalho é avaliar a influência do tempo na sulfatação da nióbia com ácido sulfúrico visando ao seu uso como catalisador ácido. Os materiais foram sintetizados por tratamento do ácido nióbico da CBMM com solução de ácido sulfúrico 1 mol.L⁻¹ à temperatura ambiente por 1, 2, 4, 6, 12 e 24 h, seguida de filtração, secagem e calcinação a 500 °C. Os catalisadores sulfatados e a nióbia foram caracterizados por adsorção de N₂, difratometria de raios X (DRX) e espectroscopia de absorção do infravermelho por transformada de Fourier (FTIR). Os materiais foram testados na esterificação do ácido acético com etanol em sistema batelada com refluxo, a 70 °C, pressão atmosférica, razão molar etanol:ácido 3:1 e 0,5% em massa de catalisador. O avanço da reação foi acompanhado retirando-se alíquotas a cada 15 ou 30 min até 3 h, que eram analisadas em um HPLC com detector UV-Vis. Os resultados de análise textural indicaram que todos os catalisadores sulfatados apresentaram área maior que a nióbia pura, exceto o sulfatado por 24 h. Os perfis de DRX são típicos da fase pseudo-hexagonal da nióbia e os espectros de FTIR compatíveis com a nióbia pura e nióbias sulfatadas, como esperado. Todos os materiais sulfatados converteram mais ácido acético a acetato de etila do que a nióbia pura (3%), evidenciando o aumento de acidez com a sulfatação, sendo que o catalisador 12 h foi o que apresentou maior atividade, convertendo 18%.





Niterói, RJ. 10 e 11 de abril de 2025

Síntese e avaliação de catalisadores metalorgânicos em reações de valorização de derivados de biomassa para a obtenção de precursores de biocombustíveis

Gustavo F. Bitencourt¹, Sancler C. Vasconcelos², Luana S. Andrade¹, Daniel G. S. Quattrociochi³, Vinicius Rossa², Wagner A. Carvalho¹, Dalmo Mandelli¹, Thiago M. de Lima^{2,*}

¹ Universidade Federal do ABC, Centro de Ciências Naturais e Humanas; ² Universidade Federal Fluminense, Instituto de Química; ³ Universidade Federal de Roraima, Centro de Ciências e Tecnologia.
*tmlima@id.uff.br

Atualmente, há um crescente interesse na busca por fontes renováveis que possam ser utilizadas como alternativas para complementar a demanda por combustíveis fósseis. Diferentes moléculas plataforma como o furfural (FUR) podem ser utilizadas para a obtenção de produtos químicos de alto valor agregado, com aplicação em diversos setores, como na produção de biocombustíveis. A utilização de estratégias *one-pot* reduz a utilização de solventes e favorece a viabilidade econômica do procedimento. Estruturas metalorgânicas (MOFs – *Metal-organic frameworks*) são materiais promissores para reações catalíticas, já que apresentam propriedades modeláveis como tamanho de poro, volume de poro e acidez, de maneira que sua utilização em reações de condensação aldólica devem ser avaliados. Assim, neste trabalho foi realizada a síntese das MOFs Fe-MIL-88B e Fe-MIL-88B-NH₂, e os materiais foram utilizados como catalisadores para a conversão de FUR em Furfural Acetona (FAc), com o objetivo de avaliar potenciais catalisadores em reações de valorização de derivados da biomassa e sua transformação em precursores de combustíveis de aviação sustentáveis (SAFs – *Sustainable Aviation Fuels*). Os materiais sintetizados foram caracterizados por diferentes técnicas, tais como DRX, FT-IV, EDS, TGA, FAAS, etc. Estudos catalíticos preliminares foram realizados na temperatura de 150 °C por 24 h, utilizando tubos ACE[®] de alta pressão, utilizando 50 mg de catalisador e, como resultado, uma conversão de 70% foi alcançada com seletividade de 43% para o FAc utilizando a MOF Fe-MIL-88B. Após o estudo do efeito dos parâmetros das condições reacionais e pré tratamentos como temperatura, agitação, razão molar e tempo de ativação dos catalisadores, valores de conversão e seletividade acima de 99% foram obtidas com o catalisador Fe-MIL-88B.





Niterói, RJ. 10 e 11 de abril de 2025

CATALISADORES HIDROFÓBICOS A BASE DE ZrO_2-SiO_2 PARA A VALORIZAÇÃO DA HEMICELULOSE

Luiz F. S. Silva^{1,2}, Elise M. Albuquerque², Marco A. Fraga^{2,3}

¹Instituto Federal do Rio de Janeiro, IFRJ; ²Instituto Nacional de Tecnologia, INT; ³DEQM/PUC-Rio
luiz.flpsilva12@gmail.com; elise.albuquerque@int.gov.br; marco.fraga@int.gov.br

A produção de moléculas plataforma a partir de hemiceluloses, fração rica em açúcares C5, tem ganhado destaque como uma alternativa viável e economicamente vantajosa para a obtenção de diversos bioprodutos. A xilose é a molécula mais representativa das hemiceluloses, e estudos mostram que sua valorização em moléculas plataformas, como álcool furfúrico e ácido levulínico, pode ser realizada em ausência de hidrogênio puro. A produção direta de álcool furfúrico a partir da xilose acontece através de reações em cascata de isomerização, desidratação e redução de Meerwein-Ponndorf-Verley (MPV). Para isto, os catalisadores precisam ter sítios ácidos de Brønsted, para realizar reações de desidratação, e sítios ácidos de Lewis, para reações de isomerização e redução MPV. A água gerada durante o processo de hidrólise da hemicelulose é um problema, pois a água se adsorve nos sítios ácidos de Lewis, formando adutos água-sítios ácidos de Lewis, levando à desativação desses sítios. Neste trabalho, foi utilizado um catalisador comercial de ZrO_2-SiO_2 , a presença da SiO_2 aumenta a hidrofobicidade da ZrO_2 , evitando a desativação dos sítios ácidos de Lewis. Os sítios ácidos de Brønsted foram gerados através da incorporação de tungstênio, com diferentes teores (1%, 4%, 8% e 10% de W), na superfície da ZrO_2-SiO_2 . Os catalisadores foram caracterizados por FRX, DRX, fisissorção de N_2 , UV-DRS, TPD- NH_3 . Os testes catalíticos foram realizados em um reator em batelada do tipo Parr a 130 °C, 30 bar N_2 , por 2 h. Uma solução de partida de xilose em 2,5% $H_2O:2$ -propanol foi utilizada. A conversão de xilose e formação dos produtos foi determinada por HPLC. Os testes catalíticos mostraram que todos os catalisadores foram ativos para a conversão de xilose, com valores de conversão aumentando de 15% a 90%, seguindo o aumento do teor de W. No que diz respeito a seletividade aos produtos, para o catalisador contendo 1% de W o principal produto foi a xilulose, vinda da isomerização da xilose, com valores de seletividade por volta de 55%, seguido por furfural e álcool furfúrico, <5% cada. A partir de 4% de W, todos os catalisadores apresentaram comportamento semelhante com o álcool furfúrico sendo o produto principal (seletividade >70%) e seletividade a xilulose e furfural em torno de 10% e 5%, respectivamente. Essa tendência está diretamente relacionada a acidez do material, que aumenta conforme aumenta o teor de tungstênio. Quanto maior a quantidade de tungstênio, maior a densidade de sítios ácidos de Brønsted, que são os responsáveis por promover a desidratação da xilulose em furfural que é, em seguida, convertido em álcool furfúrico nos sítios ácidos de Lewis através da redução de MPV. A alta seletividade ao álcool furfúrico pode ser associada à presença da SiO_2 , que proporcionou hidrofobicidade ao material, protegendo esses sítios das moléculas de água.





6º Encontro de
Catálise
Regional 2
RJ, MG e ES – 2025



SBCAT
SOCIEDADE BRASILEIRA DE CATÁLISE

FOTOCATÁLISE





Niterói, RJ. 10 e 11 de abril de 2025

VANÁDIO INCORPORADO NA ESTRUTURA ETS-10 PARA A FOTORREDUÇÃO DO CO₂

Monize Picinini^{1*}, Ricardo José Passini¹, Heloise O. Pastore¹

¹Grupo de Peneira Moleculares Micro e Mesoporosas, Instituto de Química, Universidade Estadual de Campinas, Campinas – SP, 13083-862, Brasil.

* monizep@unicamp.br

Semicondutores empregados como fotocatalisadores podem ser aplicados na redução de poluentes da água e do ar, como por exemplo, do dióxido de carbono (CO₂), principal gás responsável pelo aquecimento global. Diferentes semicondutores têm sido estudados para esse fim, com destaque ao dióxido de titânio (TiO₂) devido à sua não toxicidade e baixo custo. No entanto, devido a sua alta energia de band gap (~3,2 eV), apenas uma pequena parte do espectro solar (< 5%) é suficientemente energética para fotoexcitar o TiO₂. O ETS-10 (Titanosilicato Engelhard, estrutura 10) é um fotocatalisador promissor para esta aplicação, pois sua estrutura, que consiste em fios de TiO₂ embutidos e isolados por uma estrutura de SiO₂, lhe confere as propriedades fotocatalíticas do TiO₂ combinadas com maior flexibilidade estrutural, além disso, a incorporação de metais na sua estrutura pode modular o ambiente eletrônico, melhorando a atividade fotocatalítica ao expandir a faixa útil do espectro solar. Sendo assim, este trabalho teve como objetivo sintetizar a estrutura ETS-10 substituída por vanádio e então incorporado óxido de cobre, avaliando sua atividade na fotorredução do CO₂. ETS-10 e xEVTS-10 (x= V/V+ Ti = 10, 30, 50 e 70) foram preparados por metodologia hidrotérmica, a qual consistiu na preparação de uma solução de sílica, hidróxido de sódio e potássio sob agitação magnética, à qual foi adicionado sulfato de vanadila (IV) e tetracloreto de titânio. Após homogeneização, o pH foi ajustado para 10,4-10,5 com ácido clorídrico e, em seguida, o gel foi tratado hidrotermicamente a 230°C por 72 h. O material cristalino foi isolado por filtração a vácuo, lavado com água deionizada e seco a 100 °C. As amostras foram caracterizadas por DRX, FRX, Raman, ²⁹Si-RMN e UV-Vis. Para a fotorredução do CO₂, foram utilizados 100 mg da amostra e 100 mL de água, que foram alocados em um reator de quartzo, e então a suspensão foi borbulhada com CO₂ por 30 min. Em seguida, o reator foi fechado e iluminado por luz visível por 4 h e então quantificado por cromatografia gasosa e RMN. Em resumo, as estruturas ETS-10 e xEVTS-10 foram obtidas, apresentando teor de vanádio similar ao nominal. A incorporação de vanádio na estrutura ETS-10 impactou as propriedades eletrônicas do material, visto que houve diminuição nos valores de band gap, e a formação de uma banda de absorção em 600 nm, o que permite o uso de luz visível. Ambos os fatores são necessários para melhorar a atividade das amostras. E a fotorredução do CO₂ exibiu uma produção de 125 µmol de produtos/g, com cerca de 40% de seletividade ao etanol.





Niterói, RJ. 10 e 11 de abril de 2025

SÍNTESE E APLICAÇÃO DE NANOPARTÍCULAS NÚCLEO-CASCA DE $\text{Fe}_x\text{O}_y@\text{C}$ NA DESCOLORAÇÃO DO ÍNDIGO CARMIM EM MEIO AQUOSO

Marcos Vinicio M. Panzembock¹, Alexandre B. Gaspar², Deborah V. Cesar¹,
Cristiane A. Henriques¹.

¹ PPGEQ/IQ/Universidade do Estado do Rio de Janeiro, Rua S. Francisco Xavier, 524, Rio de Janeiro, Brasil.

² Instituto Nacional de Tecnologia, Av. Venezuela, 82, Rio de Janeiro, Brasil.

* Email: viniciopanzembock@gmail.com

O setor têxtil é um dos seguimentos industriais mais tradicionais e importantes para a economia brasileira, responsável pela geração de mais de 1 milhão de empregos formais e 8 milhões indiretos. Em contrapartida, esse setor é um dos maiores poluidores, responsável por cerca de 54% de todos os resíduos gerados pela atividade industrial no mundo. Quando lançados sem tratamento no ambiente aquático, esses resíduos dificultam a penetração da luz solar nas camadas mais profundas de mares e rios, diminuindo a solubilidade do oxigênio na água e, causando efeitos tóxicos preocupantes na flora e fauna. Um dos corantes mais utilizados no segmento têxtil, principalmente para o tingimento de roupas, o índigo carmim é um efluente industrial com importante participação na poluição ambiental. Desse modo, torna-se imprescindível o estudo de metodologias para o tratamento eficiente desses efluentes. Nanopartículas núcleo-casca têm sido consideradas promissoras nas reações fotocatalíticas devido a sua versatilidade, baixo custo e eficácia. Neste trabalho, foram sintetizadas nanopartículas núcleo-casca de $\text{Fe}_x\text{O}_y@\text{C}$ por coprecipitação hidrotérmica a partir de duas metodologias distintas formando $\text{Fe}_3\text{O}_4@\text{C}$ e $\alpha\text{Fe}_2\text{O}_3@\text{C}$ para aplicação em reações fotocatalíticas para descoloração do índigo carmim (IC). Para a produção de $\text{Fe}_3\text{O}_4@\text{C}$, $\text{FeCl}_3 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$, ureia, glicose e etilenoglicol foram utilizados em um processo realizado a 200°C por 12h. Na síntese do $\alpha\text{Fe}_2\text{O}_3@\text{C}$, glucose e $\text{Fe}(\text{NO}_3)_3 \cdot 9\text{H}_2\text{O}$ reagem a 180°C por 24h. Na análise por difração de raios-X (DRX) foi identificada a formação do $\text{Fe}_3\text{O}_4@\text{C}$ e do $\alpha\text{Fe}_2\text{O}_3@\text{C}$. Na espectroscopia de infravermelho por transformada de Fourier (FTIR) foram observadas bandas em 1600 cm^{-1} e 1700 cm^{-1} , relativas as ligações C=C e C=O. Isso indica a formação da casca de carbono nas superfícies das nanopartículas. Essa hipótese foi corroborada por Espectroscopia por Dispersão de Elétrons (EDS) e microscopia eletrônica de transmissão (MET). A análise magnética (VSM) mostrou que o $\text{Fe}_3\text{O}_4@\text{C}$ apresenta um comportamento superparamagnético, com magnetização de saturação de 55 emu g^{-1} , enquanto o $\alpha\text{Fe}_2\text{O}_3@\text{C}$ apresentou magnetismo praticamente nulo. As áreas específicas, determinadas por adsorção/dessorção de N_2 , foram 103 $\text{m}^2 \text{g}^{-1}$ e 29 $\text{m}^2 \text{g}^{-1}$ para o $\text{Fe}_3\text{O}_4@\text{C}$ e $\alpha\text{Fe}_2\text{O}_3@\text{C}$, respectivamente, enquanto, para a magnetita (Fe_3O_4) e hematita ($\alpha\text{Fe}_2\text{O}_3$) puras, foram inferiores a 10 $\text{m}^2 \text{g}^{-1}$. O desempenho dos catalisadores foi avaliado em testes de fotólise, adsorção, Fenton e foto-Fenton para descoloração da solução do IC (20 mg L^{-1}). Na fotólise, com a presença do H_2O_2 (10%), foi observada descoloração total ao fim do processo, enquanto, na ausência desse reagente os valores foram praticamente nulos. Na adsorção, o equilíbrio foi atingido em 30 min, com descoloração máxima de 85% para o $\text{Fe}_3\text{O}_4@\text{C}$ e 80% para o $\alpha\text{Fe}_2\text{O}_3@\text{C}$. Nos testes de Fenton e Foto-Fenton, ambas nanopartículas núcleo-casca foram capazes de descolorir completamente o corante ao fim de 120 min.





Niterói, RJ. 10 e 11 de abril de 2025

DEGRADAÇÃO FOTOCATALÍTICA DA RODAMINA B UTILIZANDO REDE ORGÂNICA POROSA BASEADA EM MELAMINA DOPADA COM NIÓBIO

Geicy Kelly Pires Barboza¹, José Carlos Netto Ferreira¹, Leonardo Simões de Abreu Carneiro^{1*}

¹Universidade Federal Rural do Rio de Janeiro, Departamento de Química Orgânica, Instituto de Química, Seropédica, Rio de Janeiro, Brasil, 20.071-003. * e-mail: leocarneiro@ufrj.br

Schiff base networks (SNW) são estruturas orgânicas covalentes ricas em nitrogênio, baseadas na química de iminas, com alta porosidade e potencial significativo para aplicação como catalisadores, particularmente quando dopadas com metais, tais como o nióbio. Este estudo teve como objetivo sintetizar duas redes covalentes de triazina, dopada ou não com nióbio, e avaliar sua eficácia na remoção de rodamina B (RhB) de soluções aquosas, corante este que é amplamente usado nas indústrias alimentícia e têxtil, apresentando efeitos nocivos ao ambiente aquático. Ambos os materiais foram sintetizados pela condensação de melamina com tereftalaldeído sob condições solvotérmicas, sendo o primeiro **SNW-1**. Na síntese do segundo material, adicionou-se oxalato amoniacal de nióbio, denominando-o **Nb(ox)@SNW-1**. Suas estruturas tridimensionais foram confirmadas pela ausência da banda de estiramento da ligação imínica Ar-C=N e da amina secundária em 3387 cm⁻¹ e 1161 cm⁻¹ nos grupos aminais HN-C-NH, indicando estruturas de carbono sp³. A capacidade de adsorção dos materiais foi avaliada a partir de soluções de RhB (20 ppm) que foram agitadas na presença dos materiais (1,5 g L⁻¹) a 25 °C, no escuro. Após 60 min, os materiais atingiram o equilíbrio de adsorção: **SNW-1** adsorveu 96,2% e **Nb(ox)@SNW-1** adsorveu 12,0%, ambos seguindo a isoterma de Langmuir e cinética de pseudo-segunda ordem, com constantes de velocidade de 0,3264 mg g⁻¹ min⁻¹ e 0,5979 mg g⁻¹ min⁻¹, respectivamente. A presença do nióbio reduziu a área específica dos materiais de 620 m² g⁻¹ (**SNW-1**) para 4 m² g⁻¹ (**Nb(ox)@SNW-1**) e conseqüentemente sua capacidade de adsorção do corante. Ademais, também houve diminuição do *bandgap* do material de 4,53 eV (**SNW-1**) para 2,51 eV (**Nb(ox)@SNW-1**), possibilitando assim a avaliação fotocatalítica. Os testes fotocatalíticos utilizando **Nb(ox)@SNW-1** foram realizados com exposição de luz branca (LED 100 W) por 5 horas, apresentando 71,1% de fotodegradação com cinética de pseudo-segunda ordem e constante de velocidade de 0,0568 mg g⁻¹ min⁻¹. Observou-se que o material converteu RhB em Rh-110 através da N-desetilização. Estudos com diferentes sequestrantes de radicais indicam que os radicais ⁻O₂, ¹O₂ e *OH são espécies reativas essenciais no processo de fotodegradação da RhB.





Niterói, RJ. 10 e 11 de abril de 2025

MINERANDO SOLUÇÕES SUSTENTÁVEIS: SÍNTESE E APLICAÇÃO DE FOTOCATALISADORES NANOESTRUTURADOS À BASE DE COBRE E FERRO ORIUNDO DE REJEITO DA MINERAÇÃO

Celso de C. Machado*, Sara S. Vieira, Maurício A. de Melo Jr.

Universidade Federal Fluminense, Instituto de Química, Departamento de Química Inorgânica, Niterói- RJ.

* celsomachado@id.uff.br

Esta pesquisa propõe o desenvolvimento de um fotocatalisador inovador que utiliza matéria-prima acessível e que representa um grande passivo ambiental. A proposta consiste na criação de um sistema de produção fotoeletrolítica de combustíveis solares utilizando filmes finos do semicondutor ferrita de cobre (CuFeO_2), formado por ferro proveniente de rejeitos da mineração de ferro, sob irradiação solar. A utilização de ferro derivado de rejeitos de mineração na produção de fotocatalisadores oferece uma solução sustentável e inovadora, ao abordar simultaneamente o problema do descarte de resíduos e a necessidade de materiais catalíticos eficientes. O rejeito utilizado, é oriundo da barragem de Candonga (MG), e foi submetido às etapas iniciais de caracterização química por difração de raios X (DRX) e espectroscopia de raios X por dispersão de energia (EDX). Nas amostras analisadas foram identificadas fases de hematita, magnetita, goethita, quartzo e dickita. Para extrair o ferro presente no rejeito, as amostras foram submetidas a lixiviações ácidas sob diferentes condições de tempo, temperatura e concentração de ácido clorídrico. Os lixiviados foram analisados por ICP-OES para a quantificação do teor de ferro obtendo-se teores entre 1,4 M e 10,4 M a depender da severidade do tratamento. A partir das soluções de ferro obtidas, juntamente com sal de cobre ($\text{Cu}(\text{NO}_3)_2$), foram feitos filmes de ferro e cobre (CuFeO_2) por meio de eletrodeposição sobre FTO (*fluorine-doped tin oxide*) e convertidos à forma cristalina ao serem submetidos a um tratamento térmico a 650 °C sob atmosfera de argônio. O catalisador obtido foi caracterizado por DRX, microscopia eletrônica de varredura (MEV), espectroscopia no UV-Vis no modo refletância difusa e medidas fotoeletroquímicas. As atividades fotocatalíticas foram medidas num fotorreator sob irradiação solar simulada, em que os filmes finos do catalisador sintetizado foram estabelecidos como eletrodo de trabalho, a platina o contra eletrodo, e a Ag/AgCl o eletrodo de referência. A atividade catalítica foi avaliada na reação para produção de combustíveis solares por meio da divisão fotocatalítica de água. As performances dos fotocatalisadores na produção de combustíveis solares, como hidrogênio, foram correlacionadas com os sinais gerados em um potenciostato. Esses resultados confirmam a viabilidade do uso desses rejeitos como matéria-prima para a síntese de fotocatalisadores eficientes e sustentáveis.





Niterói, RJ. 10 e 11 de abril de 2025

EFEITO DA DESSILICAÇÃO DA ZEÓLITA ZSM-5 NA DEGRADAÇÃO FOTOCATALÍTICA DE ÓLEOS

G. N. de Sousa¹, Y. do N. Velez¹, P. Y. C. V. de Albuquerque², L. V. Pontual¹, A. A. da Silva¹, L. V. Mattos^{1*}

¹ Universidade Federal Fluminense, Niterói 24210-240, Brasil

² Instituto Federal do Rio de Janeiro, São Gonçalo 24425-000, Brasil

* Autor correspondente: e-mail: lisianemattos@id.uff.br

Objetivo. Desenvolver uma alternativa inovadora para a remoção de óleos derramados no mar, a partir da fotodegradação induzida por materiais multifuncionais, como TiO₂ suportado em zeólitas.

Justificativa. A recorrência e os potenciais riscos ambientais dos derramamentos de óleo exigem processos de remediação mais eficientes e sustentáveis. Os métodos tradicionais apresentam limitações, como altos custos, baixa eficiência e riscos de poluição secundária. A utilização de TiO₂ suportado em zeólitas sintetizadas representa uma opção promissora uma vez que é inócuo no ambiente e demonstra ótimo desempenho. A dessilicação da zeólita ZSM-5, material de alta área específica, aumenta a quantidade de mesoporos, facilitando a difusão de moléculas maiores, como as em óleos. Esse efeito amplia a área disponível para reações fotocatalíticas, tornando-o mais eficiente. Esse tratamento promove uma tecnologia escalável, econômica e ecológica, contribuindo para a mitigação da contaminação por óleos e preservação ambiental. O uso da unidade de fotocatalise de fluxo contínuo permite mimetizar as condições físico-químicas e ambientais de eventos de contaminação de óleos. Esse sistema possibilita um controle preciso do processo, permitindo operação prolongada e sem interrupções. Dessa forma, é possível definir as concentrações mínimas necessárias para induzir a reação fotocatalítica com maior eficiência, favorecendo a escalabilidade e a aplicação da tecnologia em sistemas reais de tratamento de água e remediação ambiental.

Metodologia. As zeólitas foram sintetizadas conforme patente EP1707533 (A1) e a ZSM-5 dessilicada foi preparada usando solução 0,6 M de Na₂CO₃ por 12 horas a 80°C, seguindo a literatura. Em seguida, houve a deposição de TiO₂ por impregnação úmida (97% de ZSM-5 e 3% de TiO₂ mássico) para formação da fase fotoativa. Os catalisadores foram caracterizados utilizando DRX e fisissorção de N₂. Antes da testagem com óleos, a atividade dos catalisadores foi avaliada na degradação do corante azul de metileno (solução 20 mg L⁻¹), utilizando 20 mg de catalisador em 100 mL de solução, sob iluminação de uma lâmpada de vapor de mercúrio de 150 W por 2 horas. A eficiência da degradação foi determinada por espectrofotometria (UV-5, Mettler Toledo).

Resultados. Resultados de DRX confirmaram a estrutura MFI nas duas amostras, além da presença de picos correspondentes ao TiO₂. A análise por fisissorção de N₂ mostrou que a dessilicação aumentou a mesoporosidade do material. Os testes de degradação do corante sob iluminação mostraram que, após 1 hora, os valores registrados foram 26,89% para o corante puro, 39,02% com ZSM-5 e 40,81% com ZSM-5 dessilicada, evidenciando a maior eficiência da degradação do corante na presença dos catalisadores, especialmente da zeólita dessilicada. Após 2 horas, a degradação do corante puro foi de 41,10%. Com o catalisador ZSM-5, a eficiência aumentou para 49,36%, enquanto a zeólita dessilicada apresentou o maior desempenho, atingindo 53,33%.”





Niterói, RJ. 10 e 11 de abril de 2025

GRAFENO E CARVÃO ATIVADO COMO SUPORTES DE CATALISADORES CONTENDO ÓXIDO DE FERRO PARA USO EM FOTOCATÁLISE

Camila L. O. Ferreira¹, Alexandre B. Gaspar², Deborah V. Cesar¹ e Cristiane A. Henriques¹

¹Programa de Pós-graduação em Engenharia Química, Instituto de Química, UERJ, Rua São Francisco Xavier, 524, Maracanã, Rio de Janeiro, RJ, Brasil; camila_lois@yahoo.com.br

²Instituto Nacional de Tecnologia, INT, Avenida Venezuela, 82, Centro, Rio de Janeiro, RJ, Brasil

O setor têxtil e de confecção brasileiro desempenha um importante papel na economia do Brasil, por ser o país um dos maiores produtores mundiais neste segmento industrial. Um dos principais desafios da indústria têxtil consiste na quantidade de resíduos gerados e na sua destinação, a qual é frequentemente feita de maneira não planejada e de forma precoce ocasionando poluição dos corpos hídricos. O estudo acerca dos Processos Oxidativos Avançados (POAs) revela-se como uma metodologia alternativa, eficaz e de baixo custo operacional, que permite alcançar a completa descoloração de corantes, presentes durante o processo de produção têxtil, em águas residuais. Além disso, pode promover a sua mineralização em CO₂, H₂O e íons inorgânicos através da geração de radicais hidroxila altamente oxidantes. Esse trabalho tem como objetivo geral, sintetizar fotocatalisadores à base de nanocompósitos magnéticos Fe₃O₄-óxido de grafeno reduzido (rGO) e/ou carvão ativado (CA) e aplicar em processos Foto-Fenton para descoloração de corantes comerciais. Carvões ativados comercial e sintetizado por tratamento de palha de coco com ácido fosfórico foram empregados. As propriedades físico-químicas dos materiais foram avaliadas através de técnicas de caracterização como a Difração de Raios-X (XRD), Análise Termogravimétrica (TGA), Análise Textural, SEM acoplada com EDS, Potencial Zeta, DRS, VSM, EPR, Espectroscopia Mössbauer e TEM. A atividade desses materiais foi determinada através dos percentuais de descoloração do corante índigo carmim, a partir dos processos de adsorção e fotocatálise. A partir da análise de XRD foi possível observar que se trata de materiais cristalinos. Verificou-se a formação das fases magnetita e hematita, confirmando a deposição do óxido de ferro na superfície do rGO e/ou CA. Os perfis de TGA mostraram a perda de massa devido à dessorção térmica de água, decomposição dos grupos funcionais contendo oxigênio e decomposição do substrato gráfico. Além disso, foi observado ganho de massa na faixa de 200 a 350 °C relativo à oxidação do Fe₃O₄ em Fe₂O₃. O compósito Fe₃O₄-CA (10% CA) apresentou área de 68 m² g⁻¹ versus 110 m² g⁻¹ do Fe₃O₄-CAp (10% CAp), valores superiores a magnetita comercial (15 m² g⁻¹), atribuídos à presença dos carvões nos compósitos. Os catalisadores Fe₃O₄-CA-rGO e Fe₃O₄-CAp-rGO apresentaram áreas específicas semelhantes, 50 m² g⁻¹ cada. Os testes fotocatalíticos foram realizados no reator de fotocatálise Synled, na presença de luz visível, utilizando o corante índigo carmim e solução de peróxido de hidrogênio. Todos os catalisadores apresentaram 100% de descoloração após 3 h, utilizando-se 4 mg de catalisador.





Niterói, RJ. 10 e 11 de abril de 2025

DEGRADAÇÃO FOTOCATALÍTICA DA RODAMINA 6G EMPREGANDO PEROVSKITA DE NIOBATO DE LÍTIO MODIFICADA COM PRATA.

Adrielle de O. B. Nogueira ^{1*}, Geicy Kelly P. Barboza ¹, João Frederico H. L. Monteiro ², Dari Cesarin-Sobrinho ¹, José Carlos Netto Ferreira ¹

¹ UFRRJ, Departamento de Química Orgânica/IQ, Seropédica, Rio de Janeiro, Brazil, 23.897-000. ² UFRJ, Centro Interdisciplinar de Dinâmica de Fluidos/COPPE, Rio de Janeiro, RJ, Brazil, 21.941-594. *e-mail: adrielleoliver2020@gmail.com

As perovskitas destacam-se na química de materiais sólidos por suas propriedades notáveis, sendo amplamente estudadas na fotocatalise para recuperação ambiental e geração sustentável de energia. A Rodamina 6G (Rh-6G) é um corante sintético de baixa biodegradabilidade e toxicidade, considerado um poluente ambiental. Devido à sua estabilidade, é amplamente estudado em processos de fotodegradação para mitigar seus impactos. A fotocatalise tem impulsionado pesquisas sobre perovskitas alcalinas, como NaNbO_3 , KNbO_3 e LiNbO_3 , devido às suas propriedades únicas e à possibilidade de ajuste do *band gap* por modificações estruturais. Este estudo avalia o impacto da modificação com prata no LiNbO_3 para melhorar sua eficiência fotocatalítica na degradação do corante Rodamina 6G sob luz visível. Os LiNbO_3 modificados e não modificado com prata foram sintetizados por metodologia sol-gel, e as modificações foram realizadas com teores de 30% e 40% de prata em mol. Os espectros de reflectância difusa foram registrados, permitindo o cálculo dos *band gaps* a partir do método de Tauc. No DRX, os picos principais observados para o LiNbO_3 foram (012), (104) e (110), característicos de sua estrutura romboédrica, e, para as estruturas modificadas com prata, o pico característico de prata (111) foi identificado. Outras análises, como FTIR, BET e MEV-EDS, também foram realizadas, proporcionando um maior entendimento sobre a estrutura do material e seu comportamento como fotocatalisador. Assim, foram avaliadas as capacidades fotocatalíticas do LiNbO_3 e de seus derivados modificados Ag30 e Ag40. A avaliação da fotodegradação do corante Rh-6G foi realizada por irradiação na região do visível do espectro eletromagnético, empregando um simulador solar com lâmpada de xenônio de 300 W e filtro de 400 nm, condição essencial para aplicação em conservação ambiental e tratamento de efluentes. Inicialmente, foi construída a curva de calibração da Rh-6G para a determinação de seu coeficiente de absorvidade molar, cujo máximo de absorbância foi observado a 526 nm, além da melhor concentração de trabalho (10 mg L^{-1}), seguida pela adsorção do corante no escuro pelas perovskitas, em concentração de 1 g L^{-1} durante 3 horas. A fotocatalise foi conduzida sob luz visível por 120 minutos, medindo-se a absorbância a cada 15 minutos de irradiação. Os resultados indicaram que a modificação com prata ampliou significativamente a capacidade fotocatalítica da perovskita LiNbO_3 , reduzindo seu *band gap* de 4,04 eV para 2,46 eV na amostra Ag40 e, conseqüentemente, diminuindo a energia necessária para a ativação dos elétrons. Conclui-se que a modificação do LiNbO_3 torna o material mais reativo à medida que mais prata é inserida na estrutura, atingindo 84,31% de degradação em 120 minutos. Os materiais seguem uma cinética de pseudo-primeira ordem, apresentando constantes de velocidade (k) iguais a $0,01862 \text{ min}^{-1}$, $0,01007 \text{ min}^{-1}$ e $0,00812 \text{ min}^{-1}$, respectivamente, para $\text{Ag40} > \text{Ag30} > \text{LiNbO}_3$.





Niterói, RJ. 10 e 11 de abril de 2025

DEGRADAÇÃO FOTOCATALÍTICA DA VIOLETA GENCIANA UTILIZANDO UM COVALENT ORGANIC FRAMEWORK BIDIMENSIONAL DOPADO COM NIÓBIO

Bernardo Almeida Soares¹, Henzo Moura Carvalho Cruz¹, Geicy Kelly Pires Barboza¹, José Carlos Netto Ferreira¹, Leonardo Simões de Abreu Carneiro^{1*}

¹ Departamento de Química Orgânica, Instituto de Química, Universidade Federal Rural do Rio de Janeiro (UFRRJ), Seropédica, Rio de Janeiro, Brasil, 20.071-003. *e-mail: leocarneiro@ufrj.br

A violeta genciana (VG) é um corante amplamente conhecido e utilizado como marcador biológico, agente dermatológico antisséptico e antimicrobiana, aditivo em alimentos de aves para inibir o crescimento de fungos e bactérias, na indústria têxtil e de papel, dentre outras.¹ É um composto com propriedades mutagênicas, onde estudos apontam que a mesma pode ser responsável pela causa de câncer em animais.² Com isso, tem-se que a contaminação de efluentes com a VG é uma grave preocupação no âmbito de saúde pública e ambiental. Este trabalho buscou um método para tratamento de efluentes contaminados por VG por meio de processos oxidativos avançados, em particular a fotocatalise mediada pelo uso de um *covalent organic framework* (COF) dopado com oxalato de nióbio. Os COFs são nanomateriais orgânicos porosos e cristalinos com elevadas áreas superficiais, o que os tornam materiais de grande interesse na área de catálise. O material proposto, denominado **NbOx(2;6;12)@Hb-Pa-COF**, foi sintetizado a partir da reação entre o 2,4,6-triformilfenol (**Hb**), *p*-fenilenodiamina (**Pa**) e diferentes quantidades de oxalato de nióbio amoniacal em meio aquoso na presença de ácido acético como catalisador, em ampolas seladas em forno a 120 °C por 72 h. A caracterização por FTIR foi apresentou a banda de estiramento de imina em 1597 cm⁻¹, evidenciando a formação de uma estrutura com ligações C=N como esperado. A área superficial do material foi determinada pela análise de BET, com valores de 547, 325, 244 e 122 m² g⁻¹ para 0, 2, 6 e 12% de oxalato de nióbio em massa, respectivamente. O material possui um bandgap de cerca de 1,60 eV, sem apresentar variação significativa em função do aumento de nióbio no material, o que caracteriza um semiconductor. Os testes como fotocatalisadores foram realizados em soluções aquosas de VG a 25 mg L⁻¹ na presença do catalisador (1,0 g L⁻¹), sendo a primeira hora no escuro seguida de exposição de luz branca (LED 100 W) por 4 h. Na primeira hora observou-se adsorção de VG de 45, 36 e 34% para os materiais **NbOx(2%)@Hb-Pa-COF**, **NbOx(6%)@Hb-Pa-COF** e **NbOx(12%)@Hb-Pa-COF**, respectivamente, atingindo o equilíbrio de adsorção numa cinética de pseudo-segunda ordem. Ao iniciar a incidência de luz branca, o material **NbOx(2%)@Hb-Pa-COF** foi capaz de degradar 87,19% da VG em solução, já o **NbOx(6%)@Hb-Pa-COF** degradou 76,32% e **NbOx(12%)@Hb-Pa-COF** degradou 70,49%, em uma cinética de ordem zero com constantes cinéticas de 0,0488, 0,0416 e 0,0351 mg g⁻¹ min⁻¹, respectivamente.





Niterói, RJ. 10 e 11 de abril de 2025

DESENVOLVIMENTO DE CATALISADORES PARA A PRODUÇÃO DE HIDROGÊNIO A PARTIR DA ÁGUA POR FOTO-ELETROCATÁLISE

Júlia de Oliveira Marins^{1,2*}, Patrícia Viana Rodrigues¹, Laís Ferreira Castro^{1,3}, Deborah Vargas Cesar³, Cristiane Assumpção Henriques³, Alexandre Barros Gaspar¹.

¹Instituto Nacional de Tecnologia, Av. Venezuela, 82, Rio de Janeiro, Brasil. ²Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, Brasil. ³Programa de Pós-graduação em Engenharia Química, Instituto de Química, Universidade do Estado do Rio de Janeiro, Rua S. Francisco Xavier, 524, Rio de Janeiro, Brasil. julia.marins@int.gov.br*

Pesquisas apontam o hidrogênio como uma solução promissora para a transição energética devido ao seu potencial como fonte de energia limpa. A fotoeletrocatalise, que utiliza energia solar e um campo elétrico para gerar hidrogênio a partir da água, é uma alternativa para uma economia de baixa emissão de carbono. O estudo propõe a síntese de um catalisador à base de grafeno (rGO) e Fe_3O_4 para aplicação na geração de hidrogênio a partir da água, por foto, eletro e fotoeletrocatalise. A síntese do óxido de grafeno (GO) foi realizada pelo método de Hummers modificado. O GO foi tratado termicamente a 500°C sob fluxo de nitrogênio, resultando no óxido de grafeno reduzido (rGO). O compósito rGO/ Fe_3O_4 foi sintetizado pelo método de Stöber modificado. As amostras foram caracterizadas por difração de raios X (DRX), espectroscopia vibracional na região do infravermelho (FTIR) e microscopia eletrônica de varredura com detector de energia dispersiva (MEV-EDS). A análise do difratograma do GO mostrou deslocamento do pico (2θ) em $25,5^\circ$ do grafite para $11,0^\circ$, indicando a inserção de grupos oxigenados ao longo da rede do grafite. A análise do espectro FTIR do óxido de grafeno apresentou bandas em 3.380 , 1.716 , 1.167 e 1.051 cm^{-1} que são características de grupos funcionais oxigenados, o que corrobora com o DRX e sugere a formação de GO. A análise do difratograma de raios X do rGO mostrou o deslocamento do pico de $11,0^\circ$ para $25,6^\circ$, indicando a remoção dos grupos oxigenados e confirmando a redução do GO. No compósito rGO/ Fe_3O_4 , os picos característicos da magnetita e da hematita (Fe_3O_4) foram observados, semelhantes aos do Fe_3O_4 comercial. No entanto, o pico típico do rGO, que aparece em torno de $25,6^\circ$, não foi claramente observado. Esse fato pode ser atribuído à alta concentração de Fe_3O_4 na amostra, que possui $57,65\%$ m/m de ferro, $31,23\%$ m/m de oxigênio e $11,06\%$ m/m de carbono, de acordo com o MEV-EDS, o que provavelmente mascarou o pico do rGO. O teste magnético, utilizando um ímã, mostrou que o compósito possui propriedades ferromagnéticas, o que pode ser vantajoso para processos que exigem a separação magnética do catalisador. A combinação de rGO e Fe_3O_4 resultou em um material com ótimas propriedades estruturais e magnéticas, promissor para a produção de hidrogênio e outras aplicações em energias renováveis. O estudo mostrou que a sinergia entre esses materiais pode aumentar a eficiência e a reciclagem do catalisador, expandindo suas aplicações tecnológicas.





Niterói, RJ. 10 e 11 de abril de 2025

COMPÓSITOS FOTOATIVOS BASEADOS EM NIÓBIO E COBRE PARA A DEGRADAÇÃO DE CORANTES SOB LUZ VISÍVEL

Rafaela N. C. T. Lopes¹, João Vitor Z. de Abrantes¹, Maurício R. de Brito¹,
Geicy Kelly P. Barboza¹, João Frederico H. L. Monteiro¹, José Carlos Netto-
Ferreira¹ e Eduardo H. Wanderlind^{1*}

¹ Instituto de Química, Universidade Federal Rural do Rio de Janeiro (UFRRJ), 23.897-000, Seropédica/RJ, Brasil. * ewanderlind@ufrj.br

O desenvolvimento de novos materiais fotoativos tem sido impulsionado por novas demandas da sociedade, como a transição energética e a remediação ambiental. Nesse sentido, vários esforços se concentram atualmente no desenvolvimento de materiais que possam ser utilizados sob luz visível, visando em última instância a utilização da luz solar. Nesse contexto, este estudo tem como foco a síntese e caracterização de compósitos orgânico-inorgânicos fotoativos contendo cobre e óxidos de nióbio, visando a aplicação como fotocatalisadores na degradação de corantes em meio aquoso sob luz branca. Após a realização de um planejamento fatorial para a otimização das etapas de síntese, foram selecionados dois materiais finais, ambos contendo cobre e um polímero orgânico, mas cada um deles revestindo um pentóxido de nióbio diferente, sendo um deles denominado OG (*optical grade*) e contendo fases monoclinica e ortorrômbica, e o outro, denominado HP (*high purity*), rico em fase monoclinica. Os materiais foram denominados Cu/P@OG e Cu/P@HP de acordo com o pentóxido de nióbio empregado. Os detalhes experimentais das etapas de síntese não serão divulgados neste momento por questões de proteção à propriedade intelectual. Foram realizadas análises para a caracterização dos materiais, tais como difração de raios X em pó (PXRD), análise termogravimétrica (TGA) e espectrometria de refletância difusa na região UV/Vis (DRUV/Vis). Ressalta-se que os valores de *bandgap* obtidos para os materiais Cu/P@OG e Cu/P@HP foram 2,45 e 2,24 eV, respectivamente, menores que os valores de 3,03 e 2,93 eV para os óxidos precursores não revestidos. A atividade fotocatalítica dos materiais foi avaliada frente à degradação de rodaminina B (RhB) em meio aquoso, utilizando-se uma lâmpada LED branca (100 W), incidida sob suspensões contendo 0,5 g/L de compósito ou óxido de nióbio precursor e 8 ppm do corante, sendo as reações monitoradas por espectrofotometria de UV/Vis. Observou-se que ambos os compósitos apresentaram desempenho superior na descoloração das soluções do corante, em comparação com os óxidos de nióbio não revestidos, sendo que os materiais Cu/P@OG e Cu/P@HP levaram à diminuição de ~90 e 30% dos valores de absorvância em 555 nm em duas horas de reação. Atualmente, estão sendo investigados os mecanismos reacionais, bem como a expansão dos estudos para outros corantes e outras fontes de luz, e em particular, um simulador de luz solar.





Niterói, RJ. 10 e 11 de abril de 2025

DESENVOLVIMENTO DE CATALISADORES A BASE DE HIDROALCITA PARA APLICAÇÃO EM DEGRADAÇÃO DE CORANTE POR FOTOCATÁLISE

Patrícia Viana Rodrigues¹, Laís Ferreira de Castro^{1,2}, Deborah Vargas Cesar², Cristiane Assumpção Henriques², Alexandre Barros Gaspar¹

*¹Instituto Nacional de Tecnologia, Av. Venezuela, 82, Rio de Janeiro, Brasil. ² Programa de Pós-graduação em Engenharia Química, Instituto de Química, Universidade do Estado do Rio de Janeiro, Rua S. Francisco Xavier, 524, Rio de Janeiro, Brasil. patricia.viana@int.gov.br**

Pesquisas recentes propõem o uso de processos oxidativos avançados com emprego de fotocatálise, que é uma rota mais sustentável, e que usa a energia solar, para a descontaminação da água. O objetivo deste trabalho foi a síntese de compósitos a base de hidrotalcita e Fe_3O_4 para posterior incorporação de grafeno para aplicação em fotocatálise. Foram preparadas duas amostras de hidrotalcita: magnésio e alumínio (HTMgAl) e zinco e alumínio (HTZnAl) e seus compósitos de ferro (HTMgAl-Fe e HTZnAl-Fe). A síntese da hidrotalcita foi realizada pelo método de coprecipitação a pH variável, em presença de NaOH e Na_2CO_3 . Os compósitos foram preparados através de uma suspensão de hidrotalcita em uma solução de FeCl_3 e $\text{FeSO}_4 \cdot 7\text{H}_2\text{O}$ a 70°C . Posteriormente, foi adicionado lentamente uma solução de NaOH e em seguida, a mistura foi filtrada e o sólido foi encaminhado para secagem. O mesmo procedimento foi feito para obter Fe_3O_4 . Também foram preparados um compósito de ferro com uma amostra de hidrotalcita comercial (PURALMG30) que foi denominada PURALMG30-Fe. As amostras foram caracterizadas por fluorescência de raios X, análise elementar CHN, difratometria de raios X (DRX), espectroscopia vibracional na região do infravermelho (FTIR) e análise termogravimétrica (TGA). A análise por FRX indicou que as amostras HTMgAl e HTZnAl são compostas majoritariamente por (em % m/m): O (39,32%), Mg (33,32%), Al (19,88%) e Zn (61,11%), O (24,55%), Al (10,27%), respectivamente. Após a incorporação de Fe_3O_4 , houve um aumento no teor de Fe de 0,02 e 0,01% para 41,98 e 45,71% nas amostras HTMgAl-Fe e HTZnAl-Fe, respectivamente. A análise de DRX das amostras HTMgAl, HTZnAl e PURALMG30 indicou presença de hidrotalcita, hidrotalcita e zinicita (ZnO) e hidrotalcita e boemita, respectivamente. Após a incorporação de Fe_3O_4 notou-se presença de hidrotalcita e Fe_3O_4 , exceto na amostra HTZnAl-Fe onde não foi observado pico de hidrotalcita. A análise de FTIR dos compósitos mostrou presença da banda em 550 cm^{-1} que é atribuída a estiramento vibracional Fe-O, indicando que houve a incorporação de ferro nas amostras. As áreas específicas das amostras HTMgAl, HTZnAl, PURALMG30 foram de 97, 46 e $134\text{ m}^2\text{ g}^{-1}$, respectivamente, e após a incorporação de Fe_3O_4 (HTMgAl-Fe, HTZnAl e PURALMG30-Fe) os valores foram 67, 56 e $67\text{ m}^2\text{ g}^{-1}$. Isso pode ser explicado pela possível ocupação do Fe_3O_4 nos sítios superficiais da hidrotalcita e a sua área superficial é menor ($53\text{ m}^2\text{ g}^{-1}$). Conclui-se que a síntese da hidrotalcita e do compósito de ferro foram obtidas com sucesso visando a aplicação na degradação de corante por fotocatálise.





Niterói, RJ. 10 e 11 de abril de 2025

FOTOCATALISADORES À BASE DE ÓXIDO DE ESTANHO E NIÓBIO PARA DESCOLORAÇÃO DO CORANTE AMARELO REATIVO 4GL

Adriane Elise Maia¹, Celia Sousa², Priscila Tamiasso-Martinhon², Angela Sanches Rocha¹

¹ Programa de Pós-Graduação em Química, Instituto de Química, Universidade do Estado do Rio de Janeiro

² Departamento de Físico-Química, Instituto de Química, Universidade Federal do Rio de Janeiro

*adrianemaia131@gmail.com

Estudos sobre metodologias de síntese de óxidos metálicos visando a gerar fotocatalisadores ativos tanto sob radiação UV quanto visível vem sendo realizados, variando-se diferentes parâmetros, de modo a obter materiais mais eficientes. Neste sentido, como o Brasil é o maior produtor mundial de nióbio, desenvolver tecnologias para uso de fotocatalisadores contendo nióbio é importante para a nação. Assim, no presente trabalho, investigou-se o desempenho de óxidos mistos de nióbio e estanho na descoloração do corante Amarelo Reativo 4GL sob radiação UV e visível. Os materiais foram sintetizados por coprecipitação usando cloreto de estanho e complexo amoniacal de nióbio, e calcinação a 500 °C, de modo a gerar o óxido de estanho puro e óxidos mistos contendo teores nominais de 1% e 10% em massa de óxido de nióbio. Os sólidos foram caracterizados por adsorção de nitrogênio, TG, FTIR, MEV, EDS, FRX e DRX. Todos os materiais não calcinados, os géis secos, apresentaram cor branca. Após a calcinação, todos os materiais apresentaram cor esverdeada, típico da estanha pura. Os espectros de FTIR dos catalisadores são muito semelhantes entre si, apresentando bandas apenas abaixo de 1000 cm⁻¹, típicas de vibrações dos óxidos de estanho e nióbio, indicando decomposição dos precursores. Os resultados de TG mostraram estabilidade térmica dos materiais a partir de 400 °C, indicando decomposição completa dos precursores na temperatura de calcinação. Os óxidos mistos, em comparação com a estanha pura, apresentaram área específica mais elevadas e diâmetro de poros menores. A partir dos perfis de difração dos catalisadores, observou-se em todas as três amostras, estrutura típica da fase cassiterita da estanha cristalina. Quanto aos testes fotocatalíticos, o óxido de estanho puro apresentou maior desempenho catalítico no UV e Visível, atingindo descoloração de 54% e 44% respectivamente. Foi feito o reuso dos catalisadores sob as mesmas condições e no UV, todos os óxidos mantiveram seu desempenho catalítico. No visível, o reuso da estanha mostrou uma redução de atividade, descolorindo 26% provavelmente devido à forte adsorção do corante. A adição de óxido de nióbio à estanha provocou a redução da atividade, apesar do aumento de área.





Niterói, RJ. 10 e 11 de abril de 2025

FOTOCATALISADORES DE ALUMÍNIO E Nb_2O_5 ATIVOS SOB LUZ VISÍVEL

João Vitor Z. de Abrantes¹, Rafaela N. C. T. Lopes¹, Maurício R. de Brito¹, Geicy Kelly P. Barboza¹, João Frederico H. L. Monteiro¹, José Carlos Netto-Ferreira¹ e Eduardo H. Wanderlind^{1*}

¹ Instituto de Química, Universidade Federal Rural do Rio de Janeiro (UFRRJ), 23.897-000, Seropédica/RJ, Brasil. * ewanderlind@ufrj.br

Materiais à base de nióbio são reconhecidos como fotocatalisadores promissores para diferentes processos químicos, como a produção de hidrogênio. No entanto, os precursores mais comuns de nióbio, como o Nb_2O_5 , são frequentemente ativos apenas sob radiação ultravioleta. Considerando esse cenário, e aproveitando o Brasil como o principal produtor mundial de nióbio, o presente trabalho teve como objetivo desenvolver novos materiais baseados em nióbio ativos sob luz visível, para obter fotocatalisadores com potencial aplicação utilizando-se luz solar. Mais especificamente, foram desenvolvidos materiais utilizando-se alumínio, escolhido pelo seu baixo custo, e dois tipos de pentóxido de nióbio, denominados OG (*optical grade*), contendo fases monoclinica e ortorrômbica, e HP (*high purity*), rico em fase monoclinica. Após o tratamento do sal precursor de alumínio com um polímero orgânico para a obtenção de um coloide, foram obtidos dois materiais, revestindo-se cada Nb_2O_5 com o coloide previamente preparado. Assim, os materiais finais obtidos foram chamados Al/P@OG e Al/P@HP de acordo com o óxido precursor empregado. Os detalhes experimentais das etapas de síntese não serão divulgados neste momento por questões de proteção à propriedade intelectual. Os materiais foram caracterizados por diferentes técnicas, entre as quais citam-se difração de raios X em pó (PXRD), análise termogravimétrica (TGA) e espectrometria de refletância difusa na região UV/Vis (DRUV/Vis). Dados de DRUV/Vis permitiram obter os valores de 2,47 e 2,40 eV de *bandgap* para os materiais Al/P@OG e Al/P@HP, respectivamente, os quais são menores que os valores obtidos para os óxidos precursores não-revestidos (3,03 e 2,93 eV para GO e UP, respectivamente). A atividade fotocatalítica dos materiais foi inicialmente avaliada na decomposição de rodamina B (RhB) em meio aquoso usando uma lâmpada LED branca de 100 W, 0,5 g/L de composto ou óxido de nióbio precursor e 8 ppm do corante. A descoloração da solução foi monitorada por espectrofotometria de UV/Vis, que permitiu acompanhar a conversão da RhB (~555 nm) em produtos que absorvem em comprimentos de onda menores. Ambos os materiais Al/P@OG e Al/P@HP foram mais eficientes na descoloração das soluções, em comparação com os óxidos precursores não-revestidos, levando a diminuições na faixa de 75-80% dos valores de absorbância em 555 nm. Análises de CLAE encontram-se em andamento para detalhar os produtos reacionais.





6º Encontro de
Catálise
Regional 2
RJ, MG e ES – 2025



SBCAT
SOCIEDADE BRASILEIRA DE CATÁLISE

REFINARIA E PETROQUÍMICA





Niterói, RJ. 10 e 11 de abril de 2025

Do Resíduo ao Recurso: Despolimerização de PET com Microondas e Catalisador ECAT

Luís F. Bordini¹, Daniela O. Campos¹, Giullia B. Marçano¹, Pedro N. Romano² e João M. A. R. Almeida^{3*}

¹Escola de Química, Universidade Federal do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro (Brasil).

²Campus D. de Caxias, Universidade Federal do Rio de Janeiro, Duque de Caxias, (Brasil).

³Instituto de Química, Universidade Federal do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, (Brasil).

* E-mail: j.monnerat@iq.ufrj.br

O crescente acúmulo de resíduos plásticos, particularmente o tereftalato de polietileno (PET), representa uma ameaça ambiental significativa [1]. Este estudo explora a despolimerização catalítica do PET impulsionada por microondas (MW), utilizando ECAT (catalisador de equilíbrio de FCC), um resíduo industrial gerado no processo de craqueamento fluidizado de petróleo, para recuperar monômeros valiosos, ácido tereftálico e etileno glicol. As propriedades zeolíticas do ECAT permitem uma hidrólise eficaz sob condições mais brandas, reduzindo a corrosividade e o impacto ambiental [2]. Essa estratégia "resíduo + resíduo" oferece uma solução inovadora para a reciclagem sustentável do PET, promovendo a recuperação de recursos, minimizando o desperdício de plástico e avançando na economia circular. Além disso, o ácido tereftálico (TPA) formado, com alto grau de pureza, pode ser repolimerizado [3]. Os resultados obtidos com aquecimento convencional a 200°C não mostraram ganhos significativos ao usar o catalisador ECAT na despolimerização do PET. O PET permaneceu em uma fase sólida separada, limitando a interação eficaz com o catalisador. No entanto, nossos resultados revelam uma descoberta crucial: o ECAT provou ser um catalisador excepcional quando usado com aquecimento por microondas, superando significativamente o HCl, que, além de ser corrosivo e de difícil manuseio, apresentou menor eficiência. O aquecimento por MW facilitou a reação e promoveu a pré-hidrólise térmica, favorecendo a formação de oligômeros de maneira mais eficiente. Esses oligômeros, gerados mais facilmente durante o processo, foram mais efetivamente catalisados pelo ECAT, resultando em uma conversão e formação de TPA significativamente maiores. Essa melhoria na conversão pode ser atribuída às propriedades catalíticas do ECAT, incluindo os sítios ácidos de Brønsted e Lewis, que facilitam a ativação do PET de forma mais eficiente. Os resultados deste estudo destacam o enorme potencial do ECAT como um catalisador superior em reações de despolimerização de PET, oferecendo uma alternativa mais segura e eficiente em comparação com outros catalisadores, como o HCl, e abrindo novas possibilidades para a utilização do ECAT e resíduos plásticos.

Referencias

1. Ke, Y; Long, C; Qi, Z. *J. of Appl. Polym. Sci.*, v. 71, n. 7, p. 1139-1146, (1999).
2. Marçano, G *et al. Catal. Today*, v. 442, p. 114950, (2024).
3. Franz, R; Welle, F. *Molecules* 25.21 (2020).





Influência dos Compostos Nitrogenados na Produção de Diesel S10

Matheus da Silva Campos Machado, Idia Gigante Nascimento, Matheus Dorneles de Mello, Mônica Antunes Pereira da Silva*

Escola de Química/Universidade Federal do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, Brasil

* monica@eq.ufrj.br

Em virtude de o óleo diesel continuar sendo o principal combustível do setor de transporte brasileiro nos próximos anos, compreender seu processo de refino torna-se essencial. Além disso, com a tendência mundial de restringir a comercialização de combustíveis a um teor máximo de 10 mg kg^{-1} de enxofre, é fundamental entender as reações do processo de hidrotreatamento (HDT) para reduzir custos ^[1]. Dentre os compostos presentes nos derivados do petróleo, os compostos nitrogenados são considerados os principais inibidores dos sítios ativos dos catalisadores de HDT, devido às suas elevadas constantes de equilíbrio de adsorção ^[2]. Logo, este trabalho avaliou o impacto da concentração de nitrogenados nas reações simultâneas de hidrodessulfurização (HDS) de 4,6-dimetildibenzotiofeno (4,6-DMDBT) e hidrodensnitração (HDN) de quinolina (Q) em reator de leito fixo. O catalisador $\text{NiMoP/Al}_2\text{O}_3$ utilizado foi preparado por técnica de impregnação ao ponto úmido. O 4,6-DMDBT foi escolhido por ser considerado um dos compostos mais refratários presentes em quantidades significativas no diesel, devido à presença de anéis aromáticos e de dois grupos metilas em sua estrutura, podendo reagir por duas rotas reacionais: a dessulfurização direta (DDS), na qual ocorre a quebra da ligação C-S, e a hidrogenação prévia (HID), que envolve a formação de intermediários parcialmente hidrogenados antes da quebra da ligação C-S, sendo esta última a reportada na literatura como a via preferencial ^[3]. As condições experimentais foram mantidas em $310 \text{ }^\circ\text{C}$, 60 bar, 11 h^{-1} e 1000 mg kg^{-1} de S, variando a concentração de N entre 0 e 300 mg kg^{-1} de N. Os resultados evidenciaram uma redução drástica na conversão da HDS e na formação de seus produtos, sendo a rota HID a mais afetada ^[4]. Verificou-se que a introdução de apenas 50 mg kg^{-1} N de Q provocou uma redução de 60 % da HDS, atingindo um valor assintótico de 95 % para concentrações acima de 250 mg kg^{-1} N de Q. Além disso, observou-se que, em condições de baixa conversão de Q, a rota DDS tornou-se predominante. Com a adoção de um modelo simplificado de Langmuir-Hinshelwood, foi obtida a constante de equilíbrio de adsorção aparente da Q de 471 L mol^{-1} . Por fim, em relação à HDN, também foi observada uma expressiva redução na conversão, sugerindo uma autoinibição da rota provocada pelas espécies intermediárias da HDN de Q ^[5].





Niterói, RJ. 10 e 11 de abril de 2025

Impacto da Mesoporosidade Estruturada na Atividade e Estabilidade de Catalisadores Pt/HUSY em Hidrocraqueamento

N.F.L. de Paula¹, H.M. Mesa¹, J.M. Ortigosa², J.M.A.R. de Almeida¹, J. Garcia-Martinez², P.N. Romano³

¹ Instituto de Química, Universidade Federal do Rio de Janeiro, Av. Athos da Silveira Ramos, 149, Rio de Janeiro, Brasil 21941-90

² Laboratorio de Nanotecnología Molecular, Departamento de Química Inorgánica, Universidad de Alicante, 03690, Alicante, Spain

³ Campus Duque de Caxias, Universidade Federal do Rio de Janeiro, Rodovia Washington Luiz, 19593, Rio de Janeiro, Brasil, 25240-005.

O estudo aborda a modificação estrutural de zeólitas faujasitas (USY) e a análise de sua atividade e estabilidade no hidrocraqueamento do hexadecano. As limitações impostas pela estrutura microporosa das zeólitas restringe a difusão de moléculas volumosas e compromete sua eficiência catalítica. Para contornar esse problema, estratégias como a introdução de mesoporos utilizando surfactantes como agentes estruturais, aumentam a acessibilidade aos sítios ativos internos sem prejudicar as propriedades catalíticas da zeólita. No presente estudo, duas zeólitas faujasitas comerciais, CBV720_Parent e CBV780_Parent, com diferentes razões silício-alumínio, foram tratadas com brometo de cetiltrimetilamônio (CTAB) por tempos distintos para gerar catalisadores modificados. Os materiais resultantes foram impregnados com 1% de platina (wt/wt) e avaliados em um reator de leito fixo, alimentado continuamente com hexadecano sob atmosfera de hidrogênio e uma WHSV de 0,12 h⁻¹. Os resultados de caracterização dos catalisadores revelaram que a relação Si/Al e a densidade de sítios ácidos de Brønsted permaneceram praticamente inalteradas, apresentando valores médios de ~140 μmol/gcat para a zeólita com baixo teor de alumínio e ~347 μmol/gcat para a de alto teor. Em contrapartida, o volume de mesoporos aumentou significativamente, sendo 2,5 vezes maior para o Pt/CBV780_20hrs e 1,6 vezes para o Pt/CBV720_41hrs, quando comparados às zeólitas originais. A distribuição das nanopartículas de platina nos catalisadores foi homogênea, com diâmetros médios de 13,5 nm (Pt/CBV780) e 6,4 nm (Pt/CBV720), permitindo uma avaliação confiável do desempenho catalítico. Os catalisadores modificados com surfactante demonstraram um desempenho superior ao dos materiais originais em todas as temperaturas investigadas, com a seletividade dos produtos acompanhando a taxa de conversão. A estabilidade catalítica também foi aprimorada, com os materiais tratados por mais tempo apresentando menor taxa de desativação. Além disso, observou-se que o aumento da acessibilidade aos sítios ativos resultou em um ganho significativo de atividade catalítica, especialmente nos materiais com maior teor de sítios ácidos. Os resultados reforçam a importância da incorporação de mesoporos na otimização do desempenho de catalisadores baseados em zeólitas, contribuindo para um processamento mais eficiente de insumos energéticos.





Niterói, RJ. 10 e 11 de abril de 2025

Avaliação da relação Metal Nobre-CeZrO₂ para atividade catalítica e tioreistência na reação de deslocamento gás-água

Ludmila P. C. Silva^{1*}, Rachel M. Santos¹, Luís E. Terra¹, Ana C. S. L. S. Coutinho¹, Fabio B. Passos¹.

¹Departamento de Engenharia Química e de Petróleo, Universidade Federal Fluminense, Niterói, 24210-240 (Brazil), ludmilapcs@id.uff.br*.

A reação de deslocamento gás-água (WGS) é uma etapa chave no processo de conversão de resíduos para produção de hidrogênio, uma vez que o gás de síntese gerado pelo tratamento térmico de rejeitos frequentemente contém altos níveis de CO [1], além de concentrações significativas de enxofre. A baixa tolerância a este contaminante exibida pelos catalisadores tradicionais torna o seu uso desafiador, principalmente em médias temperaturas. Catalisadores de metais nobres podem ser uma alternativa para estas condições, uma vez que geralmente são ativos para a reação WGS e mais tolerantes ao envenenamento por enxofre [2]. Neste contexto foram estudados catalisadores contendo platina ou ouro como fase ativa suportados em céria, zircônia e em seus óxidos mistos.

Os suportes de óxido misto foram preparados por co-precipitação e a adição da fase ativa foi realizada pelo método de impregnação seca para a platina (1%) e por deposição-precipitação para o ouro (2,5 %). Os catalisadores foram caracterizados por fisissorção de nitrogênio, EDX, DRX, XPS e DRIFTS. A reação foi realizada em um reator de leito fixo e conduzida em etapas sequenciais a 300°C para avaliar 1) A estabilidade durante a reação livre de enxofre 2) a tolerância ao enxofre dos catalisadores e 3) a capacidade de recuperação da atividade catalítica após a remoção de H₂S da corrente. A composição do gás de alimentação foi de 5%H₂, 15%CO, 5%CO₂ e 20%H₂O, com adição de 50 ppm de H₂S para condição contaminada. O balanço foi realizado com N₂ para todas as etapas.

Os testes catalíticos mostraram que o efeito do suporte na atividade dos catalisadores variou conforme a fase ativa. Para os catalisadores de platina, os óxidos mistos apresentaram maior atividade em comparação aos suportes de óxidos puros de céria e zircônia, resultando na seguinte ordem de atividade na condição livre de enxofre: Pt/Ce_{0,75}Zr_{0,25}O₂ > Pt/Ce_{0,25}Zr_{0,75}O₂ > Pt/CeO₂ > Pt/ZrO₂. Já para a série de ouro, não houve uma tendência clara em relação à composição do suporte, com a seguinte ordem de atividade: Au/ZrO₂ > Au/Ce_{0,75}Zr_{0,25}O₂ > Au/CeO₂ > Au/Ce_{0,25}Zr_{0,75}O₂.

Quanto ao efeito do envenenamento por enxofre, o comportamento dos catalisadores também foi influenciado pela fase ativa. Para os catalisadores de platina, a maior taxa de desativação foi observada no Pt/CeO₂ (49%), enquanto os catalisadores contendo zircônia apresentaram taxas de desativação entre 22% e 28%. A zircônia também favoreceu a recuperação da atividade catalítica, já que todos os três catalisadores conseguiram restaurar sua atividade apenas com a remoção do H₂S da corrente de alimentação, indicando desativação reversível. Os catalisadores de ouro contendo céria sofreram desativação quase total, e o Au/ZrO₂ apresentou uma taxa de desativação de 87%, sugerindo uma interação mais forte do H₂S com a fase ativa do que para a platina, já que nenhum catalisador baseado em ouro recuperou sua atividade catalítica.





Niterói, RJ. 10 e 11 de abril de 2025

OLIGOMERIZAÇÃO DE 1-BUTENO CATALISADA POR ZSM-5 DESSILICADA

Daiane O. de S. Cavalieri¹, Zilacleide da S. B. Sousa¹, Cristiane A. Henriques^{1,*}.

¹ PPGEQ, Instituto de Química, Universidade do Estado do Rio de Janeiro (UERJ), Rio de Janeiro, RJ, Brasil.

* Email: daianesatana.gui@gmail.com

A oligomerização de olefinas é uma alternativa promissora para a produção de combustíveis livres de enxofre e menos poluentes, além de permitir o aproveitamento de frações olefinicas com menor valor, provenientes de processos como FCC, coqueamento retardado, MTO e Fischer-Tropsch. A oligomerização oferece vantagens em termos de seletividade e controle da distribuição dos produtos, sendo as zeólitas com estrutura MFI (ZSM-5), amplamente utilizadas devido às suas propriedades ácidas e estruturais favoráveis. Nesse contexto, este trabalho investigou a oligomerização de 1-buteno, a 200 °C e 300 °C, catalisada por HZSM-5 comercial na sua forma original e dessilicada sob diferentes condições. A zeólita precursora foi recebida na forma amoniaca NH₄ZSM-5 (razão molar SiO₂/Al₂O₃ = 30) e foi convertida à forma ácida por tratamento térmico a 500 °C, sob corrente de N₂ (50 mL min⁻¹) por 4,5 horas. A hierarquização da estrutura da zeólita por dessilicção pós-síntese realizada sob diferentes condições para estudar seus efeitos na atividade catalítica, estabilidade e seletividade dos produtos. Os catalisadores resultantes foram nomeados D-ZSM-5(1) e D-ZSM-5(2). Os ensaios catalíticos foram conduzidos em uma unidade automatizada (Microactivity Reference – PID Eng&Tech), sob pressão atmosférica, utilizando 1-buteno comercial (mistura com 20% de 1-buteno e N₂ como gás de balanço), nas temperaturas de 200 ou 300 °C e com um tempo espacial de 0,291 h. A análise dos efluentes do reator foi feita por cromatografia em fase gasosa em um cromatógrafo Agilent GC7890. A caracterização das zeólitas estudadas mostrou que a dessilicção não comprometeu a estrutura da zeólita, mas alterou suas propriedades ácidas e texturais. Nos testes catalíticos, a temperatura foi de extrema relevância na distribuição dos produtos. Em todas as condições avaliadas, observou-se a rápida isomerização esquelética e da dupla ligação do 1-buteno, deste modo a conversão foi definida a partir da quantidade total de butenos transformada em outros hidrocarbonetos ($X = ((1-C_4^=)_0 - (\Sigma C_4^=))/(1-C_4^=)_0$). Na temperatura de 200 °C, predominou a dimerização de butenos, formando especialmente da fração C₈. Dentre as amostras dessilicadas, a D-ZSM-5(1) foi a mais seletiva para oligômeros de maior massa molecular. O aumento da temperatura favoreceu a conversão dos butenos e a estabilidade da zeólita, no entanto produtos de craqueamento passaram a ser observados. Os tratamentos empregados para a geração de mesoporos não só otimizaram a reação de oligomerização, mas também influenciaram a seletividade dos produtos formados.





Niterói, RJ. 10 e 11 de abril de 2025

DESEMPENHO DO CATALISADOR RuCo/NANO- γ -Al₂O₃ NA REAÇÃO DE FISCHER-TROPSCH

Ricardo L. S. Júnior^{1,2}, Fellipe S. Pereira^{1,2}, Marco A. S. Garcia^{2,3}, João M. A. R. de Almeida^{1,2}, Pedro N. Romano^{2,3,4,*}

¹Instituto de Química, UFRJ, Rio de Janeiro, RJ, Brasil.

²LIPCAT (Laboratório de Intensificação de Processos e Catálise), UFRJ, Rio de Janeiro, RJ, Brasil.

³Programa de Engenharia em Nanotecnologia, COPPE, UFRJ, Rio de Janeiro 21941-972, RJ, Brasil.

⁴Campus Duque de Caxias, UFRJ, Rio de Janeiro 25245-390, Brasil.

*pedroromano@iq.ufrj.br

A reação de Fischer-Tropsch é um processo industrial de grande relevância para a produção de hidrocarbonetos a partir de gás de síntese (comumente na proporção de H₂:CO igual a 2:1), utilizando cobalto como fase ativa catalítica. Dada a importância deste processo, foi sintetizada nano- γ -Al₂O₃ como suporte catalítico. O suporte foi obtido por meio da metodologia sol-gel. O catalisador de Co e Ru suportado em nano- γ -Al₂O₃ foi preparado pela técnica de impregnação por excesso de solvente, visando obter uma composição de 20% de cobalto e 0,1% de rutênio. A caracterização do catalisador foi realizada por difração de raios X (DRX), fisissorção de nitrogênio (BET), redução à temperatura programada (TPR) e microscopia eletrônica de varredura (MEV). Os testes catalíticos foram conduzidos a 220 °C, com razão H₂/CO de 2:1 sob pressão de 20 bar. A caracterização estrutural por DRX indicou que o suporte de nano- γ -Al₂O₃ apresenta estrutura amorfa. Após a impregnação, foram identificados picos de difração correspondentes à presença de óxido de cobalto, com reflexões nos ângulos 2 θ de 31,3°, 36,9°, 45,0°, 59,4° e 65,3°, associados aos planos cristalográficos (220), (311), (400), (511) e (440), respectivamente. Os experimentos de TPR revelaram dois picos de redução: o primeiro, a aproximadamente 300 °C, atribuído à redução do cobalto bulk; e o segundo, em torno de 490 °C, relacionado à redução de cobalto com forte interação com o suporte. A análise morfológica por MEV indicou que o suporte de nano- γ -Al₂O₃ apresenta morfologia variada e dimensão significativa (551,7 μ m), mantendo características amorfas. Após a impregnação, observou-se uma distribuição desuniforme das fases ativas, com formação de aglomerados de tamanhos reduzidos e morfologias indefinidas sobre a superfície do óxido. Os testes catalíticos foram realizados com espaçamento volumétrico (GHSV) de 5,4 L.g⁻¹.h⁻¹ e 10,8 L.g⁻¹.h⁻¹. O catalisador RuCo/nano- γ -Al₂O₃ operando com GHSV de 10,8 L.g⁻¹.h⁻¹ apresentou conversão estável de aproximadamente 8% ao longo do tempo de reação. Com a redução do GHSV para 5,4 L.g⁻¹.h⁻¹, a conversão aumentou para 19%. Em relação à seletividade, sob GHSV de 10,8 L.g⁻¹.h⁻¹, obteve-se 91,3% de seletividade para produtos C₅⁺, distribuídos em 22% para gasolina, 10,5% para querosene, 13,4% para diesel e 44,2% para ceras. A redução do GHSV resultou em 86,6% de seletividade para C₅⁺, com 23% para gasolina, 14% para querosene, 22% para diesel e 26,4% para ceras. Os resultados indicam que a redução da velocidade espacial favorece a conversão do gás de síntese e altera a distribuição dos produtos, sugerindo um impacto significativo das condições operacionais na performance catalítica do sistema RuCo/nano- γ -Al₂O₃ na reação de Fischer-Tropsch.





Niterói, RJ. 10 e 11 de abril de 2025

Sustainable Assessment of a Fully Integrated CO₂ Methanation Process with a Ni/Al₂O₃ Catalyst

Gomes, J. N.¹, Pobleto, I. B. S.¹, Romano, P. N.¹, de Almeida, J. M. A. R.^{1,2*}

¹ Process Intensification and Catalysis Laboratory, Federal University of Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, Brazil

² Chemistry Institute, Federal University of Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, Brazil

*Email: j.monnerat@iq.ufrj.br

The utilization of carbon dioxide (CO₂) has attained increasing attention as a sustainable approach to mitigating greenhouse gas emissions (GHG). Among CO₂ utilization technologies, CO₂ methanation has emerged as an efficient process for converting CO₂ into methane (CH₄) through catalytic hydrogenation. This reaction, known as the Sabatier reaction, not only contributes to CO₂ valorization but also enables the production of substitute natural gas (SNG), which can be integrated into existing energy and gas distribution infrastructures. In this study, a fully energy and heat integrated CO₂ methanation plant was simulated in process simulator Aspen HYSYS v.14, employing a Ni/Al₂O₃ catalyst. The reactor was designed to operate at 210°C, 20 bar, with a feed flow rate of 120 NLh⁻¹g cat⁻¹, an inlet H₂/CO₂ ratio of 4:1 and a recycle ratio of 70%. The produced methane was purified using a DD3R membrane unit. An evaluation of equilibrium, Gibbs, and plug flow reactors was performed and the results were compared with literature data. Heat integration was applied to optimize energy consumption by pre-heating the feed. The hydrogen compressor was identified as the most energy intensive step. While recycling the reactor product increased the overall energy consumption, the gain in the methane yield justified this additional compression step. The equilibrium reactor demonstrated higher accuracy in reproducing CO₂ conversion and product composition compared to gibbs reactor. Additionally, methane purification via membrane separation unit increased the energy intensity of the process, highlighting the trade-off between upgrading to methane commercial standards and energy efficiency.





Niterói, RJ. 10 e 11 de abril de 2025

Sustainability Assessment of Fully Integrated Dry Methane Reforming using Ni-CeO₂/MgAl₂O₄ Catalyst

Silva, P.H.B.¹, Sousa, J.N.B.¹, Pobleto, I. B. S.¹, Romano, P. N.¹,
de Almeida, J. M. A. R.^{1,2*}

¹ Process Intensification and Catalysis Laboratory, Federal University of Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, Brazil

² Chemistry Institute, Federal University of Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, Brazil

*Email: j.monnerat@iq.ufrj.br

Conventional hydrogen production processes are highly intensive in water consumption, energy demand, and CO₂ emissions. Dry Methane Reforming (DMR) presents a viable alternative for syngas production by utilizing CO₂ as raw material, eliminating water usage, and offering potential electrification opportunities. This study focuses on the process simulation of a fully integrated DMR plant using Aspen Hysys, employing a Ni-CeO₂/MgAl₂O₄ catalyst in a plug flow reactor (PFR) with a heterogeneous catalytic reaction set, operated at 2600kPa, 900 °C and gas hourly space velocity (GHSV) constant at 3000 h⁻¹. The selected Ni-CeO₂/MgAl₂O₄ catalyst exhibits high thermal stability, resistance to carbon deposition, and excellent catalytic activity for DMR. A comprehensive sustainability assessment was conducted using multiple metrics and a multi-criteria approach to evaluate the environmental, economic, and process efficiency impacts across the production chain and product utilization. The GREENSCOPE methodology was applied in a "gate-to-gate" analysis, utilizing a set of indicators to measure sustainability performance. The results of the DMR process demonstrated significant improvements in sustainability metrics. Notably, the results indicated a substantial reduction in water consumption, high mass efficiency, and an optimized Global Warming Potential (GWP) associated with hydrogen production. Additionally, the full integration of DMR technology showed strong potential for electrification through renewable energy sources, further decreasing the CO₂ footprint and enhancing overall process sustainability. Furthermore, its compatibility with renewable electricity strengthens its role in the transition to a low-carbon hydrogen economy. Future work should focus on process optimization, catalyst durability, and large-scale implementation to maximize its industrial feasibility and environmental benefits.





6º Encontro de
Catálise
Regional 2
RJ, MG e ES – 2025



SBCAT
SOCIEDADE BRASILEIRA DE CATÁLISE

SÍNTESE E CARACTERIZAÇÃO DE CATALISADORES





Niterói, RJ. 10 e 11 de abril de 2025

SÍNTESE E CARACTERIZAÇÃO DE ZEÓLITAS HZSM-5 CRISTALINA E EMBRIONÁRIA IMPREGNADAS COM Ni E Ru PARA APLICAÇÃO EM CONVERSÃO DE CO₂

Ana Luísa A. Simões,¹ Larissa G. Souza,^{2*} Joyce R. Oliveira,² Robson G. S. Filho,¹ Amanda C. P. Guimarães,³ Leandro V. Pontual,⁴ Ludmila P. C. Silva,⁴ Fabio B. Passos,⁴ Lisiane V. Mattos,⁴ Maria Helena Araujo¹, Sara S. Vieira²

¹Universidade Federal de Minas Gerais, Instituto de Ciências Exatas - Departamento de Química. Belo Horizonte – MG

²Universidade Federal Fluminense, Instituto de Química, Departamento de Química Inorgânica. Niterói- RJ

³Universidade Estadual do Rio de Janeiro, Departamento de Engenharia Química, Rio de Janeiro-RJ

⁴Universidade Federal Fluminense, Departamento de Engenharia Química, Niterói- RJ

e-mail: aninhaasimoes@yahoo.com.br, lgsouza@id.uff.br e sarsilveira@id.uff.br

A hidrogenação de CO₂ a metano apresenta uma possibilidade promissora para a conversão de CO₂ em produtos de maior valor agregado, para a qual diversos catalisadores têm sido testados, entre eles compostos suportados em materiais com áreas superficiais maiores e sítios ativos mais acessíveis. Assim, esse trabalho objetiva a síntese de zeólitas do tipo ZSM-5 impregnadas com níquel e rutênio para aplicação na metanação do CO₂. Foram sintetizadas zeólitas cristalinas (c) e embrionárias (e) com razão Si/Al = 50. Esses materiais foram então impregnados com 5% de Ni e 2,5% de Ru, originando as amostras 5NiZ50e, 5NiZ50c, 2,5RuZ50e e 2,5RuZ50c. As amostras foram caracterizadas por técnicas físico-químicas e aplicadas como catalisadores na reação de hidrogenação de CO₂. Os catalisadores foram inicialmente reduzidos em atmosfera de H₂ a 500 °C por 1 hora, e as reações foram realizadas a 400 °C, com fluxo total de gás de 100 mL min⁻¹ e razão de H₂:CO₂ de 4:1. As análises de DRX mostraram que as zeólitas mantiveram suas estruturas características, apresentando também picos relativos a NiO e RuO₂, indicando que a impregnação ocorreu conforme desejado. As análises de fisissorção de N₂ demonstraram que a introdução dos metais provocou alteração nas propriedades texturais das zeólitas, reduzindo a área superficial nas zeólitas embrionárias e tornando as zeólitas cristalinas mais mesoporosas. Para as amostras impregnadas com níquel, as conversões para CO₂ foram similares para ambas as zeólitas (23% para 5NiZ50e e 22% para 5NiZ50c). Entretanto, a zeólita embrionária apresentou maior valor de seletividade para CH₄ (83% para 5NiZ50e e 73% para 5NiZ50c). Por outro lado, nas amostras impregnadas com rutênio, a conversão da zeólita cristalina (40%) foi bem superior à da zeólita embrionária (14%), e ambas apresentaram seletividade próxima de 90% para CH₄. Este estudo demonstra, portanto, que os catalisadores são promissores para a metanação de CO₂, apresentando alta seletividade para CH₄, observada principalmente para as amostras impregnadas com rutênio.





Niterói, RJ. 10 e 11 de abril de 2025

EFEITO DA INCORPORAÇÃO DE ZN, GA E MG EM MATERIAIS TIPO HIDROTALCITA COM FE NA DESIDROGENAÇÃO OXIDATIVA DE PROPANO

Gabriel Alberto S. Nunes¹, Fátima M. Z. Zotin¹, Luz Amparo Palacio¹

¹Universidade do Estado do Rio de Janeiro, nunes.gabriel@graduacao@uerj.br.

O propeno é o segundo mais importante produto petroquímico, cuja demanda crescente não é atendida pelos processos de craqueamento a vapor e craqueamento catalítico fluidizado, já implementados na indústria. A desidrogenação oxidativa do propano assistida por CO₂ (CO₂-DHOP) é uma rota alternativa. O uso de CO₂ apresenta duas vantagens, ele é um oxidante leve e não conduz à oxidação total do propano e propeno, e é um gás de efeito estufa que pode ser usado a partir da captação de emissões de fontes fixas. Os hidróxidos duplos lamelares (HDL) são formados por lamelas de hidróxidos metálicos mistos positivamente carregados e compensados por ânions presentes entre as lamelas, também constituídas por água. Os óxidos oriundos dos HDL apresentam alta estabilidade térmica e área específica elevada. Neste trabalho o método da coprecipitação com controle de pH foi utilizado para sintetizar os HDL como precursores de catalisadores contendo Zn, Mg, Al, Ga e Fe. Precursores e catalisadores foram caracterizados e testados na reação de CO₂-DHOP. Os resultados de difração de raios X (DRX) e FTIR dos precursores apontaram a presença da fase hidrotalcita em todos os materiais. A análise química (ICP-OES) mostrou que a fração de ferro incorporada no sólido foi praticamente igual à esperada. Os resultados de DRX in situ mostraram a decomposição da fase de hidrotalcita aos 200 °C e a cristalização da fase de ZnO a partir dos 400 °C no sistema Zn-Al-Fe. Os valores de área específica variaram entre 32 e 218 m²/g, sendo o maior para o Mg-Al-Fe, e o menor para Zn-Ga-Fe. O MEV dos catalisadores com Zn apresentou morfologia mais definida que dos outros sistemas. O DRX dos catalisadores exibiu picos de Zn(FeO₂)₂ e ZnO para o sistema Zn-Al-Fe, e MgO para o Mg-Al-Fe. Nos testes catalíticos, o catalisador Zn-Al-Fe apresentou a maior conversão de propano (30,8%) e seletividade a propeno (51,7%), resultando em uma produção de propeno de 0,94 mol de propano/(kgcatalisador h). Após a reação os catalisadores foram submetidos a análise de DRX. Os resultados indicaram a formação de magnetita no sistema Zn-Fe-Ga, enquanto as fases ZnO e MgO continuaram presentes nos outros catalisadores. O FTIR pós reação apontou a presença de água e compostos carbonáceos, especialmente no catalisador contendo Mg. O TGA mostrou ganho de massa para as amostras Ga e Zn e a amostra de Mg apresentou uma perda maior de massa até 800 °C coerente com a queima de material carbonáceo.





Niterói, RJ. 10 e 11 de abril de 2025

DESENVOLVIMENTO DE CATALISADOR NÚCLEO-CASCA DE CO@SiO₂ MESOPOROSO APLICADO À SÍNTESE DE FISCHER-TROPSCH

Caroline Barbosa Reis, Maria Auxiliadora Baldanza, Neuman Solange de Resende, Vera Maria Martins Salim¹,

¹*vera@peq.coppe.ufrj.br*

A produção de diferentes frações de hidrocarbonetos via Síntese de Fischer-Tropsch (SFT) readquire relevância significativa diante do novo cenário mundial que exige rotas alternativas para produção de combustíveis e lubrificantes limpos com redução das emissões de CO₂ e baixo impacto ambiental. Catalisadores com novas morfologias, como tipo núcleo-casca, podem representar uma contribuição para intensificação deste processo, uma vez que potencialmente minimizam os fenômenos de desativação via sinterização da fase ativa e possibilitam um maior controle da seletividade através do ajuste das propriedades texturais e espessura da casca (Smarzaro *et al.*, 2020; Xie *et al.*, 2011, 2012, 2014). Este trabalho apresenta a síntese, a caracterização e uma avaliação comparativa entre um catalisador tipo núcleo-casca, Co@SiO₂, e um catalisador de cobalto impregnado em sílica mesoporosa, Co/SiO₂, tomado como padrão. O catalisador encapsulado Co@SiO₂ foi sintetizado via método solvotérmico e de Stöber enquanto o catalisador de Co/SiO₂ via impregnação incipiente. A caracterização do precursor Co₃O₄@SiO₂ por microscopia eletrônica de transmissão demonstrou o sucesso da síntese, sendo observada a correta morfologia da casca, com núcleos centralizados e uniformes (~25 nm) e casca com espessura média de 13,6 nm. A análise textural mostrou que os dois catalisadores são mesoporosos, com diâmetros médios de poro de 14,8 nm (encapsulado) e 15,8 nm (impregnado), e superfícies específicas de 107 m² g⁻¹ e 209 m² g⁻¹, respectivamente. Os precursores com teores metálicos de 11,7 % Co/SiO₂ e 23,6 % Co@SiO₂ foram identificados como espinélio cúbico Co₃O₄, com tamanho do cristalito do óxido de cobalto de 16,5 nm (Co/SiO₂) e 17,1 nm (Co@SiO₂). Ademais, mostraram redutibilidades semelhantes, sendo 76 % e 80 %, respectivamente. Na avaliação do desempenho catalítico, conduzida a 210 °C, 2 MPa e razão H₂:CO = 2, 30 mL min⁻¹, os catalisadores encapsulado e impregnado apresentaram, respectivamente, conversões de CO próximas, 18 % e 15 %, seletividades a C5-C29 de 99,6 % e 96,4 % e baixa formação de metano, 0,3 % e 1,4 %. Os dois catalisadores foram mais seletivos à fração C19-C24, própria de óleos lubrificantes, sendo que o catalisador núcleo-casca Co@SiO₂ evidenciou expressiva seletividade nesta faixa (87,2 %) em comparação ao impregnado (55,3 %), mostrando o potencial de ajuste da seletividade proporcionada pela morfologia núcleo-casca.





Niterói, RJ. 10 e 11 de abril de 2025

ÓXIDOS MISTOS DE LANTÂNIA E CÉRIA COMO CATALISADORES PARA O ACOPLAMENTO OXIDATIVO DE METANO

Tomás G. Quintanilha¹, Ludmila de P. C. Silva¹, Carlos A. Ortiz-Bravo^{1*}.

¹ Universidade Federal Fluminense – UFF, Niterói, RJ, Brasil. *E-mail: carlosortiz@id.uff.br

A produção de gás natural (GN) no Brasil ocorre principalmente *offshore*, mas limitações no transporte resultam na queima do excedente e emissão de CO_x. Para mitigar isso, a conversão *in situ* do GN em produtos de maior densidade ou químicos de valor agregado é uma solução promissora. O Acoplamento Oxidativo do Metano (OCM) permite a produção de etileno, essencial para a indústria petroquímica, mas enfrenta desafios de rendimento. Óxidos de terras raras, como CeO₂ (alta reatividade) e La₂O₃ (alta seletividade), são estudados como catalisadores, e sua combinação tem sido proposta para otimizar o rendimento do processo. Neste trabalho, os catalisadores Na-CeO₂, Na-La_{0,5}Ce_{0,5}O_{2-δ} e Na-La₂O₃ (todos com 6% em massa de Na) foram sintetizados pelo de Pechini e caracterizados por DRX, fisissorção de N₂, H₂-TPR, e espectroscopias UV-Vis e DRIFTS. Na-CeO₂, Na-La_{0,5}Ce_{0,5}O_{2-δ} exibem picos de difração associados à fase CeO₂ (ICSD 028709), sem presença de fases segregadas. As reflexões do catalisador Na-La_{0,5}Ce_{0,5}O_{2-δ} se deslocam para ângulos 2θ menores, sugerindo a expansão da célula unitária pela dopagem substitutiva do Ce⁴⁺ octaédrico (raio iônico ≈ 0,97 Å) pelo La³⁺ (raio iônico ≈ 1,16 Å). O catalisador Na-La₂O₃ exibe reflexões associadas à fase La(OH)₃ (ICSD 200090), resultante da interação do La₂O₃ com a umidade do ambiente. O tamanho médio do cristalito foi calculado usando a Equação de Scherrer nas reflexões (111), (220) e (311), resultando em 38 e 25 nm para Na-CeO₂, Na-La_{0,5}Ce_{0,5}O_{2-δ}, respectivamente. No catalisador Na-La₂O₃ foram usadas as reflexões (100), (110) e (101) da La(OH)₃, resultando no valor de 26 nm. Os dados de fisissorção de N₂ mostram que os catalisadores são macroporos e de baixa área específica (< 10 m²/g). Os perfis de H₂-TPR mostram dois picos de redução: em 445 e 860 °C para os catalisadores Na-CeO₂, Na-La_{0,5}Ce_{0,5}O_{2-δ}, e em 680 e 970 °C para o Na-La₂O₃, mostrando que a presença de Ce aumenta a disponibilidade de oxigênio estrutural reativo em temperaturas menores. Na-CeO₂, Na-La_{0,5}Ce_{0,5}O_{2-δ} exibem bandas Raman em ~580 e ~465 cm⁻¹ associadas às vibrações F_{2g} e O_v da CeO₂. A razão de intensidades O_v/F_{2g} é maior no Na-La_{0,5}Ce_{0,5}O_{2-δ}, sugerindo a introdução de vacâncias de oxigênio pela dopagem com La³⁺. Na-La₂O₃ exibe unicamente bandas Raman associadas à fase La(OH)₃ de acordo com os resultados de DRX. A energia de *band gap* foi calculada usando o gráfico de Tauc, resultando em 3,3, 3,4 e 5,5 eV para Na-CeO₂, Na-La_{0,5}Ce_{0,5}O_{2-δ} e Na-La₂O₃, respectivamente. Este pode indicar um aumento da atividade catalítica da La₂O₃ pela dopagem com Ce para a ativação do metano, uma vez que facilita a transferência de elétrons do orbital de valência 2p do O²⁻ para os orbitais de condução 5d ou 4f do La³⁺. Finalmente, a espectroscopia DRIFTS mostra que durante a dessorção de metano ocorreu formação de radicais metil no Na-La_{0,5}Ce_{0,5}O_{2-δ}, requeridos, segundo mecanismos de reação publicados na literatura, para acoplar depois na fase gasosa em eteno.





Niterói, RJ. 10 e 11 de abril de 2025

SÍNTESE E CARACTERIZAÇÃO DE DIFERENTES ESTRUTURAS DE CATALISADORES DE NÍQUEL-SÍLICA PARA A METANAÇÃO DE CO₂

Clara Vilela Weikert^{1,2}, Marcia Araque², Benjamin Katryniok², Fábio Bellot Noronha^{2,3}, Fabio Souza Toniolo^{1*}

¹ Universidade Federal do Rio de Janeiro, NUCAT/PEQ/COPPE/UFRJ, Rio de Janeiro, Brasil.

² Université de Lille, Centrale Lille, Unité de Catalyse et Chimie du Solide – UCCS, Lille, França

³ Instituto Nacional de Tecnologia, Divisão de Catálise, Biocatálise e Processos Químicos, Rio de Janeiro, Brasil

* toniolo@peq.coppe.ufrj.br

Uma abordagem atrativa para a utilização do CO₂ é a sua conversão em metano por meio da reação de metanação. No entanto, desafios como a sinterização da fase ativa, a formação de coque e a baixa seletividade para metano em catalisadores de níquel são barreiras para seu uso em larga escala. Diversas estratégias têm sido exploradas para aprimorar o desempenho catalítico, incluindo o design de novos materiais com diferentes estruturas e morfologias, bem como o emprego de distintas técnicas de síntese. Nesse contexto, este trabalho investiga o desenvolvimento de catalisadores à base de níquel-sílica, sintetizados pelo método de microemulsão água-em-óleo combinado com o método Stöber modificado. O estudo avalia o impacto das variações nas condições de síntese sobre a estrutura dos materiais e seu desempenho catalítico na metanação do CO₂. Dois catalisadores foram preparados utilizando essa abordagem: o catalisador RING, sintetizado via microemulsão convencional, e o catalisador SPHERE, obtido por meio de modificações na etapa de aquecimento e na ordem de adição dos reagentes durante a microemulsão. Os materiais foram caracterizados por FRX, TEM, EDS e TPR, e avaliados na hidrogenação do CO₂ a 300 °C, 1 atm, com uma razão H₂:CO₂ de 4:1 e um GHSV de 120.000 mL·gcat⁻¹·h⁻¹. As imagens de microscopia revelaram que o catalisador RING apresenta uma morfologia semelhante a uma casca oca, caracterizada por uma camada externa visível envolvendo um núcleo vazio, com nanopartículas de níquel distribuídas ao longo da estrutura. Em contraste, o material SPHERE exibe uma arquitetura esférica bem definida, com nanopartículas de níquel uniformemente dispersas. As análises de EDS revelaram que as "esferas ocas" do catalisador RING possuem, na realidade, uma morfologia em formato de "rosquinha", sugerindo a formação de estruturas de nanoanéis. Até o momento, nenhuma explicação para a formação dessas estruturas foi encontrada na literatura, embora sua origem possa estar relacionada às diferenças nos complexos precursores formados durante a síntese. Na reação, os catalisadores RING e SPHERE apresentaram taxas de formação de metano semelhantes, com valores de 6,18 e 6,17 mmolCH₄/gNi·min, respectivamente. Essa semelhança pode ser atribuída à semelhança nos tamanhos das partículas de Ni (2,1–2,8 nm) e aos valores comparáveis de TOF (~1,5 × 10⁻² s⁻¹), uma vez que a metanação de CO₂ é uma reação sensível à estrutura, e o níquel atua como a fase ativa. Apesar de não apresentar influência para esta reação em específico, esses novos catalisadores abrem caminho para aplicações em outras reações catalíticas, nas quais materiais à base de níquel-sílica podem ser altamente relevantes.





Niterói, RJ. 10 e 11 de abril de 2025

EFEITO DAS CONDIÇÕES REACIONAIS NAS PROPRIEDADES DOS NANOTUBOS DE CARBONO

Hugo Alvarenga Oliveira*¹, Pedro Augusto Reis¹, Fabio Barboza Passos¹

*¹Rua Passos da Pátria, 156, São Domingos, Niterói, Universidade Federal Fluminense, Escola de Engenharia, Bloco E, sala 231. * hugoao@id.uff.br*

Nanotubos de carbono apresentam um amplo potencial de aplicações devido suas propriedades físicas e químicas. Na área ambiental são aplicados como precursores de materiais adsorventes e em catálise heterogênea são usados como suporte catalítico¹. As propriedades dos nanotubos são reflexo de sua estrutura como comprimento, diâmetro interno e externo, número de paredes, quiralidade e grau de grafitação de sua estrutura. Dessa maneira, nanotubos com diferentes características foram produzidos usando etileno como fonte de carbono em diferentes condições reacionais. Técnicas como microscopia eletrônica de varredura e transmissão, espectroscopia Raman, oxidação a temperatura programada e condutividade elétrica foram usadas para a caracterização dos tubos. A morfologia dos tubos sofreu grande influência da variação de temperatura reacional e da etapa de ativação catalítica. A variação da pressão parcial de etileno e do tempo reacional apresentaram menor impacto nas morfologias dos tubos. O aumento da temperatura reduziu a quantidade produzida e melhorou a qualidade estrutural dos tubos. A etapa de ativação catalítica também afetou fortemente a produção e a morfologia dos tubos. O catalisador previamente reduzido apresentou menor produção e menor diâmetro externo e número de paredes. A redução da pressão parcial de etileno na etapa reacional apresentou maior impacto na produção dos tubos. Quanto menor a pressão parcial menor foi a produção. A pressão parcial parece afetar também o diâmetro externo dos tubos sintetizados a pressões parciais menores apresentam diâmetro externo e número de paredes maiores. Em relação à estrutura dos tubos parece não haver variação significativa em sua cristalinidade. A etapa de purificação dos nanotubos de carbono aumentou o número de defeitos em suas estruturais. Isto fez com que a resistividade dos tubos aumentasse devido ao aumento da resistividade intrínseca dos tubos. Contudo, tubos com maior grau de defeitos estruturais apresentaram maior resistividade. Isto indica que resistividade intrínseca dos tubos não é o fator de maior importância para obter menor resistividade das amostras. Deste modo, apontamos a resistência de contato entre os tubos como o provável fator majoritário na resistividade das amostras. Assim, o estudo da camada externa dos tubos é de grande importância. Neste trabalho, foi encontrado que o aumento do diâmetro da camada externa diminui a resistividade das amostras. Esse efeito pode ser derivado da maior área de contato entre os tubos e maior característica sp^2 dos átomos de carbono facilitando a transferência de elétrons entre os tubos.





Niterói, RJ. 10 e 11 de abril de 2025

NANOPARTÍCULAS DE ÓXIDO DE NIÓBIO DISPERSAS EM CARVÃO ATIVADO DE PET PARA A OXIDAÇÃO DO FUNGICIDA PROTIOCONAZOL

Janaina G. Eid¹, Natália R. Soares¹, Leandro G. Gutierrez^{1,2}, Cristian A. Ferretti², Pedro Lana Gastelois³, Patterson P. de Souza⁴, Jhonatan Bispo de Oliveira⁴, Luiz C. A. Oliveira¹, Cinthia C. Oliveira^{1*}

¹ Departamento de Química, Universidade Federal de Minas Gerais - UFMG, Av. Antônio Carlos 6627, Pampulha, 31270901 - Belo Horizonte, MG – Brasil.

² Grupo de Sínteses Orgânica e Materiais (GSOM), Laboratório Fester, Instituto de Química Aplicada del Litoral IQAL (UNL-CONICET), Santiago del Estero 2829, 3000, Santa Fe, Argentina.

³ Centro de Desenvolvimento da Tecnologia Nuclear (CDTN), Av. Antônio Carlos 6627, Pampulha, 31270901, Belo Horizonte, MG – Brasil.

⁴ Departamento de Química, Centro Federal de Educação Tecnológica de Minas Gerais, CEFET-MG, Av. Amazonas 5855, 30510-000 BH-MG, Brasil.

*cinthia.soares.castro@gmail.com

Compósitos (Nb/CA) baseados em nanopartículas de Nb₂O₅ dispersas sobre um carvão ativado (CA) obtido a partir de resíduos de PET foram utilizados como catalisadores para o tratamento de águas residuais. Os materiais foram sintetizados pelo método de mistura física entre o CA e um Nb₂O₅ comercial, seguido de tratamento com H₂O₂. Os “grupos peroxo” altamente oxidantes foram os sítios ativos criados após o tratamento do catalisador com H₂O₂. A molécula alvo utilizada para avaliar potencial catalítico do material foi um dos fungicidas mais utilizados mundialmente, o Protioconazol (PCZ). A avaliação catalítica para a remoção do contaminante da água ocorreu principalmente por adsorção na presença do CA e por processos combinados de adsorção/oxidação no caso dos compósitos Nb/CA e a análise do PCZ na água foi realizada por HPLC-UV. A caracterização dos catalisadores por XPS mostrou que a concentração atômica de Nb aumentou gradualmente com o aumento do teor de Nb nos compósitos Nb/CA, sendo de 0,5% (5Nb/CA), 0,9% (10Nb/CA) e 20,9% (Nb₂O₅-H₂O₂). A análise de fisissorção de N₂ a 77 K indicou que as isotermas se assemelham a curvas mistas do tipo Ib e IVa, o que indica que os materiais são micro-mesoporosos, e que o aumento da quantidade de Nb nos catalisadores reduziu a área superficial específica BET. Entretanto, as diferentes proporções mássicas de Nb de 5 e 10 % m/m nos catalisadores Nb/CA resultaram em um aumento significativo nas taxas de reação devido às propriedades de oxidação do Nb₂O₅ e os catalisadores apresentaram conversão completa do PCZ após 24 horas de reação. O mecanismo de reação é do tipo Mars Van Krevelen pelos grupos peroxo (sítios ativos) na superfície do Nb₂O₅. Vale ressaltar que os compósitos Nb/CA foram catalisadores altamente eficientes, tanto para a oxidação de PCZ quanto do seu principal metabólito (Protioconazol-destio) em meio aquoso, atestado pela análise ESI-MS.





Niterói, RJ. 10 e 11 de abril de 2025

Produção de eletrocatalisadores baseados em carbonos mesoporosos para a produção de Hidrogênio

Tiago Henrique Silva Madalena,¹ Luciano Andrey Montoro,² Ana Paula de Carvalho Teixeira,²

¹Universidade Federal de Minas Gerais, Instituto de Ciências Exatas - Departamento de Química. Belo Horizonte – MG
e-mail: tiagohsm@outlook.com

Este trabalho teve como objetivo a síntese e caracterização de eletrocatalisadores utilizando carbonos mesoporosos dopados com nitrogênio como suportes para fases ativas de óxidos mistos de nióbio e metais de transição (Cu, Mn e V). Esses materiais foram desenvolvidos para aplicações na eletrocatalise da dissociação da água para produção sustentável de H₂. A justificativa deste estudo reside na crescente demanda por combustíveis limpos e sustentáveis, impulsionada pela necessidade de reduzir as emissões de gases de efeito estufa e mitigar os impactos ambientais decorrentes do uso de combustíveis fósseis. Além disso, há um grande interesse na busca por eletrocatalisadores eficientes e de baixo custo que possam substituir materiais críticos, como metais nobres, atualmente utilizados em processos eletroquímicos. O desenvolvimento de novos materiais baseados em carbonos mesoporosos e óxidos mistos de nióbio oferece uma alternativa promissora, combinando alta atividade catalítica, estabilidade e acessibilidade, favorecendo a viabilidade tecnológica da produção de energia limpa e renovável. A síntese dos suportes foi realizada por um método livre de solvente, empregando resorcinol como fonte de carbono, melamina como fonte de nitrogênio tereftalaldeído como agente de reticulação, com o surfactante F127 como template. Os eletrocatalisadores foram obtidos por incorporação, in situ nos suportes, das fases ativas de óxidos mistos de nióbio e metais de transição, utilizando monoetilenoglicol como solvente e agente estabilizante. A mistura reacional foi submetida a tratamento hidrotérmico a 200 °C por 24 horas, seguida de centrifugação, lavagem e secagem. Os materiais finais foram tratados termicamente a 300 °C em atmosfera oxidante ou 800 °C em atmosfera inerte, sendo designados como CMXY, onde X representa os metais incorporados e Y a temperatura de tratamento final. Os resultados demonstraram que a incorporação de nitrogênio influenciou significativamente a estrutura porosa dos suportes, levando à formação de mesoporos e aumentando a dispersão das fases ativas. O desempenho eletrocatalítico foi avaliado para as reações de evolução de oxigênio (OER) e de hidrogênio (HER). Os materiais obtidos utilizando manganês se destacaram, sendo que, o composto tratado a 300 °C, CMMn3 exibiu uma atividade catalítica superior aos materiais de referência para a OER, apresentando sobrepotencial de 110 mV para uma densidade de corrente de 10 mA.cm⁻². Além de uma atividade considerável para a HER. e manteve estabilidade por 6 horas a uma densidade de corrente de 50 mA cm⁻².





Niterói, RJ. 10 e 11 de abril de 2025

CONVERSÃO DE ETANOL A ÁLCOOIS C₄₊ UTILIZANDO CATALISADORES DE Mg_xAlO_y DOPADOS COM Cu E Ru

Gabriele F. Martins¹; Henrique P. Pacheco¹; Fabio S. Toniolo^{1*}

¹ Programa de Engenharia Química/COPPE/UFRJ, Universidade Federal do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, 21941-972

* toniolo@peq.coppe.ufrj.br

O objetivo deste trabalho é a síntese, caracterização e aplicação de catalisadores em unidade de bancada para beneficiamento do etanol a álcoois de cadeia C₄₊, com destaque para o 1-butanol (BuOH), utilizando óxidos mistos de Mg e Al, derivados de hidrotalcita, dopados com Cu e Ru. O catalisador foi escolhido para obter um equilíbrio entre acidez, basicidade e os metais para promover a desidrogenação do etanol. Os catalisadores foram obtidos a partir do método de coprecipitação a pH constante e os metais foram incorporados em fração mássica de 0,5 % por impregnação incipiente (Cu e Ru) e durante a coprecipitação (Cu). A caracterização dos catalisadores foi realizada com técnicas que incluem DRX, fisissorção de N₂, DRX *operando* com radiação síncrotron para identificar potenciais mudanças estruturais durante a reação, TPD NH₃ e CO₂, entre outras. Os testes catalíticos foram conduzidos em um reator de quartzo em formato de “U” de quartzo contendo 100 mg de catalisador, a 1 bar, nas temperaturas de 573 K, 623 K e 673 K. A corrente de alimentação consistia em He saturado com 5 % de etanol, fluindo a uma taxa de 25 cm³·min⁻¹ (GHSV = 0,25 cm³·mg⁻¹·min⁻¹). Os resultados de DRX *operando* do catalisador não impregnado confirmou a formação da fase cristalina MgO, típica de derivados de hidrotalcita, e demonstraram sua estabilidade estrutural durante a reação, sem variações na intensidade e posição dos picos. A avaliação catalítica dos materiais mostrou a formação de diversos produtos, incluindo produtos da desidratação do etanol, que é competitiva com a desidrogenação, sendo os principais produtos encontrados, acetaldeído, dietil éter, etileno e BuOH, com altas temperaturas favorecendo a formação de produtos de desidratação, enquanto em baixas temperaturas a formação de BuOH foi favorecida. Os materiais com Cu revelaram diferenças significativas na distribuição dos produtos a depender do método de síntese utilizada para a incorporação do Cu, mesmo apresentando valores de conversão próximos, em torno de 13 %. Em 573 K, o catalisador impregnado apresenta uma alta formação de acetaldeído (80 %) em detrimento da formação de BuOH (10 %), enquanto o catalisador coprecipitado apresenta 36 % de BuOH, 43 % de acetaldeído e uma formação de dietil éter de 12 %. O catalisador com Ru nas mesmas condições apresentou seletividade de 50 % para acetaldeído e 33 % para BuOH.





Niterói, RJ. 10 e 11 de abril de 2025

APLICAÇÃO DE CATALISADORES DERIVADOS DE MOF DE COBRE E ALUMÍNIO NA REAÇÃO DE REDUÇÃO DO NO PELO CO

Samara S. Montani¹, Luz Amparo Palacio¹, Fátima M. Z. Zotin¹

¹ *Universidade do Estado do Rio de Janeiro, samara.montani@uerj.br*

Este estudo investigou catalisadores baseados em estruturas metal-orgânicas (MOFs) de cobre (MIL-53) impregnados com alumínio em diferentes proporções e calcinação em atmosferas inerte e oxidante. O objetivo foi melhorar a redução catalítica seletiva de óxidos de nitrogênio (NO_x) usando monóxido de carbono (CO) como agente redutor. A pesquisa é relevante devido aos impactos ambientais e à saúde humana causados pela emissão de NO_x, gerada pela combustão de combustíveis fósseis, que contribui para problemas como smog, chuvas ácidas e destruição da camada de ozônio. A redução de NO_x com CO permite remover esses poluentes, mas em catalisadores automotivos pode gerar N₂O, um gás de efeito estufa. A proposta do estudo foi usar MOFs, materiais microporosos compostos por clusters inorgânicos ligados a ligantes orgânicos, conhecidos por sua grande área superficial e potencial para aplicações catalíticas. A metodologia incluiu caracterizações como difração de raios X (XRD), análise térmica (TGA/DTGA, DSC), fluorescência de raios X (XRF) e redução a temperatura programada com hidrogênio (H₂-TPR), além de testes catalíticos. A XRD confirmou que o precursor, denominado MOFCu, foi bem-sucedido, e que, sem alumínio ou com alumínio, as amostras calcinadas em atmosfera inerte apresentaram a fase de cobre metálico, enquanto em atmosfera oxidante, formaram-se as fases Cu₂O e CuO, independentemente da proporção de alumínio. A análise térmica mostrou que a decomposição da estrutura tereftalato ocorreu até 470 °C, e as amostras com alumínio decompueram os nitratos a cerca de 300 °C. A fluorescência de raios X revelou diferentes razões mássicas de Al/Cu nas amostras com alumínio (0,30 a 0,66). Nos testes de H₂-TPR, as amostras com alumínio mostraram um pico largo entre 180 °C e 350 °C, com a amostra 5Al/MOFCu apresentando maior consumo de H₂. Nos testes catalíticos, as amostras sem alumínio apresentaram desativação e desempenho inferior, especialmente em atmosfera oxidante. Já as amostras com alumínio mostraram melhor conversão de CO e maior estabilidade térmica, com desativação atenuada. Isso sugere que a adição de alumínio melhora a eficiência dos catalisadores na redução de NO_x, sem gerar N₂O em excesso, contribuindo para tecnologias mais sustentáveis no controle de poluentes atmosféricos.





Niterói, RJ. 10 e 11 de abril de 2025

DESENVOLVIMENTO E CARACTERIZAÇÃO DE CATALISADORES À BASE DE La_2O_3 E CeO_2 SUPOSTADOS EM SÍLICA PARA O ACOPLAMENTO OXIDATIVO DO METANO

ALM Wandermurem¹, RMAC Ribeiro¹, TG Quintanilha¹, RF Lacerda¹, Y Xing¹, ACSLS Coutinho¹, AAAS Silva^{1*}, CA Ortiz-Bravo¹, LPC Silva¹

¹ Universidade Federal Fluminense, Niterói 24210-240, Brasil

* Autor correspondente: e-mail: andressaandrade@id.uff.br

O trabalho tem como objetivo desenvolver e caracterizar catalisadores à base de La_2O_3 e CeO_2 suportados em sílica para aplicação na reação de acoplamento oxidativo do metano (OCM). Essa reação apresenta grande potencial na conversão direta de metano em hidrocarbonetos de maior valor agregado, como etano e etileno, sendo uma alternativa para o aproveitamento eficiente do gás natural. A justificativa para a escolha desses catalisadores baseia-se na alta seletividade do La_2O_3 para produtos C_2 e na alta atividade do CeO_2 de promover a conversão do metano devido à sua capacidade de armazenamento de oxigênio. Os catalisadores $\text{CeO}_2/\text{SiO}_2$, $\text{La}_2\text{O}_3/\text{SiO}_2$ e $\text{CeO}_2\text{-La}_2\text{O}_3/\text{SiO}_2$ foram sintetizados pelo método de impregnação úmida incipiente, utilizando precursores dos óxidos dissolvidos em água deionizada, seguidos de secagem e calcinação a 800°C . A caracterização foi realizada por diversas técnicas, incluindo difração de raios-X (DRX) para análise estrutural, espectroscopia de infravermelho (IV) e Raman para identificação de grupos funcionais e estrutura molecular, microscopia eletrônica de varredura (MEV) integrada à espectroscopia por energia dispersiva (EDS) para análise morfológica e composição elementar, além da espectroscopia de refletância difusa no UV-Vis para avaliação da energia de band gap dos materiais. Os resultados indicaram que a impregnação dos óxidos sobre a sílica foi bem-sucedida, e a análise de MEV demonstrou uma distribuição homogênea das partículas na superfície do suporte. As medidas de DRX não evidenciaram picos cristalinos de La_2O_3 e CeO_2 , sugerindo a formação de filmes finos dos óxidos sobre a sílica. A espectroscopia Raman confirmou a presença de vacâncias de oxigênio, fundamentais para a atividade catalítica, sendo mais acentuadas nos catalisadores contendo cério. Além disso, a energia de band gap dos catalisadores foi menor nos materiais contendo CeO_2 , favorecendo maior conversão do metano, enquanto o La_2O_3 apresentou valores que indicam maior seletividade para produtos C_2 . Conclui-se que os catalisadores estudados apresentam potencial para aplicação na OCM, sendo que a combinação de La_2O_3 e CeO_2 pode otimizar seletividade e conversão. Os resultados obtidos fornecem uma base para o desenvolvimento de novos materiais catalíticos visando maior eficiência e viabilidade industrial no aproveitamento do metano.





Niterói, RJ. 10 e 11 de abril de 2025

SÍNTESE E CARACTERIZAÇÃO DE HIDRÓXIDO DUPLO LAMELAR NiMgAl

Ariana Liporace Maia¹, Célia Regina Sousa da Silva¹, Priscila Tamiasso-Martinhon¹, Victor de Oliveira Rodrigues¹

¹Instituto de Química da Universidade Federal do Rio de Janeiro, arianaliporace@hotmail.com.

O consumo progressivo de produtos de petróleo, como por exemplo, hidrocarbonetos, tem conduzido o mercado global de catalisadores. A pesquisa acerca de novos precursores e/ou novas rotas de sínteses de compostos com propriedades particulares está associada aos avanços tecnológicos e as exigências sustentáveis do século XXI ^[1]. O conhecimento e domínio de técnicas sintéticas, na concepção desses novos materiais, são fundamentais e têm impulsionado pesquisadores a buscar soluções para os desafios encontrados. Nesta perspectiva, é possível destacar compostos multifuncionais, como os hidróxidos duplos lamelares (HDL's) ou compostos do tipo hidrotalcita (HT) devido a sua estrutura, composição química, custo razoável, baixa toxicidade e facilidade de obtenção. Os HDL's possuem água e espécies aniônicas entre as suas camadas, cuja função é estabilizar a carga elétrica da estrutura, sendo possível a troca do ânion por um outro mais estável. Essa propriedade possibilita várias aplicações para estes materiais, dentre elas, adsorventes de íons e gases, catalisadores, micro reservatórios de inibidores de corrosão e descontaminantes de efluentes ^[2]. O objetivo do presente trabalho é sintetizar e caracterizar o hidróxido duplo lamelar (HDL) NiMgAl, e estudar possibilidades de aplicações catalíticas. Os materiais sintetizados foram caracterizados quanto à composição química (ICP-OES), estrutura cristalina (difração de raios X), e estrutura local dos átomos presentes (espectroscopia no infravermelho, Raman e XPS). O sistema explorado foi o HDL NiMgAl como cátions, usando carbonato como ânion de compensação. Foi utilizado o método de co-precipitação a pH controlado ^[3]. Os resultados parciais indicaram que o perfil difratográfico obtido é compatível com o padrão característico de HDL reportado na literatura. A pesquisa se encontra em desenvolvimento e são necessárias mais análises de caracterização para consolidar a obtenção do HDL NiMgAl e seguir para as futuras possíveis aplicações. Com o presente trabalho espera-se promover um estudo exploratório que elucide o sistema proposto contendo o HDL NiMgAl, avaliando sua viabilidade e contribuição científica.





Niterói, RJ. 10 e 11 de abril de 2025

CATALISADORES À BASE DE FERRO DOPADOS PARA REAÇÕES DE HIDROGENAÇÃO DE CO₂.

Chayenne F. da Silva¹, Fábio B. Passos¹ e Carlos A. Ortiz-Bravo^{1*}.

¹ Universidade Federal Fluminense – UFF, Niterói, RJ, Brasil. *E-mail: carlosortiz@id.uff.br

O CO₂ pode ser convertido em hidrocarbonetos leves pela reação de deslocamento inverso gás-água (RWGS) combinada com a síntese Fischer-Tropsch (FTS). Catalisadores à base de ferro são usados por possuírem fases ativas para ambas as reações (Fe₃O₄ para RWGS e χ -Fe₅C₂ para FTS). Inicialmente sintetizado como Fe₂O₃, o catalisador é reduzido *in situ* no reator, formando Fe₃O₄, FeO e Fe⁰ que posteriormente gera carbetos durante a reação como χ -Fe₅C₂, θ -Fe₃C e Fe₇C₃. Assim, a redutibilidade do Fe₂O₃ influencia diretamente a formação das fases ativas e seu desempenho na hidrogenação do CO₂. Está reportado que a dopagem do Fe₂O₃ pode modificar seu desempenho catalítico na hidrogenação de CO₂ devido a alterações estruturais. Neste trabalho, investigou-se o impacto da dopagem do Fe₂O₃ com cátions de maior e menor estado de oxidação que o Fe³⁺ em sua estrutura cristalina e redutibilidade. Para isso, catalisadores 1% X-Fe (X = W⁶⁺, Mo⁶⁺, Ce⁴⁺, Ni²⁺ e Na⁺, % em massa) foram sintetizados pelo método de coprecipitação, secos a 110 °C por 12 h e calcinados a 400 °C (5 °C/min) por 2 h. As amostras foram caracterizadas por DRX (radiação CuK α , 20° < 2 θ < 80°, passo de 0,02°, 2 s por passo), espectroscopia na região UV-Vis (800 - 200 nm, 1 nm por passo) e H₂-TPR (25 - 1000 °C a 10 °C/min sob 30 mL/min de 3% H₂/Ar). O catalisador Na-Fe exibe picos de difração associados à fase magnetita Fe₃O₄ (ICSD 029129), enquanto os demais apresentam a fase hematita α -Fe₂O₃ (ICSD 201098), sem detecção de fases segregadas. A literatura sugere que os íons W⁶⁺, Mo⁶⁺, Ce⁴⁺, Ni²⁺ e Na⁺ são preferencialmente incorporados à rede do óxido de ferro, em vez de formar nanopartículas tridimensionais segregadas. O tamanho médio de cristalito foi calculado pela equação de Scherrer utilizando as reflexões (311), (440) e (220) para Fe₃O₄ e (104), (110) e (116) para α -Fe₂O₃. Os valores obtidos foram de 50, 52, 52, 39, 12 e 44 nm para as amostras W-, Mo-, Ce-, Ni-, Na-Fe e Fe, respectivamente. O espectro na região UV-Vis do catalisador Fe (sem dopagem) exibe uma absorção ampla com duas bandas largas em 450 nm e 550 nm, típicas da transferência de carga O²⁻ → Fe³⁺ na α -Fe₂O₃. O catalisador Na-Fe apresenta uma banda intensa em 250 nm e outra menos intensa e alargada em 350 nm, associadas à transferência de carga O²⁻ → Fe²⁺/Fe³⁺ na Fe₃O₄. Já os espectros dos catalisadores W-, Mo-, Ce- e Ni-Fe, normalizados em intensidade em relação ao catalisador Fe, exibiram bandas intensas em 260, 330, 244 e 242 nm, atribuídas às transferências de carga O²⁻ → W⁶⁺, O²⁻ → Mo⁶⁺, O²⁻ → Ce⁴⁺ e O²⁻ → Ni²⁺, respectivamente. Este resultado confirma o estado de oxidação do cátion utilizado. Finalmente, os perfis de H₂-TPR mostram que o catalisador Na-Fe apresenta dois picos de redução em 379 °C e 677 °C, correspondentes às reduções Fe₂O₃ → FeO → Fe⁰. Nos demais catalisadores, observam-se dois picos de redução, relativos às reduções Fe₂O₃ → FeO → Fe⁰. As temperaturas de redução são 514 e 810 °C, 612 e 706 °C, 461 e 766 °C, 402 e 739 °C, e 710 e 913 °C para as W-, Mo-, Ce-, Ni-, Na-Fe e Fe, respectivamente. Conclui-se que a estrutura cristalina do óxido de ferro é sensível ao tipo de dopante utilizado. Nas concentrações estudadas, os dopantes não formam fases segregadas, mantêm-se em seus estados de oxidação máximos (W⁶⁺, Mo⁶⁺, Ce⁴⁺, Ni²⁺ e Na⁺) e influenciam o tamanho do cristalito de Fe₂O₃. Menores tamanhos de cristalito reduzem a temperatura de transição Fe₂O₃ → Fe₃O₄, favorecendo, assim, a formação da fase Fe₃O₄, reportada na literatura como ativa para RWGS.





Niterói, RJ. 10 e 11 de abril de 2025

EFEITO DA TEMPERATURA E VELOCIDADE DE AUMENTO DO pH NA ESTRUTURA CRISTALINA DO CATALISADOR Na-Fe₃O₄

Maria Julia R. da Silva¹, Fábio B. Passos¹, Carlos A. Ortiz-Bravo^{1*}.

¹ Universidade Federal Fluminense – UFF, Niterói, RJ, Brasil. *E-mail: carlosortiz@id.uff.br

O catalisador Na-Fe₃O₄ é empregado na conversão termocatalítica de CO₂, combinando as reações de deslocamento inverso gás-água (RWGS) e a síntese de Fischer-Tropsch (FTS). Seu desempenho está associado à coexistência das fases cristalinas Fe₃O₄ e χ -Fe₅C₂, ativas para RWGS e FTS, respectivamente. Tipicamente, o catalisador Na-Fe₃O₄ é primeiramente reduzido *in situ* no reator para formar Fe metálico. Depois, a fase χ -Fe₅C₂ é formada durante a reação a partir da carburação do Fe metálico com o CO₂ reagente. Nesse sentido, o controle da estrutura cristalina do catalisador sintetizado estará diretamente relacionado com as fases presentes durante a reação e, portanto, com seu desempenho catalítico. Na síntese por coprecipitação, o controle da cinética de nucleação e crescimento dos cristais de óxido de ferro, por meio da temperatura e da velocidade de aumento do pH, influencia diretamente a formação das fases cristalinas resultantes e seu tamanho médio de cristalito. Portanto, neste trabalho investigamos a estrutura cristalina de óxidos 1%Na-Fe₃O₄ (% em massa) sintetizados pelo método de coprecipitação, variando a temperatura (T = 40 e 80 °C) e a velocidade de adição de uma solução 1,5 M de NaOH (V = 0,5, 2 e 5 mL/min) até atingir pH de 10. As amostras foram secas em 120 °C por 12 h e calcinadas em 400 °C (5 °C/min) por 3 h. As amostras foram rotuladas no formato T/V. Por exemplo, a amostra 40/2 foi sintetizada a 40 °C com adição de uma solução 1 M de NaOH em 2 mL/min. A caracterização estrutural foi realizada por DRX (radiação CuK α , λ = 1.5406 Å) nas seguintes condições: 20° < 2 θ < 80°, 0,02 de passo, 2 s por passo. O tamanho médio de cristalito das fases detectadas foi calculado utilizando a Equação de Scherrer nas reflexões (220), (200) e (111) para o Na₂O (PDF 00-023-0626), (311), (440) e (220) para a magnetita Fe₃O₄ (PDF 01-075-0449) e (104), (110) e (116) para a hematita α -Fe₂O₃ (PDF 00-033-0664). A fase Na₂O foi identificada nas amostras 0,5/40, 2/40 e 0,5/80, com tamanhos médios de cristalito de 56, 46 e 37 nm, respectivamente. A literatura indica que o Na deveria atuar como cátion dopante intersticial na matriz de óxido de ferro. Contudo, o aumento lento do pH favoreceu a formação de fases cristalinas segregadas de Na₂O. Dessa forma, espera-se que temperaturas mais elevadas e maiores velocidades de adição de NaOH favoreçam a incorporação completa do sódio na rede cristalina do óxido de ferro. A fase Fe₃O₄ foi identificada nas amostras 2/40, 5/40, 2/80 e 5/80, com tamanhos médios de cristalito de 11, 12, 17 e 19 nm, respectivamente. Esses resultados indicam que a formação da fase Fe₃O₄ ocorre em ambas as temperaturas, desde que a taxa de adição de NaOH seja superior a 2 mL/min. Além disso, observa-se que maiores temperaturas e velocidades de adição de NaOH resultam em aumento no tamanho médio do cristalito. Por fim, a fase α -Fe₂O₃ foi a mais estável, sendo detectada em todas as condições, exceto na amostra 2/40.





Niterói, RJ. 10 e 11 de abril de 2025

SÍNTESE E CARACTERIZAÇÃO DE NANOCATALISADORES DE NÍQUEL COM ESTRUTURA CORE-SHELL DE CÉRIA PARA REAÇÃO DE REFORA DE ETANOL

Andreilaine de Souza Bernardes¹, Leticia Forrer Sosa² and Pedro Romano³

¹ Escola de Química, Universidade Federal do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, Brasil. andreilaine.iq@gmail.com

² Universidade Federal do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, Brasil. leticiaforrer@iq.ufrj.br

³ Campus D. de Caxias, Universidade Federal do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, Brasil. pedronromano@gmail.com

A produção de hidrogênio envolve processos catalíticos complexos que resultam na formação de subprodutos, tornando necessária a otimização do catalisador. Metais não nobres como o níquel são a alternativa mais econômica, mas enfrentam desafios como a formação de coque e a sinterização, que reduzem sua atividade e exigem regeneração frequente. Partículas de níquel em escala nanométrica melhoram o desempenho catalítico devido à sua alta razão superfície-volume, para evitar sua sinterização suportes de sílica fornecem uma matriz estável minimizando a aglomeração e a sinterização. Além disso, um revestimento de céria do tipo core-shell poderia evitar a rápida desativação do catalisador. Este estudo examina um método eficaz para síntese e discute a metodologia eficaz para caracterização de catalisadores eficientes. O catalisador foi sintetizado pelo método Stöber modificado, o níquel foi depositado por evaporação de amônia e o core-shell foi sintetizado por heterienotetraína. As caracterizações realizadas foram: DRX, MET, MEV, EDS, STEM, fisissorção, TPR, quimissorção, absorção atômica e teste catalítico. O DRX mostrou a composição de tamanho de cristalito do material. As imagens de MET, MEV e STEM revelaram a morfologia e deposição bem-sucedida de níquel devido a diferença de número atômico e distância interplanar, assim como a formação do revestimento core-shell de filossilicato de céria, enquanto, a análise de EDS validou a composição das estruturas. A fisissorção mostrou uma elevada superfície mesoporosa. TPR e quimissorção mostraram a capacidade de redução e uma elevada dispersão metálica de catalisadores ativos. A absorção atômica mostrou a real porcentagem de metal do catalisador. E o teste catalítico mostrou resultados promissores sobre aumento de conversão e seletividade.





Niterói, RJ. 10 e 11 de abril de 2025

CATALISADORES À BASE DE LANTÂNIO DOPADOS COM CÉRIO PARA ACOPLAMENTO OXIDATIVO DO METANO.

Ana Luisa A. Santos¹, Fabio B. Passos¹, Carlos A. Ortiz-Bravo^{1*}

¹ Universidade Federal Fluminense – UFF, Niterói, RJ, Brasil. *E-mail: carlosortiz@id.uff.br

O Acoplamento Oxidativo do Metano (OCM) tem ganhado importância tecnológica por converter o metano, presente nas crescentes reservas de gás natural, em etileno, uma das matérias-primas mais valiosas da indústria petroquímica. No entanto, o OCM ainda não é aplicado industrialmente devido aos baixos rendimentos de etileno. Isso ocorre porque os compostos resultantes da sobreoxidação (CO_x) são termodinamicamente mais estáveis e formam-se mais rapidamente do que os produtos seletivos (hidrocarbonetos C_2). Assim, os catalisadores de OCM operam com alta conversão de metano e baixa seletividade para etileno, ou vice-versa. Diante disso, buscamos aprimorar catalisadores à base de lantânio, conhecidos por sua elevada seletividade para hidrocarbonetos C_2 (mas baixa conversão de metano), por meio da dopagem com cério. A incorporação de orbitais vazios $4f$ do Ce na rede da La_2O_3 pode melhorar a conversão de metano, recebendo elétrons durante a ativação da ligação C-H, que é a etapa limitante de OCM. Para isso, foram sintetizados catalisadores do tipo $\text{X}\%\text{Ce-Na-La}_2\text{O}_3$ ($X = 0, 1, 3, 5$ e 10% em massa) usando o método sol-gel Pechini e caracterizados por DRX, espectroscopias Raman e UV-Vis e H_2 -TPR. Todos os catalisadores apresentam picos de difração associados à fase cristalina $\text{La}(\text{OH})_3$ (ICSD 200990), resultante da interação do La_2O_3 com a umidade do ambiente. Unicamente o catalisador $10\%\text{Ce-Na-La}_2\text{O}_3$ exibe um pico de difração de baixa intensidade em $2\theta = 26,3^\circ$, associado à reflexão mais intensa (100) da CeO_2 (ICSD 061379), indicando que, para teores de Ce acima de 10% , formam-se fases segregadas de óxidos de La e Ce. O tamanho médio do cristalito de $\text{La}(\text{OH})_3$ foi calculado usando a Equação de Scherrer nas reflexões (100), (101) e (110), observando-se uma diminuição desse tamanho com o aumento do teor de Ce. Além disso, todos os catalisadores apresentam bandas Raman associadas à fase cristalina $\text{La}(\text{OH})_3$. Apenas o catalisador livre de cério, $\text{Na-La}_2\text{O}_3$ ($X = 0$), exibe uma banda em 405 cm^{-1} associada à fase cristalina hexagonal La_2O_3 , não observada no DRX, possivelmente devido ao pequeno tamanho do cristalito ou a uma hidroxilação parcial com a umidade do ambiente. Adicionalmente, o aumento do teor de Ce reduz a energia do *band gap*, o que pode estar associado ao aumento da atividade catalítica para a ativação do metano, uma vez que facilita a transferência de elétrons do orbital de valência $2p$ do O^{2-} para os orbitais de condução $5d$ ou $4f$ do La^{3+} . Por fim, o aumento da concentração de cério resulta em maior liberação de oxigênio estrutural, calculada pelo consumo de H_2 no TPR, além de um deslocamento dos picos de redução do La_2O_3 para temperaturas mais elevadas, indicando uma maior disponibilidade de oxigênio de rede.





Niterói, RJ. 10 e 11 de abril de 2025

THE NATURE OF Cu-OXO CATIONS IN A MORDENITE ZEOLITE GENERATED AFTER ACTIVATION WITH AIR OR CO₂: AN INVESTIGATION BY *IN SITU* DRS UV-VIS ANALYSES

Eliane Soares da Silva¹, João Emanuel Cabral da Mata², Ernesto A. Urquieta-Gonzalez¹

¹ Research Center on Advanced Materials and Energy (CPqMAE), Department of Chemical Engineering, Federal University of São Carlos, CEP 13565-905, São Carlos, SP

² Catalytic Process Engineering and Biorefineries Laboratory (LEPCatBior), Department of Chemical Systems Engineering (DESQ), State University of Campinas, Campinas, SP

eliansoares@estudante.ufscar.br

The direct oxidation of methane on exchanged oxo-Cu zeolites allows the production of highly demanded methanol in a more sustainable way, since it employs mild temperature and pressure conditions, when compared to the conventional process. In this partial oxidation of methane to methanol (MTM) stepwise process, copper-exchanged zeolites can play an important role, since they have a microporous structure capable of stabilizing the generated active copper oxo-cations upon activation. Considering this relevant property of Cu-exchanged zeolites, the present work aimed to apply the Cu-mordenite (Cu-MOR) in the MTM reaction, exploring the effect of air and CO₂ as activating agents on the nature of the generated oxo-Cu cations. A Cu-exchanged mordenite (Si/Al=10) was activated with air or CO₂ ([Cu_xO_y]-MOR samples) and then evaluated in the direct oxidation of methane to methanol. The nature and activity of the generated oxo-Cu cations were studied by *in situ* DRS-UV-Vis analyses. The stepwise MTM reaction involved: (i) activation of Cu-MOR(10) under a flow of 60 mL min⁻¹ of air or CO₂ during 1h at temperatures between 250 and 550 °C, (ii) MTM reaction 30 mL min⁻¹ a flow of pure methane, at 200°C, for 4h and, (iii) off-line extraction of the formed methanol. The samples were characterized by XRD, H₂-TPR, XRF and *in situ* DRS UV-Vis analyses. Regardless of the activating agent used, all of the [Cu_xO_y]²⁺-MOR prepared samples were active to convert MTM, with the generated Cu-oxo cations having monomeric [CuOH]⁺, dimeric [Cu₂(μ-O)₂]²⁺ and trimeric [Cu₃(μ-O)₃]²⁺ nature. When activated with air or CO₂, the [Cu₃(μ-O)₃]²⁺ and [CuOH]⁺ cations were the main consumed species, since, after methane reaction occurred a greater intensity difference between the UV-Vis absorption bands collected after activation and after reaction in the region between 30,000 and 40,000 cm⁻¹, which is related to the charge transfer from the ligand to the metal (O → Cu²⁺).





Niterói, RJ. 10 e 11 de abril de 2025

Hidrogenação de CO₂ a metanol e DME em catalisadores Cu-ZrO₂@SiO₂

Hebert Douglas Pereira de Souza¹, Vitor Duarte Lage, Fabio Souza
Toniolo*, Martin Schmal

¹ hebert.int@gmail.com, * toniolo@peq.coppe.ufrj.br

Catalisadores de Cu se destacam por sua atividade e seletividade à síntese de metanol e DME a partir da hidrogenação de CO₂, onde as espécies Cu⁰ e Cu⁺ desempenham papéis fundamentais nesse processo. Cu⁰ é responsável pela ativação do CO₂ e spillover de H₂, enquanto Cu⁺ estabiliza intermediários essenciais (ex., CH₃O*) para produção de metanol [1]. Enquanto que a presença de ZrO₂ aprimora a dispersão das espécies de cobre e gera vacâncias de oxigênio que auxiliam na dissociação da água e adsorção de CO₂. A zircônia também fornece sítios ácidos que desidratam o metanol em DME [2]. Por fim, a introdução da sílica pode melhorar a transferência de elétrons e aumentar a resistência à formação de coque e desativação induzida pela água [1]. Neste sentido, este trabalho objetiva investigar as propriedades de catalisadores Cu-ZrO₂@SiO₂ na produção de metanol e DME a partir da reação de hidrogenação de CO₂. Os catalisadores Cu-ZrO₂@SiO₂ com diferentes razões mássicas de Cu: Zr (1:0; 3:2; 1:1 e 0:1) foram sintetizados pelos métodos de micela reversa e sol-gel. Inicialmente, a fase oleosa composta por n-dodecano, n-hexanol e CTAB, foi misturada à fase aquosa contendo nitratos de cobre e zircônia em quantidades. Essa mistura foi mantida sob agitação por algumas horas para estabilizar as micelas e criar núcleos metálicos. Posteriormente, a casca de sílica foi formada *in-situ* com a adição de TEOS e hidróxido de amônio (28% v/v). Após 24 horas de reação, o catalisador foi lavado, seco à 100°C e calcinado à 400°C por 8 horas. Nos testes catalíticos (220–340°C, 30 bar, GSVH = 6000 mL_{g_{cat}}⁻¹.h⁻¹, H₂/CO₂ = 3), os catalisadores de Cu-ZrO₂@SiO₂ apresentaram conversão de CO₂ entre 10-28% e seletividade à metanol (>70%), DME (<10%), e olefinas leves (C₂–C₄, >10%). A acidez total dos catalisadores foi >760 μmol.g⁻¹, predominantemente composta por sítios ácidos fracos e moderados, favorecendo a conversão de DME em olefinas e minimizando desativação por coque. Os catalisadores possuem elevadas áreas específicas (>300 m².g⁻¹) e dispersão de Cu (14–57%), com áreas metálicas variando entre 90-375 m².g⁻¹. A presença de sílica permitiu a formação de ligações Cu⁺–O–Si, aumentando os sítios ativos para a adsorção de CO₂. Além disso, a formação de espécies Zr^{δ+} (ZrO_x e Zr–O–Si) e defeitos na estrutura do catalisador podem ter aumentado a adsorção de CO₂ e estabilização de espécies Cu⁺ e Cu⁰ evitando a oxidação pela água e a rápida desativação catalítica.





Niterói, RJ. 10 e 11 de abril de 2025

DESENVOLVIMENTO E AVALIAÇÃO DE CATALISADORES SULFETADOS DE COMOALMG PARA HIDRODESSULFURIZAÇÃO SELETIVA A PARTIR DE HDLS

Felipe R. Bernardes¹, Weberton R. do Carmo¹, Victor de Oliveira Rodrigues^{1*}, Luz A. P. Santos², Arnaldo da C. Faro Jr¹.

¹: Universidade Federal do Rio de Janeiro ²: Universidade Estadual do Rio de Janeiro *email de contato: vicerodrigues@iq.ufrj.br

Para minimizar o teor de enxofre nos combustíveis as refinarias utilizam o hidrotratamento (HDT); porém, os catalisadores também catalisam a hidrogenação das olefinas presentes na nafta, gerando uma diminuição na octanagem da gasolina, sendo assim, buscam-se novos catalisadores seletivos de HDS. Nesse sentido os hidróxidos lamelares duplos (HDL) vêm se mostrando promissores como precursores catalisadores metálicos de alta seletividade para dessulfurização. HDLs são argilas aniônicas que consistem em lamelas positivamente carregadas, com ânions e água intercalados. Foram realizadas sínteses de HDLs precursores trimetálicos (Al, Mg e Co) com fração molar de alumínio de 0,5, de acordo com um planejamento fatorial com temperatura, pH e ânion como fatores, utilizando o método de coprecipitação a pH controlado. Seguido por troca iônica com o ânion heptamolibdato de amônio, as amostras de HDL foram avaliadas por FTIR e DRX, foram obtidas amostras cristalinas e puras. Os óxidos mistos tetrametálicos foram obtidos por calcinação, estes foram caracterizados por fisissorção de nitrogênio e avaliados pelo método de Pareto quanto a área e volume de poros. Foi verificada a obtenção de óxidos mistos mesoporosos de elevada área superficial ($>150 \text{ m}^2\text{g}^{-1}$). O comprimento do ânion inicial foi capaz de orientar o óxido misto, gerando materiais com maior teor de Mo, volume de poros e área superficial, sendo o fator mais significativo do planejamento. Após, foram realizadas sulfetações in situ para a obtenção da forma ativa dos catalisadores e testes catalíticos numa unidade de reator tubular de fluxo contínuo personalizada. Os testes catalíticos demonstraram uma maior conversão para as amostras de sulfetos oriundas dos HDLs com os ânions de cadeia mais longa.





Niterói, RJ. 10 e 11 de abril de 2025

Catalisadores Ni-SiO₂: avaliação comparativa entre arquiteturas encapsulada e suportada

Gabrielle F. Fonseca^{1,2}, Mariana S. Diogo³, Carla M. Ramos³, Leon F. Feiosa¹, Andréa M. D. Farias^{1,*}

¹ Instituto Nacional de Tecnologia – INT, Rio de Janeiro (RJ).

² Instituto Federal do Rio de Janeiro – IFRJ, Nilópolis (RJ).

³ Universidade Federal do Rio de Janeiro – UFRJ, Rio de Janeiro (RJ).

* autora correspondente: andrea.farias@int.gov.br

Para sistemas catalíticos mais severos, o uso de catalisadores com arquitetura encapsulada é uma alternativa que permite melhorar a estabilidade da fase ativa. Ao empregar este tipo de arquitetura, o uso de metais não nobres como fase ativa permite combinar o aprimoramento da estabilidade com a produção de catalisadores mais baratos do que aqueles que usam metais nobres como fase ativa. Neste trabalho, foram preparados e caracterizados dois catalisadores Ni-SiO₂: i) catalisador convencional preparado por impregnação (Ni/SiO₂); ii) catalisador encapsulado cujas nanopartículas foram obtidas a partir do método do poliol (Ni@SiO₂). Os materiais obtidos foram caracterizados por DRX, TPR, TGA e microscopias eletrônicas de varredura (MEV) e transmissão (MET). Em relação à obtenção das nanopartículas, a realização da síntese em escalas diferentes, cada uma delas em triplicata, mostrou que a metodologia usada é reprodutível e escalonável. Resultados de MEV mostraram que as partículas obtidas possuem morfologia geométricas. Além disso, os tamanhos de partícula determinados a partir dos histogramas levantados com as imagens se mostraram estatisticamente equivalentes para todas as sínteses realizadas. Resultados de MET confirmaram o encapsulamento das nanopartículas e mostraram que a configuração obtida foi mononuclear. Dados de TPR e DRX mostraram que o níquel está presente na forma óxida (NiO) no catalisador, enquanto o catalisador encapsulado possui partículas de níquel metálico (Ni⁰). Com base nestes resultados preliminares, ficou evidenciado que a metodologia empregada para a síntese do catalisador encapsulado Ni@SiO₂ consegue associar as vantagens o uso deste tipo de arquitetura com a eliminação de uma etapa posterior de processo (ativação em hidrogênio). Este trabalho visa o uso do Ni@SiO₂ como catalisador de hidrogenação em reações de valorização de biomassa realizadas em reator batelada e meio aquoso. Neste sentido, usar este catalisador dispensa a necessidade de usar um segundo reator apenas para reduzir o níquel e obter a fase ativa necessária para estas reações.





Niterói, RJ. 10 e 11 de abril de 2025

SÍNTESE E CARACTERIZAÇÃO DE GEOPOLÍMEROS PRODUZIDOS A PARTIR DE REJEITOS DE MINERAÇÃO

Caroline D. Prates¹, Luádiny V. L. Santos¹, Ana Paula C. Teixeira^{1*}

¹ UFMG, Departamento de Química/Icex, Belo Horizonte, Minas Gerais, Brasil, 31270-901

*e-mail: anapct@ufmg.br

Os geopolímeros podem ser definidos como polímeros inorgânicos obtidos pela ativação alcalina de aluminossilicatos e apresentam diversas aplicações, dentre elas a substituição do cimento na construção civil e a utilização como adsorvente para contaminantes. A utilização de rejeitos de mineração para produção desses materiais reduz a necessidade de extrair novas matérias-primas, além de diminuir a quantidade de resíduos gerados e os impactos causados pelo seu armazenamento. Neste trabalho três diferentes rejeitos de mineração foram testados para produção de geopolímeros: mineração de ferro, nióbio e serpentinito. Os rejeitos foram caracterizados por diversas técnicas, e os resultados de caracterização indicaram que são compostos majoritariamente por fases cristalinas contendo silício. Portanto, para a produção dos geopolímeros, todos os rejeitos foram utilizados como carga e não como precursor, já que fases cristalinas geralmente não são reativas nas condições testadas. Como fonte de aluminossilicato foi utilizado um metacaulim comercial, e a solução ativadora foi uma mistura de solução de hidróxido de sódio e silicato de sódio. Para os testes foram produzidos geopolímeros utilizando 25% de metacaulim, 25% de solução ativadora e 50% de carga. A carga comumente utilizada é a areia média, então foram testadas misturas de areia e rejeito nas seguintes proporções: 0, 25, 50 e 100% de rejeito. Os materiais foram testados quanto a resistência mecânica à compressão após 7 dias de cura. Para os geopolímeros com rejeito de ferro e serpentinito, os melhores resultados de resistência foram obtidos com a utilização de 50% de rejeito (36 MPa para o rejeito de ferro e 41 MPa para o serpentinito), e os valores ficaram superiores aos do material sem adição de rejeitos (32 MPa), indicando a eficiência na substituição de parte da areia por rejeito. Na utilização do rejeito de nióbio, o material com 100% de rejeito rompeu ao desmoldar, indicando pouca resistência, já a adição de 25 e 50% de rejeito levou a materiais com 27 e 26 MPa, respectivamente, valores um pouco mais baixos que o do material de referência sem rejeito. Os resultados obtidos são muito positivos tendo em vista que são muito superiores aos encontrados em geral com corpos de concreto convencionais que, em sua maioria, são postos a prova apenas após 28 dias de cura e apresentam valores de resistência em torno de 25 MPa, indicando que os materiais produzidos apresentam potencial para serem utilizados na construção civil e em processos de adsorção e catálise.





Niterói, RJ. 10 e 11 de abril de 2025

Ni, Cu AND Ni-Cu NANOPARTICLES EMBEDDED IN CeO₂ FOR HYDROGEN PRODUCTION FROM ETHANOL OXIDATIVE STEAM REFORMING

Ruan Carlos V.R. Oliveira ¹; Fabio S. Toniolo ¹; Henrique P. Pacheco ^{1*}

¹ Programa de Engenharia Química/COPPE/UFRJ, Universidade Federal do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, 21941-972

*henrique@peq.coppe.ufrj.br

The demand for sustainable energy sources to replace traditional fossil fuels is gaining more prominence economically and environmentally. In this context, H₂ emerges as a sustainable alternative in terms of green energy, due to its high potential as an energy carrier associated with high emission efficiency. This study introduces a novel approach to synthesizing embedded Ni, Cu, and Ni-Cu-based nanoparticles, with an evaluation of performance and efficiency in hydrogen production through ethanol oxidative steam reforming. The embedded catalysts were synthesized using a sol-gel method. Precursors were solubilized, homogenized, and dried before undergoing a controlled thermal treatment in multiple steps to ensure proper decomposition and minimize mass loss. Material characterization aimed to analyze crystalline structure, dispersion, chemical composition, reduction profiles, basicity, oxidation state and arrangement of nanoparticles. Catalytic performance was evaluated through TOS tests of 20 h for all embedded catalysts at three temperatures (773 K, 823 K, and 873 K) at a GHSV of 492.000 mL·h⁻¹·gcat⁻¹ and a catalyst mass of 10 mg. Stability tests were conducted for 90 h at 873 K to assess potential catalyst deactivation. Among the evaluated materials, Ni-based catalysts exhibited the highest catalytic performance and H₂ yield. Furthermore, the preparation method, which enabled the encapsulation of Ni nanoparticles within the porous CeO₂ matrix, improved H₂ selectivity and enhanced resistance to deactivation compared to the supported material. This synthesis approach provided the 10% Ni@CeO₂ catalyst with greater resistance to coke deposition, ensuring long-term stability and complete ethanol conversion at 873 K after 90 hours of reaction, with 56% hydrogen selectivity. Additionally, Cu doping led to significant acetaldehyde production, likely due to the promotion of ethanol dehydrogenation by Cu species and the lower mass proportion of Ni species, which are responsible for breaking C-C bonds in acetaldehyde. Structural characterization by XRD confirm the presence of a CeO₂ matrix and suggests that NiO and CuO phases are highly dispersed on the CeO₂ support, forming small nanoparticles. Punctual XANES verified the homogeneity of Ni and Cu metallic species after reduction, while TEM analysis of the catalysts confirmed this dispersion and suggested that NiO and CuO nanoparticles are distributed within the ceria matrix, as verified by energy-dispersive X-ray spectroscopy. Post-reaction characterizations using Raman spectroscopy and thermogravimetry showed lower carbon formation for embedded materials, indicating that the arrangement of NiO and CuO nanoparticles within the ceria matrix enhanced resistance to deactivation by coke deposition.





Niterói, RJ. 10 e 11 de abril de 2025

HIDROGENAÇÃO DO CO₂ UTILIZANDO FERRO SUPORTADO EM ZEÓLITAS HIERÁRQUICAS

Mirian Vitor de Souza ¹, Thiago de Melo Lima ², Fabio Souza Toniolo ¹

¹ Programa de Engenharia Química, COPPE, Universidade Federal do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, RJ, Brasil

² Instituto de Química, Universidade Federal Fluminense, Niterói, RJ, Brasil

* mirian@peq.coppe.ufrj.br, tmlima@id.uff.br, toniolo@peq.coppe.ufrj.br.

A conversão de CO₂ em produtos de valor agregado é um tema de grande relevância devido à necessidade de reduzir emissões de gases de efeito estufa e desenvolver alternativas sustentáveis aos combustíveis fósseis. Este trabalho tem como objetivo desenvolver e caracterizar catalisadores de ferro (Fe), promovidos por potássio (K) e suportados em zeólitas ZSM-5 comerciais e hierárquicas (micro e mesoporas) de diferentes razões Si/Al, para a hidrogenação do CO₂. A escolha de zeólitas hierárquicas visa investigar a influência da estrutura secundária de mesoporos e da composição Si/Al sobre o desempenho catalítico. Os catalisadores foram preparados por impregnação ao ponto úmido, utilizando nitratos de ferro e de potássio como precursores. A caracterização dos materiais foi realizada por termogravimetria (TG), espectroscopia de fluorescência de raios X (FRX), difração de raios X (DRX), fisissorção de N₂, dessorção à temperatura programada (TPD-NH₃ e TPD-CO₂) e redução à temperatura programada (TPR). A avaliação catalítica foi conduzida em um reator de leito fixo, sob pressão de 30 bar, temperatura de 320°C e em diferentes velocidades espaciais com os produtos sendo analisados por um cromatógrafo a gás equipado com TCD e FID. Os teores reais de Fe (10%) e K (1%) são similares aos teores nominais e indicam a reprodutibilidade do método de síntese. A zeólita hierárquica Z-32D apresenta volume de mesoporos 53% maior em relação à zeólita comercial Z-45, embora esse aumento diminua para 37% após a impregnação dos metais. Os catalisadores preservaram a estrutura MFI da ZSM-5 após a inserção de ferro e nenhuma fase relacionada a Fe ou K foi identificada por DRX, indicando que a fase metálica está dispersa. A acidez total dos catalisadores decresce de 0,04 para 0,02 e 0,01 mmol.g⁻¹ para os catalisadores K-Fe/Z-15D, K-Fe/Z-32D e K-Fe/Z-45, respectivamente, de acordo com a diminuição da quantidade de espécies de Al responsáveis pela acidez (os códigos 15, 32, 45 representam a razão Si/Al). Nos testes catalíticos preliminares, K-Fe/Z-45 mostra conversões entre 9 a 17% para velocidades espaciais entre 3000 a 18000 mL.h⁻¹.g⁻¹ de forma estável por até 140 h e formação de produtos na faixa de C1-C6, sendo CH₄ o principal composto (75%), o que pode ser explicado pela elevada acidez. Estudos em andamento visam correlacionar as propriedades texturais e de acidez com o desempenho dos catalisadores, assim como avaliar o impacto das condições reacionais (pressão, temperatura e velocidade espacial) sobre o crescimento da cadeia em direção a hidrocarbonetos que possam ser utilizados como combustíveis líquidos.





Niterói, RJ. 10 e 11 de abril de 2025

EFEITO DA ADIÇÃO DE NIÓBIA EM CATALISADORES $\text{Ni}/\text{Al}_2\text{O}_3$ SUPORTADOS EM MONOLITOS OBTIDOS POR IMPRESSÃO 3D PARA A REFORMA SECA DO METANO

Victória Gonçalves F. Pereira¹, Débora M. Bezerra¹, Lorena P. Passaroni¹, Arthur Alvarez Mascheroni², José Maria Mascheroni², Fabio S. Toniolo^{1*}.

¹ Programa de Engenharia Química da COPPE-Universidade Federal do Rio de Janeiro, CEP 21941-598, Rio de Janeiro-RJ, Brasil

² Alkimat Tecnologia Ltda., Rua Abelardo Manoel Peixer, 142 - Barreiros, São José, Santa Catarina - 88110-055, Brazil.

* toniolo@peq.coppe.ufrj.br.

Uma estratégia para mitigar as emissões de CH_4 e CO_2 é convertê-los em produtos de valor agregado, como o gás de síntese, a partir da reforma seca do metano. Catalisadores à base de níquel são amplamente utilizados nesse processo, mas enfrentam desafios como desativação por sinterização e deposição de coque. Além disso, catalisadores particulados apresentam limitações na transferência de calor e massa, além de problemas de empacotamento no leito catalítico, resultando em queda de pressão no reator. Para superar essas limitações, catalisadores estruturados obtidos por impressão 3D surgem como uma alternativa promissora, permitindo a fabricação de geometrias otimizadas que maximizam a razão área/volume, melhoram a eficiência da transferência de calor e massa e minimizam a queda de pressão no reator. Neste trabalho, foram preparados e caracterizados catalisadores de níquel modificados com nióbia (Nb_2O_5) suportados em monolitos de Inconel de geometria TPMS (superfície mínima triplamente periódica) fabricados por impressão 3D pelo método de fusão em leito de pó com Laser, em equipamento de fabricação nacional, para aplicação na reforma seca do metano. O objetivo foi investigar o efeito da adição de nióbia na atividade catalítica e estabilidade dos materiais. Os catalisadores foram preparados pela deposição de $\gamma\text{-Al}_2\text{O}_3$ sobre monolitos de Inconel por washcoating, seguida de impregnação úmida sucessiva de nióbia (5, 10 e 20%) e níquel (20%). Os materiais foram caracterizados por teste de aderência, DRX, TPR, MEV e fisssorção de N_2 . Os testes catalíticos foram realizados a 700 °C, 1 atm, razão $\text{CH}_4:\text{CO}_2$ de 1:1 e GHSV de 85.000 $\text{mL}\cdot\text{g}_{\text{cat}}^{-1}\cdot\text{h}^{-1}$. Houve a formação de uma camada espessa de catalisador recobrando a superfície do monolito, com elevada aderência (98%). As fases cristalinas foram identificadas como NiO e NiAl_2O_4 , sendo que no difratograma a intensidade do NiO aumentou com o aumento da concentração de nióbia, enquanto a de NiAl_2O_4 diminuiu, além do surgimento da fase NiNb_2O_6 na amostra com 20% Nb_2O_5 . Esse resultado indica que a adição de nióbia diminuiu a interação entre níquel e alumina, o que foi corroborado pelos perfis de TPR, que mostraram uma diminuição progressiva na temperatura de redução do níquel com a adição de nióbia. O catalisador de referência $\text{Ni}/\text{Al}_2\text{O}_3/\text{Inconel}$ apresentou conversão inicial de 60% de CH_4 a 700 °C, mas diminuiu para 14% após 48h. Por outro lado, a adição de nióbia diminuiu a atividade, mas aumentou a estabilidade do catalisador, como observado para $\text{Ni}/20\text{Nb}_2\text{O}_5/\text{Al}_2\text{O}_3/\text{Inconel}$ cuja conversão inicial foi 30% e se manteve estável por 48 h. O aumento da estabilidade pode ser atribuído à presença de vacâncias de oxigênio da nióbia que favorecem a remoção de carbono da superfície do catalisador.





Niterói, RJ. 10 e 11 de abril de 2025

DESENVOLVIMENTO DE CATALISADORES MICRO E MESOPOROSOS PARA EPOXIDAÇÃO AMBIENTALMENTE AMIGÁVEL DE OLEFINAS

Weberton Reis do Carmo¹, Luz Amparo Palacio Santos², Arnaldo da Costa Faro Júnior¹, Victor de Oliveira Rodrigues^{1*}

¹ Universidade Federal do Rio de Janeiro, Instituto de Química - Rio de Janeiro –RJ, Brazil.

² Universidade do Estado do Rio de Janeiro, Instituto de Química - Rio de Janeiro –RJ, Brazil

*vicerodrigues@iq.ufrj.br

Este trabalho tem como objetivo o desenvolvimento de catalisadores heterogêneos ativos e seletivos para reações de epoxidação de olefinas empregadas industrialmente. O foco está na obtenção de produtos de alto valor comercial e na investigação de alternativas mais sustentáveis para esse processo. O projeto busca otimizar o rendimento dos produtos e promover processos energeticamente mais eficientes e ambientalmente amigáveis, como a epoxidação usando oxigênio molecular, alternativa promissora aos processos tradicionais que utilizam oxidantes tóxicos. Para este fim, foram sintetizados e caracterizados diferentes materiais microporosos e mesoporosos, incluindo silicalita, titanossilicalita (TS-1), ZSM-5 microporosa e mesoporosa, e sílica-alumina amorfa (ASA). A síntese da silicalita foi adaptada de (WATANABE, 2011) e apresentou uma solução de preparo com composição molar 1SiO_2 : 0,36TPOH: 0,0104 NaOH: 31,53 H_2O : 4ETOH. A amostra TS-1 (Si/Al=100) foi sintetizado de acordo com o método descrito por (KHOMANE, 2002) e foram utilizadas as seguintes razões molares $\text{H}_2\text{O}/\text{SiO}_2 = 14,9737$; $\text{TPAOH}/\text{SiO}_2 = 0,1285$; $\text{Tween}/\text{SiO}_2 = 0,0094$. Para a obtenção da ZSM5 microporosa foi preparado uma solução de composição 1SiO_2 : 0,005 Al_2O_3 : 0,36TPAOH: 0,0104 NaOH: 31,53 H_2O : 4ETOH. A síntese da zeolita ZSM5 mesoporosa foi adaptada de (TEH, 2015) onde o composto foi preparado pelo método de modelagem dual utilizando TPABr como agente direcionador de microporo e cloreto de benzalcônio como agente direcionador de mesoporo. As amostras foram caracterizadas por difração de raios X (DRX), espectroscopia na região do infravermelho (FTIR), espectroscopia na região do UV-Vis, microscopia eletrônica de varredura (MEV), análises termogravimétricas (TGA) e adsorção de N_2 para avaliação das propriedades texturais. A silicalita cristalizou-se na estrutura MFI com alta cristalinidade e área específica significativa, $393 \text{ m}^2 \text{ g}^{-1}$. O composto TS-1 apresentou bandas características de ligações Si-O-Ti, indicando a incorporação de titânio na estrutura MFI. A ZSM-5 microporosa foi sintetizada e sua estrutura foi confirmada por DRX e FTIR, enquanto a versão mesoporosa apresentou estrutura parcialmente amorfa. A sílica-alumina amorfa foi obtida via deposição-precipitação e calcinadas em diferentes temperaturas, apresentando diferentes coordenações do alumínio conforme avaliado por RMN de ^{27}Al . As amostras foram calcinadas em diferentes temperaturas e apresentaram áreas entre $305\text{-}368 \text{ m}^2 \text{ g}^{-1}$. Os materiais sintetizados possuem grande potencial para aplicação em processos catalíticos, dada sua estrutura porosa e propriedades químicas ajustáveis. O próximo passo envolve a impregnação desses materiais visando a obtenção de catalisadores bi metálicos de ouro e prata que serão utilizados na epoxidação de olefinas em fase gasosa com oxigênio molecular.



Niterói, RJ. 10 e 11 de abril de 2025

SÍNTESE DE NANOCATALISADORES HÍBRIDOS BIFUNCIONAIS DE COBRE

Karina M. Lima,^{1,2} Carla R. Moreira,³ Andréa M. D. Farias,² Marco A. Fraga^{1,2,4*}

¹Instituto Militar de Engenharia-IME, Praça Gen. Tibúrcio, 80, Urca, Rio de Janeiro/RJ, Brasil.

²Instituto Nacional de Tecnologia-INT, Av. Venezuela, 82, Saúde, Rio de Janeiro/RJ, Brasil.

³Universidade Federal do Rio de Janeiro-UFRJ, Cidade Universitária, Fundão, Rio de Janeiro/RJ, Brasil.

⁴Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro – DEQM/PUC-Rio, R. Marques de São Vicente, Gávea, Rio de Janeiro/RJ, Brasil.

*marco.fraga@int.gov.br

O desenvolvimento de nanocatalisadores heterogêneos bifuncionais possuem potencial de entregar maior eficiência e seletividade a processos químicos, além de reduzir etapas operacionais e custos. Pensando nisso, o objetivo deste trabalho foi desenvolver nanocatalisadores híbridos com estrutura *core-shell* (NpCu@SiO₂ e NpCu@SiO₂-APTS) e uma estrutura classificada como nanocompósito (SiO₂-APTS/Cu), além de catalisadores impregnados (Cu/SiO₂ e Cu/SiO₂-APTS). Espera-se uma combinação de sítios metálicos de cobre com sítios básicos obtidos a partir da funcionalização de silanóis presentes no suporte e na casca dos catalisadores. A funcionalização foi feita com grupamentos orgânicos (3-aminopropiltrietóxisilano; APTS), a partir do processo de grafagem. O desenvolvimento de catalisadores heterogêneos seletivos e estáveis em reações em fase líquida, é essencial para garantir processos eficientes, assim, a resistência à sinterização e lixiviação dos sítios ativos é o alvo do desenvolvimento da arquitetura *core-shell* destacada neste trabalho, por ter o potencial de proteger o sítio ativo e evitar a desativação do catalisador. Os catalisadores *core-shell* foram sintetizados a partir do método sol-gel e de nanopartículas de cobre metálico obtidas pelo método solvotérmico. Numa última etapa, o catalisador passou pelo processo de funcionalização por grafagem. O catalisador nanocompósito foi sintetizado a partir da sílica funcionalizada pelo mesmo processo, já as nanopartículas de cobre foram obtidas pelo método de oxirredução química usando CuSO₄.5H₂O como precursor metálico e NaBH₄ como agente redutor. Catalisadores de referência foram obtidos por impregnação úmida da sílica funcionalizada com Cu(NO₃)₂.xH₂O. Os catalisadores foram caracterizados quanto à porcentagem mássica de cobre, a funcionalização do APTS, as propriedades texturais, estruturais e morfológicas, redutibilidade das espécies oxidadas e a estabilidade térmica. A espectrometria de fluorescência de raios X mostrou teores em torno de 10-20% de cobre, já com a fisissorção de N₂ destacou-se a alta área específica apresentada pelo *core-shell*, 1052 m² g⁻¹, em comparação a sílica comercial, 204 m² g⁻¹. A análise elementar avaliou a % de APTS grafado a partir da % de N presente nos catalisadores, com uma variação entre 0,26-5%, sendo 5% para o *core-shell*. A microscopia eletrônica de transmissão de alta resolução confirmou a síntese de NpCu⁰ com tamanho médio de 5,8±1,5 nm e a obtenção do catalisador *core-shell* multinuclear, além da presença de Cu⁰ no catalisador nanocompósito com partículas de tamanho médio de 4,5 ± 1,2 nm. A análise de redução a temperatura programada permitiu detectar e caracterizar as espécies de Cu presentes e a temperatura na qual ocorre o processo de redução, complementando as informações obtidas pela difração de raios X, que confirmou as espécies majoritárias de CuO nos catalisadores suportados e de Cu⁰ nos catalisadores nanocompósito e *core-shell*. A análise térmica demonstrou que o catalisador *core-shell* foi o que apresentou a maior estabilidade térmica do sítio básico. Os resultados obtidos demonstraram que a obtenção dos nanocatalisadores híbridos bifuncionais foi bem-sucedida, sendo a área superficial um fator limitante para a funcionalização, além disso, a síntese para obtenção da arquitetura do catalisador nanocompósito foi promissora para a obtenção de nanopartículas com tamanho pequeno.





Niterói, RJ. 10 e 11 de abril de 2025

SÍNTESE DE ZEÓLITAS HIERÁRQUICAS BETA A PARTIR DE DESSILICAÇÃO PÓS SÍNTESE

Amanda S. Mello^{1,2}, Marco A. Fraga^{1,2,3}

amanda.mello@ime.eb.br; marco.fraga@int.gov.br

¹Instituto Militar de Engenharia, IME; ²Instituto Nacional de Tecnologia, INT; ³DEQM/PUC-Rio

As zeólitas têm uma alta relevância em reações catalíticas, incluindo craqueamento, isomerização e alquilação de hidrocarbonetos. O número de sítios ácidos de Brønsted está diretamente relacionado ao número de tetraedros na estrutura da zeólita. A força e a quantidade desses sítios podem variar com base em fatores como a estrutura específica da zeólita, o tipo de cátion trivalente presente e a razão SiO_2 e Al_2O_3 (SAR) da composição. Porém, uma diminuição do SAR torna a estrutura menos estável, podendo comprometer ou até destruir seu arranjo cristalino. Embora as zeólitas apresentem geralmente ótima seletividade em processos catalíticos, elas enfrentam desafios como restrições de difusão, que dificultam a transferência de massa através de seus canais microporosos. Diversas abordagens podem ser utilizadas para resolver esses problemas, como a síntese de zeólitas hierárquicas, onde pode-se usar a abordagem *top-down* (desmetalização), que envolve a modificação do material microporoso já sintetizado. Dentro dessa abordagem *top-down*, tem-se a dessilicação, que envolve a remoção de átomos de silício, em meio alcalino, resultando em poros maiores, o que facilita a acessibilidade dos reagentes durante as reações catalíticas e aumenta a acidez do catalisador. Com isso, o objetivo do trabalho foi sintetizar zeólitas hierárquicas a partir de uma zeólita comercial Beta 25 e avaliar o impacto da geração de mesoporos sobre suas propriedades texturais, estruturais e ácidas. Para a síntese da zeólita hierárquica, foi escolhida a zeólita comercial H-Beta (SAR=25). A dessilicação foi realizada utilizando-se diferentes concentrações de solução de NaOH ($0,1 \text{ mol L}^{-1}$ e $0,2 \text{ mol L}^{-1}$) e variando os tempos de tratamento alcalino (30, 60 e 120 minutos). A amostra foi misturada com as soluções de NaOH nas concentrações mencionadas e cada mistura foi mantida sob agitação a $50 \text{ }^\circ\text{C}$ pelos tempos mencionados. Após o tratamento alcalino, as amostras foram lavadas com água ultrapura até alcançar pH neutro. Em seguida, foi realizada uma troca iônica para remover os íons de sódio, utilizando uma solução de NH_4Cl . Após a troca iônica, as amostras foram lavadas com água ultrapura e secas em um forno a $110 \text{ }^\circ\text{C}$ por 12 horas e, posteriormente, calcinadas a $550 \text{ }^\circ\text{C}$ para completar o processo de obtenção das zeólitas ácidas. Os catalisadores sintetizados foram caracterizados por difração de raios X (DRX) e fisissorção de N_2 . As análises de DRX indicaram uma pequena perda na cristalinidade das zeólitas, porém sem levar à completa amorfização dos catalisadores hierárquicos. A análise da porosidade revelou uma modificação no volume total e um aumento no tamanho dos poros, indicando a efetiva obtenção de diferentes zeólitas contendo mesoporos. Outras caracterizações serão utilizadas para a análise dos catalisadores, como espectrometria de fluorescência de raios X (FRX), dessorção a temperatura programada de amônia (TPD- NH_3) e Espectroscopia de Infravermelho com adsorção de Piridina (IR-Piridina).





Niterói, RJ. 10 e 11 de abril de 2025

SÍNTESE, CARACTERIZAÇÃO E AVALIAÇÃO DA ATIVIDADE CATALÍTICA DE SAIS HETEROPOLIÁCIDOS DE ESTANHO

Robson Rodrigues¹, Abiney Lemos Cardoso², Lígia Maria Mendonça Vieira³

¹ Universidade Federal Fluminense, ² Instituto Federal do Espírito Santo, ³ Universidade Federal Fluminense (ligia_vieira@id.uff.br)

O objetivo deste trabalho é sintetizar, caracterizar e avaliar a eficiência de catalisadores sais heteropoliácidos de estanho e do Cloreto de estanho em reações de esterificação de ácido oleico. Os princípios da “química verde” vem sendo cada vez mais aplicados em atividades de Ensino/Pesquisa e Extensão buscando a sustentabilidade e do desenvolvimento ambiental através dos recursos renováveis como o aproveitamento da biomassa e seus rejeitos para produção de produtos de maior valor agregado. Neste trabalho, avaliou-se a eficiência de catalisadores sais heteropoliácidos de estanho (II) em reações de esterificação de ácido graxo. Os sais heteropoliácidos de estanho foram preparados utilizando-se 0,655 mmol de ácido 12-tungstofosfórico (HPW) dissolvido em água sendo lentamente adicionado às respectivas soluções etanólicas de cloreto de estanho diidratado contendo as quantidades de 0,32 mmol, 0,65 mmol, e 0,98 mmol respectivamente para a produção dos sais $\text{Sn}_{0,50}\text{H}_2\text{PW}_{12}\text{O}_{40}$ **(1)**, $\text{SnHPW}_{12}\text{O}_{40}$ **(2)** e $\text{Sn}_{1,50}\text{PW}_{12}\text{O}_{40}$ **(3)**. Cada sistema foi tampado e mantido durante 3 horas sob agitação magnética e em seguida foram mantidos em repouso durante 24 horas, em temperatura ambiente sendo finalmente mantidos sob agitação à temperatura de 60°C até a completa evaporação. O sólido resultante foi seco em mufla, a 80°C, por 4 horas. As reações de esterificação foram conduzidas em um balão de vidro tritubulado de 25 mL em banho-maria à 55°C e agitação magnética. Em seguida adicionou-se ácido oleico (1,0 mmol), metanol (155 mmol) e o catalisador (0,1 mmol). Os resultados das Análises Potenciométricas permitiram calcular a quantidade de prótons substituídos por cátions de Sn (II) sendo eles 1,03 ; 2,30 e 2,56 para os sais heteropoliácidos **(1)**, **(2)** e **(3)** respectivamente. Nas análises de FTIR observou-se as principais bandas características nos sais, que correspondem as mesmas regiões estruturais relacionadas ao ânion de Keggin, 1100 a 700 cm^{-1} , evidenciando sua integridade estrutural durante o processo de troca iônica. A determinação do nível de hidratação dos catalisadores foi efetuada a partir das curvas termogravimétrica, onde foram encontrados um quantitativo de massa de água de 19 e 24 para os catalisadores **(2)** e **(3)** respectivamente. Os sais mostraram alta estabilidade térmica, não exibindo perdas de massas significativas na faixa de temperatura maior que 600 °C, o que corresponde a decomposição da estrutura de Keggin, que é um fator importante para que sua atividade catalítica seja mantida. Nas análises de cromatografia gasosa, os catalisadores atingiram conversões a oleato de metila, de mais de 90 % nas duas primeiras horas de reação sendo que o HPW converteu 60% no mesmo tempo. Em 8 horas de reação o catalisador **(1)** obteve 100% de conversão.



Niterói, RJ. 10 e 11 de abril de 2025

VARIAÇÃO DA QUANTIDADE DE SÍLICA COMO MOLDE NA SÍNTESE DE CARBONOS MESOPOROSOS

Isabelly André Gomes da Silva Cardoso¹, Talita de Paiva Rosa¹, Monica Regina da Costa Marques Calderari¹, Angela Sanches Rocha¹

¹Instituto de Química, Universidade do Estado do Rio de Janeiro, Maracanã, Rio de Janeiro

Isabelly.david@gmail.com

Carbonos mesoporosos são materiais conhecidos por terem elevada área específica, podendo por isso serem utilizados como catalisadores ou adsorventes em diferentes processos de interesse industrial. Nesta perspectiva, existem diferentes estudos sobre a influência dos parâmetros de síntese nas características do material final, sobretudo o custo de produção e a estrutura porosa, mas no caso da síntese via uso de moldes, as propriedades deles também é importante. Deste modo, o objetivo deste trabalho é avaliar a influência da quantidade da sílica usada como molde nas propriedades dos carbonos mesoporosos obtidos, visando à diminuição da massa usada, para redução do custo de produção. A metodologia para síntese usada se baseia no procedimento utilizado por YU et al. (2001), sendo que a quantidade relativa de sílica é variada. Tipicamente mistura-se água destilada, ácido sulfúrico e sacarose, como fonte de carbono, e adiciona-se esta mistura à sílica Aerosil-200 em rota-evaporador, agitando-se o conjunto 1h a temperatura ambiente e depois por 2,5 h a 100 °C. Após esta etapa de polimerização a reação continua na mesma temperatura por mais 2,5 h e sob vácuo e em seguida o material é seco por 18 h a 100 °C. A etapa seguinte é a carbonização em atmosfera inerte, realizada de modo que se tenha uma proporção de 0,12 g de sólido por vazão de 1 mL/min de hélio, com taxa de aquecimento de 3°C/min da temperatura ambiente até 800°C, permanecendo nesta temperatura final por 7 horas. A etapa final é a remoção da sílica usando solução de KOH 1 mol/L durante 12 h a temperatura ambiente, seguida de filtração a vácuo, lavagem com água e secagem a 100 °C. As quantidades investigadas foram 6; 8 e 10 g de sílica para 5 g de sacarose. Os sólidos foram caracterizados por fisissorção de nitrogênio e espectroscopia de absorção do infravermelho por transformada de Fourier (FTIR). Os resultados de FTIR indicaram que, nas condições utilizadas, a sílica Aerosil-200 foi removida, gerando o material carbonáceo. Em relação à análise textural, verificou-se que os materiais obtidos apresentaram diferentes valores de área ao variar a quantidade de sílica, apresentando área de mesoporos de 179.0465 m²/g, 431.1046 m²/g e 633.8103 m²/g.





6º Encontro de
Catálise
Regional 2
RJ, MG e ES – 2025



SBCAT
SOCIEDADE BRASILEIRA DE CATÁLISE

OUTRAS APLICAÇÕES





Niterói, RJ. 10 e 11 de abril de 2025

DIMENSIONALITY REDUCTION APPROACH FOR DRIFTS-MS DATA: APPLICATION ON PURE MGO CATALYST IN ETHANOL-TO-1-BUTANOL CONVERSION

Caio H. Pinheiro^{1*}, Rodrigo Bonfim¹, Henrique P. Pacheco¹

¹ Chemical Engineering Program, COPPE/UFRJ, 21941-972, Rio de Janeiro - RJ, Brazil

* cpinheiro@peq.coppe.ufrj.br

The unambiguous assignment of vibrational modes in the infrared (IR) in the Diffuse Reflectance Infrared Fourier Transform Spectroscopy coupled with Mass Spectrometry (DRIFTS-MS) experiments is not always an easy task. Bands overlapped in mid-IR spectroscopy reduce the interpretative capacity, especially between 1000-1800 cm^{-1} . We developed a dimensionality reduction methodology, condensing variables as a function of temperature and focusing on the main effects. This allows for faster and more precise analysis while preserving the essential information. In-situ DRIFTS-MS spectra were acquired from 400 to 4000 cm^{-1} . The MgO sample was pretreated at 373 K under N_2 , followed by ethanol adsorption for 30 min at 323 K with under 5 % ethanol/ N_2 stream. Afterward, ethanol desorption/reaction was conducted up to 773 K, with measurements every 5 K, and outlet products were monitored inline by the mass spectrometer. Twenty-eight bands were manually identified, representing vibration frequencies associated with organic species present on the catalyst surface. Principal Components Analysis (PCA) was performed with the goal of preserving 95 % of the data variance, resulting in two principal components. Thus, the new dataset to be analyzed corresponds to approximately only 7 % of the original DRIFTS-MS data size. Our results suggest clear trends on how different infrared vibrations correlate to each other. For instance, the stretching modes and angular deformations attributed to the methyl and methylene groups; moreover, we have seen that the non-assigned 1583 cm^{-1} band presents an inverse correlation with the symmetric and asymmetric stretching modes of the methyl group. Nonetheless, not all correlations displayed clear phenomenological reasoning, given that this band also shows a strong positive correlation with the methylene bending mode, assigned in 1301 cm^{-1} . This strong correlation suggests that the unknown band may somehow be linked to another band or even represent a second vibrational mode of the same chemical group. After all, DRIFTS-MS is a qualitative technique that displays limited numerical interpretation.





Niterói, RJ. 10 e 11 de abril de 2025

EFEITO DA DESSILICAÇÃO NO DESEMPENHO DE CATALISADORES Cu-ZnO-Al₂O₃/ZSM-5 PARA HIDROGENAÇÃO DE CO₂ PARA PRODUÇÃO DE DME

P. L. L. Mello¹, D. A. Daniel¹, A. C. P. Guimarães^{1,2}, L. R. F. Coelho^{1,3}, G. L. Catuzo⁴, G. S. Zanelli⁴, A. A. A. da Silva¹, E. M. Assaf⁴, L. V. Mattos^{1*}

¹ Universidade Federal Fluminense, Niterói 24210-240, Brasil

² Universidade do Estado do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro 20550-900, Brasil

³ Instituto Militar de Engenharia, Rio de Janeiro 22290-270, Brasil

⁴ Universidade de São Paulo, São Carlos 13566-590, Brasil

* Autor correspondente: e-mail: lisianemattos@id.uff.br

O estudo objetiva avaliar o efeito da dessilicação ao comparar o desempenho de catalisadores, à base de ZSM-5, na hidrogenação de CO₂ para síntese direta de dimetil éter (DME).

A produção de DME, a partir da hidrogenação do CO₂, oferece uma rota promissora para a mitigação dos gases do efeito estufa. Para aproveitar o potencial do DME como um combustível limpo, é essencial desenvolver catalisadores ativos e seletivos. Os catalisadores bifásicos possuem fases distintas que atuam de maneira sinérgica para facilitar a formação de DME em uma única etapa. No caso dos catalisadores Cu-ZnO-Al₂O₃/ZSM-5, a fase metálica (Cu-ZnO-Al₂O₃) desempenha a função de hidrogenar o CO₂ a metanol intermediário. A fase ácida (ZSM-5) catalisa a desidratação subsequente do metanol para formar DME. A dessilicação da zeólita, suporte de alta área específica, pode aprimorar a interação entre as fases. A criação de estruturas hierárquicas após a dessilicação aumenta a acessibilidade dos sítios ácidos, melhora a difusão dos reagentes e ajuda a prevenir a sinterização da fase metálica.

Como parte da metodologia empregada, HZSM-5 foi sintetizada conforme patente EP1707533 (A1). A ZSM-5 dessilicada (ZSM-5_{des}) foi preparada seguindo a literatura. Os catalisadores foram preparados por mistura física de óxidos metálicos (Cu, Zn, Al, razão molar 6:3:1) com a zeólita. Os catalisadores resultantes, 6CZA_ZSM5_{des} e 6CZA_ZSM5, foram caracterizados utilizando DRX, fisissorção de N₂, MRV, TPR e espectroscopia IR. A hidrogenação de CO₂ foi realizada a 240°C e 28 ou 40 bar, com velocidades espaciais (GHSV) de 2400 ou 3600 mL h⁻¹ g⁻¹, e razão de CO₂/H₂ igual a 3.0. Antes da reação, os catalisadores foram reduzidos a 290°C com H₂.

Os resultados de DRX confirmaram a estrutura MFI em ambas as amostras. Picos correspondentes aos óxidos de Al, Cu e Zn também foram observados. A análise por fisissorção de N₂ mostrou que a dessilicação aumentou a mesoporosidade. Adicionalmente, aumentar os valores de GHSV reduz a conversão e seletividade nos dois catalisadores.

Nos testes catalíticos, o catalisador dessilicado apresentou uma conversão de CO₂ levemente menor em todas as condições testadas, mas maior seletividade para DME em comparação ao catalisador 6CZA/ZSM-5. A seletividade para DME do catalisador dessilicado atingiu 64,2% a 28 bar e 67,7% a 40 bar, enquanto a amostra não dessilicada apresentou os valores de 36,4% e 26,9%, respectivamente. O aumento da pressão favoreceu tanto a conversão de CO₂ quanto a seletividade para DME no catalisador dessilicado. Maiores valores de GHSV reduziram a conversão e a seletividade em ambos os catalisadores.



Niterói, RJ. 10 e 11 de abril de 2025

EFEITO DA METODOLOGIA DE PREPARO NO DESEMPENHO DE CATALISADORES À BASE DE ZEÓLITAS USY HIERÁRQUICAS NA REFORMA SECA DO BIOGÁS

**Amanda de C. P. Guimarães^{1,2}, Helena R. Ribeiro², Andressa A. A. Silva²,
Rita de C. C. Simões², Lisiane V. Mattos², Cristiane A. Henriques¹**

¹ Universidade do Estado do Rio de Janeiro, Programa de Pós Graduação em Engenharia Química

² Universidade Federal Fluminense, Departamento de Engenharia Química

A emissão de biogás, que contém altos níveis de CO₂, contribui para o efeito estufa. A conversão do biogás em gás de síntese por meio da reforma seca do metano (DRM) é uma abordagem promissora, com a produção de hidrogênio (H₂) como produto de alto valor agregado. Catalisadores à base de níquel são amplamente utilizados na DRM. O uso de zeólitas como suporte, devido às suas propriedades, como alta estabilidade térmica e microporosidade uniforme, torna-se uma alternativa interessante para esse processo. Zeólitas hierárquicas, obtidas por desaluminação e dessilicação, podem melhorar o desempenho do catalisador, desde que haja um equilíbrio adequado entre micro e mesoporosidade. Esse equilíbrio cria um ambiente versátil que favorece o desenvolvimento de centros metálicos bem definidos, facilitando o controle do tamanho das partículas e aumentando a área específica. Este estudo investigou o efeito da impregnação de níquel (3% em peso) durante os processos de desaluminação/dessilicação em zeólitas USY para a DRM. A zeólita USY foi tratada com EDTA para desaluminação e com NaOH e TPAOH para dessilicação, formando a estrutura hierárquica. As amostras foram impregnadas com níquel em diferentes estágios: antes (Ni/USY_IDD), entre os tratamentos (Ni/USY_DID) e após (Ni/USY_DDI) os tratamentos. As caracterizações dos catalisadores foram realizadas por DRX, FRX, adsorção de nitrogênio e TPR. A DRM foi realizada a 800 °C, com uma razão molar CH₄/CO₂ de 1:1 por 24 horas. Os resultados mostraram que os tratamentos não causaram colapso na estrutura da zeólita, e o aumento da razão Si/Al indicou uma maior remoção de alumínio. A impregnação de níquel reduziu a área específica e a porosidade da zeólita. Contudo, os tratamentos realizados aumentaram o volume de mesoporos para todas as amostras. As amostras Ni/USY_IDD e Ni/USY_DID apresentaram menor redutibilidade. A conversão de metano foi maior nas amostras tratadas, destacando-se a Ni/USY_DDI (76%) em comparação com a amostra não tratada (34%). Observou-se também uma perda de atividade catalítica, especialmente para a amostra Ni/USY_IDD. Grande parte das partículas metálicas de Ni migrou para os poros menores dentro da estrutura USY, o que resultou em maior dispersão de Ni, mas limitou o acesso de CH₄ e CO₂ aos sítios metálicos e básicos.





Niterói, RJ. 10 e 11 de abril de 2025

APLICAÇÃO DAS ZEÓLITAS ZSM-5 ANTES E APÓS A VIRADA PARA O SÉCULO XXI - UM ESTUDO DE REVISÃO

João Emanuel Cabral da Mata^{1*}, Mateus Gonçalves dos Santos², Eliane Soares da Silva², Silvia Fernanda Moya¹, Raphael Soeiro Suppino¹

¹ Universidade Estadual de Campinas (UNICAMP)

² Universidade Federal de São Carlos (UFSCar)

*j289291@dac.unicamp.br

A indústria depende de diversos tipos de materiais sólidos para pleno funcionamento, os quais são aplicados em diferentes processos, como na adsorção e catálise. Dentre estes materiais, as zeólitas se destacam em virtude da variedade de estruturas e a suas propriedades particulares, como microporosidade ordenada, estabilidade térmica e química, elevada área superficial, acidez ajustável e seletividade de forma. A exemplo dessas estruturas zeolíticas, a zeólita ZSM-5 (*zeolite Socony Mobil 5*) é uma das que apresenta maior aplicabilidade industrial, em virtude da alta concentração de sítios ácidos de Brønsted e de Lewis, canais de difusão bidirecional, capacidades de adsorção e catálise. Portanto, este trabalho teve como propósito realizar um levantamento bibliográfico sobre zeólitas ZSM-5, suas propriedades, aplicações e impacto na atualidade. Para isso, foram utilizadas as palavras-chave “zeolite”, “applications” e “ZSM-5” nos intervalos de tempo de 1900 a 2000 e após os anos 2000 em revistas de alto fator de impacto, nas principais bases de dados e portais de pesquisa como Science Direct, Web of Science e Scopus. Por meio dos resultados obtidos, foi possível observar que no século XX a zeólita ZSM-5 começou a ser estudada principalmente a partir da década de 80, sendo amplamente empregada em reações de catálise heterogênea, por exemplo na produção de compostos aromáticos como a gasolina a partir do metanol, no refino de petróleo para a produção de combustíveis de maior qualidade e menores teores de compostos sulfurosos ou também no tratamento de efluentes por adsorção para a remoção de contaminantes de águas residuais. Com a virada para o século XXI, a quantidade de publicações aumentou exponencialmente, ultrapassando 24 mil trabalhos envolvendo as áreas descritas anteriormente, assim como novas frentes de pesquisa como a química verde em que a ZSM-5 com cátions de cobre convertem CH_4 em CH_3OH , na indústria farmacêutica como carreador de anti-inflamatórios e na agricultura como transportador de nutrientes como potássio, enxofre e nitrogênio para as plantas, na química fina em que a ZSM-5 é aplicada na epoxidação do R-(+)-limoneno e na valorização de moléculas plataforma como o furfural oriundo da biomassa lignocelulósica que pode ser utilizado para produção de compostos de alto valor agregado como a gama-valeroctona, levulinato de isopropila etc. Nesse contexto, este trabalho identificou por meio da revisão da literatura novas tendências a serem preenchidas com aplicação da zeólita ZSM-5, além das áreas comumente estudadas como FCC e adsorção de poluentes, destaca-se na atualidade sua utilização na área de química verde e fina, captura de carbono e poluentes de efluentes líquidos e gasosos, eletrônica e nanomateriais, biomedicina, indústria aeroespacial, entre outros exemplos.





Niterói, RJ. 10 e 11 de abril de 2025

CATALISADOR HÍBRIDO DE Fe/Cu EM HZSM-5 APLICADO NA SÍNTESE DIRETA DO DME

Carolina Cazelato Gaioto¹, Alexander Caytuero Villegas, Fabio Souza Toniolo*, Martin Schmal, Argimiro Resende Secchi.

¹ cgaioto@peq.coppe.ufrj.br, * toniolo@peq.coppe.ufrj.br

O aquecimento global está ligado à emissão de gases de efeito estufa, especialmente o dióxido de carbono (CO_2). Dado o impacto ambiental desses gases, é urgente desenvolver estratégias de mitigação que promovam a sustentabilidade e a economia circular. O uso de hidrocarbonetos baratos, como metano (CH_4), e CO_2 na produção de combustíveis e produtos químicos é uma alternativa promissora. O desenvolvimento de catalisadores híbridos visa sistemas mais compactos, como a síntese direta de dimetil éter (DME). Neste estudo, foi preparado um catalisador de ferro e cobre suportado em HZSM-5 por co-precipitação, denominado FCZ80. O desenvolvimento do catalisador considerou a produção de metanol (catalisada por Cu), sua desidratação para DME (em sítios ácidos de Brønsted de HZSM-5) e a reação Water-Gas Shift (WGS) (em sítios metálicos de Cu e Fe). Reações secundárias influenciam a distribuição dos produtos, dependendo da acidez do catalisador e das condições operacionais. O material foi caracterizado por FRX, DRX, NH_3 -TPD, CO_2 -TPD e H_2 -TPR. O FRX indicou 5,4% de Fe_2O_3 e 30% de CuO e a dessilicação do catalisador. As análises de TPD confirmaram sítios ácidos e básicos, e o TPD de CO_2 mostrou evolução de espécies como H_2O , CO, O_2 e CO_2 , sugerindo boa ativação do CO_2 . O H_2 -TPR revelou redução a cerca de 350 °C com adição de Fe. A espectroscopia de Mössbauer mostrou mudanças nos íons de Fe^{3+} , enquanto o DRX indicou interação forte entre Fe e Cu. Os testes catalíticos foram realizados a 30 bar, com GSVH de 6000 $\text{mL}\cdot\text{g}^{-1}\cdot\text{h}^{-1}$ e razão $\text{H}_2/\text{CO}_2 = 3$, a 220, 250 e 280 °C por 24 horas, com aumento progressivo da temperatura. O catalisador mostrou conversão de 5% e seletividade para DME (SDME) de 64% a 220 °C; 6% de conversão e SDME de 57% a 250 °C; e 10% de conversão e SDME de 41% a 280 °C. Com o aumento da temperatura, a SDME diminuiu, enquanto a seletividade para metanol aumentou. No entanto, a soma das seletividades de metanol e DME permaneceu em torno de 90%. Após 24 horas a 280 °C, o catalisador foi mantido a 220 °C por 6 horas, mostrando boa estabilidade e sem desativação. Além da boa seletividade, as reações ocorreram com velocidade espacial superior à média da literatura, sugerindo a necessidade de otimização. Os resultados indicam que o catalisador tem desempenho promissor para a síntese direta de DME a partir da hidrogenação do CO_2 .





MODELAGEM CINÉTICA DA PIRÓLISE DO ENDOCARPO DE MACAÚBA

Guilherme Vittorazzi Salvador¹, Evelyn Muguet Ferreira¹, Fabio Souza Toniolo¹, Vera Maria Martins Salim¹, Argimiro Resende Secchi^{1*}

¹ Programa de Engenharia Química da COPPE/UFRJ, gsalvador@peq.coppe.ufrj.br,
* arge@peq.coppe.ufrj.br

Pesquisas recentes têm impulsionado o desenvolvimento da cadeia produtiva da macaúba. A pirólise do seu endocarpo surge como uma alternativa promissora para a obtenção de coprodutos de alto valor agregado, como biocombustíveis, adsorventes, suporte para catalisadores e corretivos de solo. Neste estudo, foram determinados parâmetros cinéticos para a modelagem matemática da pirólise do endocarpo de macaúba, utilizando dados experimentais de termogravimetria derivada (DTG) ajustados pelo Modelo de Energia de Ativação Distribuída (DAEM)¹. Este modelo considera a ocorrência de múltiplas reações paralelas de primeira ordem, com um fator pré-exponencial comum (k_0) e uma distribuição contínua de energias de ativação, dependentes da conversão, e estimadas a partir de dados experimentais. Para a estimação dos parâmetros cinéticos foram realizadas análises termogravimétricas em um equipamento HITACHI TGA/DSC (modelo STA7300) sob fluxo de N_2 ($80 \text{ mL}\cdot\text{min}^{-1}$) em diferentes taxas de aquecimento (2, 5, 10, 15 e $20^\circ\text{C}/\text{min}$). Paralelamente, a pirólise foi realizada em um reator tubular de quartzo com fluxo de N_2 acoplado a um analisador de gases (modelo MKS2030). Os resultados mostram que o modelo DAEM descreve de forma eficaz a degradação da celulose e da hemicelulose em toda a faixa de conversão ($R^2 > 0,99$), com distribuição de energia de ativação entre 165-171 kJ/mol e 149-166 kJ/mol, respectivamente. Para a lignina, a correlação ao modelo foi satisfatória até 40% de conversão ($R^2 > 0,94$), com distribuição de energia de ativação variando de 175 a 285 kJ/mol. A degradação térmica de cada polímero foi relacionada com os produtos gasosos e vapores (CH_4 , CO, CO_2 , metanol, formaldeído, etano, propano, etileno, propileno, tolueno, SO_3 , HCN, NO e NH_3). Em síntese, o estudo cinético baseado em análises termoquímicas possibilitou diferenciar o comportamento da pirólise de cada polímero da biomassa e seus respectivos produtos.





Niterói, RJ. 10 e 11 de abril de 2025

EFEITO CATALÍTICO PROMOVIDO POR UM COMPLEXO DE NIÓBIO NA HIDRÓLISE DE UM ÉSTER DE FOSFATO

Gabriela G. Travassos¹ e Eduardo H. Wanderlind^{1*}

¹ Instituto de Química, Universidade Federal Rural do Rio de Janeiro (UFRRJ), 23.897-000, Seropédica/RJ, Brasil. * ewanderlind@ufrj.br

Materiais baseados em nióbio tem sido utilizados como catalisadores em várias reações devido a sua capacidade de coordenação com diferentes substratos. Esse nicho de aplicações é particularmente interessante para o Brasil considerando que o país e o Canadá possuem juntos mais de 98% das reservas de nióbio do mundo. Entre os materiais de nióbio que se podem citar, destacam-se os pentóxidos de nióbio (Nb_2O_5), que podem ser preparados com diferentes propriedades dependendo do método de preparo e tratamento térmico empregado. Por exemplo, a Companhia Brasileira de Metalurgia e Mineração (CBMM) comercializa diferentes óxidos, entre eles o chamado “ultrapuro” (UP), e o “grau ótico” (GO), além de outros compostos, como o oxalato amoniacal de nióbio (ANO). Uma aplicação ainda não relatada de materiais de nióbio refere-se ao uso destes como catalisadores para reações de degradação de compostos organofosforados. Nesse sentido, tais materiais poderiam ser utilizados para a destoxificação catalítica de tais compostos visando segurança química e tratamento de contaminantes ambientais. Considerando a participação do Brasil na exploração do nióbio, este projeto teve como objetivo encontrar novas aplicações para compostos de nióbio já existentes no mercado. Mais especificamente, buscou-se avaliar o ANO como catalisador homogêneo para a hidrólise de ésteres de fosfato.

Como ponto de partida, avaliou-se a reação de hidrólise do substrato *p*-nitrofenil fosfato (*p*NPP) em presença de ANO, considerando os possíveis cenários de coordenação das espécies monoaniônica e dianiônica do monoéster de fosfato ao complexo precursor. As reações foram monitoradas por espectrofotometria UV/Vis utilizando um equipamento Shimadzu 2700, com temperatura controlada. A adição de quantidades crescentes de ANO a soluções contendo *p*NPP promove inicialmente um deslocamento do máximo de absorção do substrato no espectro UV/Vis para menores comprimentos de onda, e o monitoramento das variações espectrais por intervalos de tempo maiores permite calcular os valores de velocidade inicial em diferentes condições experimentais. Resultados preliminares mostram que a hidrólise do *p*NPP pode ser acelerada em ~35 vezes, em comparação com a hidrólise espontânea do substrato. Atualmente, experimentos para detalhar a(s) estrutura(s) das espécies reativas estão em andamento, e perspectivas incluem avaliar os efeitos catalíticos promovidos por ANO na hidrólise de di- e triésteres de fosfato.





Niterói, RJ, 10 e 11 de abril de 2025

COMPLEXOS SUPRAMOLECULARES COMO CATALISADORES PARA A DEGRADAÇÃO DE ORGANOFOSFORADOS

**Nathália R. D. de Souza¹, Luana S. Gomes², Vanessa do Nascimento² e
Eduardo H. Wanderlind^{1*}**

¹ Instituto de Química, Universidade Federal Rural do Rio de Janeiro (UFRRJ), 23.897-000, Seropédica/RJ, Brasil. ² Instituto de Química, Universidade Federal Fluminense (UFF), 24.020-007, Niterói/RJ, Brasil. * ewanderlind@ufrrj.br

Macrosciclos orgânicos, como calix[n]arenos e pilar[n]arenos, destacam-se devido à capacidade de formação de complexos do tipo hóspede-hospedeiro, já que possuem uma cavidade que permite acomodar outras moléculas e/ou íons menores, orgânicos ou inorgânicos. Ainda que diversos estudos já tenham sido publicados envolvendo o tema de catálise supramolecular, existem nichos de investigação para a avaliação de sistemas complexos que combinem diferentes estratégias para a promoção de efeitos catalíticos, por exemplo, a estabilização de cargas negativas nos estados de transição e/ou intermediários, e o aumento da reatividade de substratos. Em particular, a associação de macrosciclos orgânicos, íons metálicos e substratos orgânicos para a composição de complexos ternários tem sido pouco estudada na elaboração e descrição de sistemas catalíticos. Nesse sentido, o presente trabalho busca desenvolver complexos supramoleculares ternários em meio aquoso através da associação de (i) um íon metálico, (ii) um macrosciclo orgânico (um *p*-sulfonatocalix[n]areno, SC_n, ou um pilar[n]areno), e (iii) um substrato orgânico cuja reação de hidrólise se deseja catalisar. Mais especificamente, o substrato avaliado nesse trabalho foi o triéster dietil 2,4-dinitrofenil fosfato (DEDNPP) como simulante de pesticidas organofosforados. Inicialmente, investigou-se a reação de hidrólise do DEDNPP em presença do macrosciclo SC₄ (carga 5-) isoladamente e, posteriormente, em presença de SC₄ e Mg(II). As cinéticas foram acompanhadas em meio aquoso, através de espectrofotometria de UV/Vis, sendo monitoradas em 400 nm pelo aparecimento da banda do produto 2,4-dinitrofenolato. Com isso, foi possível calcular as constantes de velocidade observadas (k_{obs}) em diferentes condições experimentais. O ajuste iterativo global dos perfis de concentração obtidos (k_{obs} vs. [SC₄] e k_{obs} vs. [Mg(II)]) permitiu avaliar os múltiplos equilíbrios de complexação e as constantes de velocidade dos processos que ocorrem em paralelo, e concluiu-se que o complexo ternário SC₄:Mg:DEDNPP acelera a hidrólise do substrato em até 12 vezes. Os dados sugerem que o efeito catalítico observado é, de fato, decorrente de um efeito de compartimentalização. Atualmente, experimentos com um macrosciclo de pilar[5]areno funcionalizado com imidazol estão em andamento a fim de se estabelecer um comparativo entre os efeitos promovidos por diferentes macrosciclos.





Niterói, RJ. 10 e 11 de abril de 2025

CONVERSÃO CATALÍTICA DE ETANOL EM GÁS LIQUEFEITO RENOVÁVEL SOBRE HIDROXIAPATITA

Thatiana de Souza Campos^{1,2}, Ricardo Lopes de Souza Júnior^{2,3}, Pedro Nothhaft Romano^{2,4,5}, João Monnerat Araujo Ribeiro de Almeida^{2,3*}

¹ Escola de Química, UFRJ, Rio de Janeiro, RJ, Brasil.

² LIPCAT (Laboratório de Intensificação de Processos e Catálise), UFRJ, Rio de Janeiro, RJ, Brasil.

³ Instituto de Química, UFRJ, Rio de Janeiro, RJ, Brasil.

⁴ Campus Duque de Caxias, UFRJ, Rio de Janeiro, Brasil.

⁵ Programa de Engenharia em Nanotecnologia, COPPE, UFRJ, Rio de Janeiro, RJ, Brasil.

* j.monnerat@iq.ufrj.br

A busca por processos químicos mais sustentáveis impulsiona o desenvolvimento de catalisadores eficientes. Neste estudo, investigou-se a aplicação da hidroxiapatita comercial, um material com sítios ácidos e básicos ajustáveis, na conversão catalítica de etanol para gás liquefeito renovável (GLR). Essa mistura de hidrocarbonetos leves, predominantemente com 3 e 4 átomos de carbono, é uma alternativa sustentável ao gás liquefeito de petróleo (GLP). A caracterização ácido-base do catalisador, por dessorção a temperatura programada (TPD) de CO₂ e NH₃, revelou uma densidade de sítios básicos de 1,3 mmol CO₂/g_{cat}, distribuídos entre moderados e fortes, e uma densidade de sítios ácidos de 0,7 mmol NH₃/g_{cat}, majoritariamente fortes. Os ensaios foram realizados em um sistema de fluxo contínuo, utilizando etanol como reagente e N₂ como gás de arraste, sob pressão ambiente. As reações ocorreram com 1 g de catalisador, variando a velocidade espacial (WHSV) para 0,94 h⁻¹ e 0,47 h⁻¹, e as temperaturas de reação para 400 °C e 500 °C. Esses parâmetros foram avaliados quanto à conversão de etanol, seletividade e estabilidade do catalisador em testes de longa duração. Os resultados mostraram que, a 400 °C, a conversão de etanol foi inferior a 10% para ambos os valores de WHSV. A 500 °C, com WHSV de 0,94 h⁻¹, a conversão alcançou 52%, com seletividade de 15% para GLR. Com a redução do WHSV para 0,47 h⁻¹, a conversão aumentou para 80%, com seletividade de 22%, evidenciando a influência da taxa de alimentação na distribuição dos produtos. O teste de longa duração, realizado por 30 horas, não demonstrou desativação do catalisador, uma vez que a conversão permaneceu estável. A análise termogravimétrica do catalisador exausto confirmou sua alta estabilidade térmica, evidenciada pela ausência de deposição significativa de coque. Além disso, técnicas de difração de raios X (DRX) e espectroscopia no infravermelho por transformada de Fourier (FTIR) demonstraram a preservação estrutural do material. Os resultados indicam que a hidroxiapatita é um catalisador estável e promissor para a conversão de etanol em hidrocarbonetos leves, contribuindo para processos mais sustentáveis e alinhados à transição energética.





Niterói, RJ. 10 e 11 de abril de 2025

APRIMORANDO O ENSINO DE CATÁLISE COM O USO DA REALIDADE AUMENTADA: UM APLICATIVO MÓVEL PARA VISUALIZAÇÃO 3D

Suzane Carvalho Rufino^{1*}, Henrique Poltronieri Pacheco¹

¹ Universidade Federal do Rio de Janeiro, Programa de Engenharia Química/COPPE/UFRJ, Centro de Tecnologia, Bl. G, Ilha do Fundão, Rio de Janeiro, RJ 21941-598, Brasil.. * suzane@peq.coppe.ufrj.br

O ensino de catálise heterogênea pode enfrentar desafios relacionados à visualização e compreensão das estruturas tridimensionais complexas como, por exemplo, as estruturas das zeólitas, amplamente utilizadas em processos industriais. Neste contexto, este trabalho apresenta o desenvolvimento de um aplicativo para dispositivos móveis de OS Android, baseado em Realidade Aumentada (RA), para auxiliar no ensino de catálise, permitindo a visualização interativa e tridimensional de estruturas zeolíticas no ambiente real do usuário. A metodologia envolveu o desenvolvimento de um aplicativo compatível com dispositivos móveis, utilizando a engine Unity, integrada ao SDK ARCore para a implementação da RA no aplicativo. Modelos tridimensionais das zeólitas mais comuns na literatura foram obtidos a partir do banco de dados do IZA e convertidos para as extensões necessárias para serem incorporados ao aplicativo, permitindo a visualização interativa das redes cristalinas, dos poros e dos canais das zeólitas. A interface foi projetada para ser intuitiva, facilitando a interação do usuário com os modelos 3D e permitindo ao usuário rotacionar e aplicar zoom nas estruturas, melhorando a compreensão de suas particularidades. O aplicativo traz informações de algumas características estruturais das zeólitas, como tamanho de poros e canais e permite a visualização dos átomos de oxigênio presentes nas estruturas demonstrando sua complexidade. O aplicativo foi testado com estudantes de pós-graduação em Engenharia Química, que avaliaram sua usabilidade e impacto no aprendizado por meio de questionários qualitativos e quantitativos. Como resultado, o aplicativo proporciona uma experiência imersiva e didática, permitindo que os alunos explorem as características das zeólitas de forma interativa. Além disso, os resultados indicam que o uso da RA proporcionou uma melhor compreensão das estruturas zeolíticas, tornando o aprendizado mais dinâmico e intuitivo, e demonstrando a eficiência da utilização da ferramenta como complemento ao ensino Assim, o uso de ferramentas tecnológicas inovadoras, como a Realidade Aumentada, mostra-se promissor para aprimorar o ensino de Engenharia Química, especialmente em tópicos abstratos e de difícil visualização.





Niterói, RJ. 10 e 11 de abril de 2025

CO₂ EMISSIONS ASSOCIATED WITH STEAM METHANE REFORMING – LAB SCALE TESTING

Horvat, A.^{1*}, Saavedra, J. M. M.², Poblete, I. B. S.², Romano, P. N.², de Almeida, J. M. A. R.^{2,3}

¹ Energy System Engineering Research Group, Thermal and Fluid Engineering Department, Carlos III University of Madrid, Leganés, Madrid, Spain

² Process Intensification and Catalysis Laboratory, Federal University of Rio de Janeiro, RJ, Brazil

³ Chemistry Institute, Federal University of Rio de Janeiro, RJ, Brazil

*Email: ahorvat@ing.uc3m.es

Hydrogen production is believed to be a route to decarbonize industries like transportation, manufacturing, and power generation. Currently, the process responsible for most of the hydrogen produced industrially is Steam Methane Reforming (SMR). Emissions from the SMR are divided into two categories, (i) direct emissions and (ii) indirect emissions. Direct emissions are process-related and result from methane reforming into water and carbon dioxide (CO₂). Direct emissions account for approximately 7 kg of CO₂ per kg of H₂ produced. Indirect emissions are non-process related derived from activities such as generation of electricity and synthesis of catalysts. The objective of this work is to conduct a gate-to-gate Life Cycle Analysis (LCA) using data from a lab-scale SMR facility. This work evaluates lab-scale processes testing novel catalysts in their development phase, followed by a comparison to the industrial-scale operations that employ commercial catalysts. Three distinct alumina-based catalysts were tested for H₂ production. (i) Ni/α-Al₂O₃, (ii) Ni/α-Al₂O₃@SiC1%, and (iii) 6NiO/θ-Al₂O₃@SiC60%. The core of the lab-scale facility is a fixed bed reactor (bed dimensions; ID: 9 mm L: 10 mm) with continuous CH₄ feed 25 ml/min. Reaction conditions are H₂O:CH₄ molar ratio 3:1, 650 °C, 1 bar, 72 h. The result of the analysis given as kgCO₂emitted/kgH₂produced combines both direct and indirect emissions. The selected Functional Unit (FU) of the analysis is therefore kgH₂produced. To address the objective, the work plan is divided into two phases. (1) Estimation of mass and energy balance computed on a spreadsheet. Input data for mass and energy balance derive from the experimental lab-scale testing (i.e., measurement of electricity consumption), relevant literature (i.e., device technical specification), and assumptions (i.e., heat losses). (2) Mass and energy balance are data input for the LCA study using licensed LCA software SimaPro 9.5.0.2 together with the inventory database Ecoinvent. This study preset impact category Climate Change, Long Term. 1 kgH₂produced generates 22.9, 7.1, 24.1 kgCO₂eq by using Ni/α-Al₂O₃, Ni/α-Al₂O₃@SiC1%, and 6NiO/θ-Al₂O₃@SiC60%, respectively. CO₂ emissions are predominantly affected by reaction conversion efficiency. Our results are in line with the reported 11.9 kgCO₂eq per 1 kgH₂produced in an industrial plant with an output of 392 MtH₂/day. The practical implication of this work is to elucidate CO₂ emissions as a function of a catalyst employed in the SMR process. Study shows that the catalysts Ni/α-Al₂O₃@SiC1% offer a favorable H₂ production/CO₂ emission ratio.





6° Encontro de
**Catálise
Regional 2**
RJ, MG e ES - 2025



www.sbcat.org/6ercat



secretaria@sbcat.org



@sbcatalise

