

INVESTIGAÇÃO SOBRE O EFEITO DE PROMOTORES ALCALINO-TERROSOS EM CATALISADORES A BASE DE ÓXIDOS DE FERRO: UM ESTUDO POR DIFRAÇÃO DE RAIOS X IN-SITU.

VI Congresso Online Nacional de Química, 1ª edição, de 22/04/2024 a 24/04/2024
ISBN dos Anais: 978-65-5465-089-2

SILVA; Jean Flávio da¹, OLIVEIRA; Alexandra Silva Monteiro de², RIBEIRO; Mauro Celso³

RESUMO

Investigação sobre o efeito de promotores alcalino - terrosos em catalisadores a base de óxidos de Ferro: um estudo por Difração de Raios X *in-situ*. Introdução A síntese de Fisher-Tropsch (SFT) consiste na conversão do gás de síntese, (CO+H₂), obtido da reforma a vapor do gás natural ou biomassa, para a produção de uma mistura de hidrocarbonetos, passível de uso como combustível automotivo. Co e Fe são catalisadores. Óxido de Ferro, promovido por potássio, é seletivo para a síntese de hidrocarbonetos pesados e olefinas. O metal alcalino exerce efeito eletônico que propicia maior retatividade da superfície catalítica com relação á adsorção adsorção dissociativa do CO, vista como uma etapa essencial para a SFT. Semelhante efeito poderia também ser observado com relação a outros metais alcalinos pesados (Rb e Cs) assim como em metais alcalino-terrosos. O efeito destes últimos metais tem sido pouco investigado, dada a sua reconhecida baixa efetividade como promotores para a SFT, em comparação com o K. Objetivos O presente trabalho trata-se de uma investigação por Difração de Raios X utilizando radiação síncrotron, da distribuição de fases cristalinas do catalisador, em função da natureza do metal alcalino-terroso, enquanto os mesmos é tratado termicamente sob fluxo de mistura CO+H₂. Métodos Precursores de catalisadores de Me:Fe₂O₃ (Me: Mg, Ca, Sr) com proporções atômicas Me:Fe 5:100 foram preparados por impregnação incipiente de Fe₂O₃ com carbonatos de metais alcalinos, seguida de calcinação a 500°C por 8 h em forno mufla. Difrátogramas de raios X ds amostras foram obtidos na linha XPD do LNLS-Campinas em um experimento que consistiu no tratamento térmico das amostras a 270°C por 1 h sob fluxo de 5% CO em He e posteriormente mais 1 h em mistura de H₂:CO (razão molar 0,7:1). Nessas condições difratogramas no intervalo de 10-110° foram obtidos com radiação de 7000 eV. Tratamento de dados foi feito por refinamento de Rietveld, utilizando o software GSAS II. Resultados O Refinamento dos difratogramas mostrou que: 1- A temperatura inicial da transição Fe₂O₃ a Fe₃O₄ diminui progressivamente de 215°C (catalisador não-promovido) a 168°C com promoção com Sr. 2- Metais alcalino-terrosos mais pesados (Ca, Sr) apresentaram maior efeito promotor na reação de carburização do ferro. Tais efeitos observados podem ser correlacionados com basicidade do promotor, sendo que em presença de metais volumosos (portanto mais básicos), há maior reatividade do catalisador em presença de misturas CO+H₂. Sugere-se, portanto, que a reconhecida baixa efetividade de tais metais alcalino-terroso possa advir de excessiva formação de carbono, derivada da rápida adsorção dissociativa do CO sobre a superfície do catalisador de ferro. Conclusões Metais alcalino-terrosos pesados (Ca, Sr) promovem a redução do Fe₂O₃ e a carburização do Fe₃O₄, gerando potencialmente sítios ativos para a SFT. Contudo, que, com relação ao promotor industrial K, tal efeito promotor torna-se excessivo, levando á desativação do catalisador por formação de carbono. Agradecimentos Laboratório Nacional de Luz Síncrotron (LNLS), do Centro Nacional de Pesquisa em Energia e Materiais (CNPEM), uma Organização Social supervisionada pelo Ministério da Ciência, Tecnologia e Inovações (MCTI). Resumo: Apresentação oral.

PALAVRAS-CHAVE: alcalino- terroso, Fischer-Tropsch, Rietveld, syngas

¹ Universidade Federal Fluminense, jeanflavio@id.uff.br

² Universidade Federal Fluminense, alexandraoliveira@id.uff.br

³ Universidade Federal Fluminense, mauroribeiro@id.uff.br

