



Evento	Salão UFRGS 2013: SIC - XXV SALÃO DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA DA UFRGS
Ano	2013
Local	Porto Alegre - RS
Título	Catalisadores de Rutênio Suportado Aplicados na Hidrogenação Parcial de Benzeno: Influência do Método de Síntese
Autor	LUCAS FOPPA
Orientador	GUNTER EBELING

A hidrogenação de compostos insaturados oriundos do petróleo permite a obtenção de produtos de maior valor agregado que servem frequentemente como matéria prima para indústrias de segunda geração. Este é o caso do benzeno, hidrogenado completamente a ciclohexano para posterior fabricação de caprolactama e ácido adípico, monômeros do nylon. Sob as condições de operação normalmente utilizadas na indústria, o produto de hidrogenação parcial, ciclohexeno, não é obtido. No entanto, há um grande interesse nesta reação, já que o ciclohexeno é mais versátil do que o ciclohexano e poderia portanto simplificar a rota sintética do nylon gerando economia de átomos e de energia.

Essas vantagens desencadearam esforços consideráveis na pesquisa de um processo de hidrogenação parcial de benzeno a partir da década de 60. O sistema reacional tradicionalmente usado é tetrafásico e consiste em uma fase orgânica (benzeno) e uma fase aquosa à qual se adicionam sais de metais de transição, hidrogênio molecular gasoso e catalisador sólido (em geral rutênio). Embora processos desse tipo tenham atingido recentemente rendimentos de ciclohexeno da ordem de 60%, a complexidade do sistema catalítico diminui sua viabilidade em escala industrial.

O objetivo deste trabalho é o desenvolvimento de um sistema catalítico simples para a hidrogenação parcial de benzeno. Especificamente, foi estudada a influência do método de síntese de catalisadores de rutênio suportados em alumina na sua performance frente à hidrogenação de benzeno.

Para tanto, amostras de catalisador foram sintetizadas a partir de duas rotas, a saber: (i) por redução dos precursores metálicos RuO_2 , RuCl_3 , $\text{Ru}(\text{ciclooctadieno})(\text{metil-alil})_2$ e $\text{RuCl}_2(\text{ciclooctadieno})$ em fase líquida (abordagem *bottom-up*) e (ii) *magnetron sputtering* (abordagem *top-down*). Os catalisadores foram caracterizados através das técnicas de difração de raios X (DRX), adsorção de nitrogênio (BET) e microscopia eletrônica de transmissão (MET) e posteriormente testados na catálise da reação de hidrogenação de benzeno sob condições brandas de temperatura e pressão (75°C e 4 bar). Para fins de comparação, a mesma reação foi realizada com um catalisador comercial equivalente.

A caracterização evidencia a presença de Ru^0 (hcp) na forma de nanopartículas (diâmetro médio de 3 a 6 nm) sobre a alumina de todas as amostras analisadas, com exceção do catalisador de precursor RuO_2 , que não se reduziu. Além disso, a estrutura mesoporosa da alumina é mantida após a síntese dos catalisadores.

Quanto aos testes catalíticos, o catalisador obtido pelo método físico (*magnetron sputtering*) apresenta a maior frequência de rotação dentre todos os sintetizados (90h^{-1}) e tem atividade catalítica comparável àquela do catalisador comercial. Por outro lado, o catalisador sintetizado por redução do precursor não-clorado $\text{Ru}(\text{ciclooctadieno})(\text{metil-alil})_2$ fornece os maiores rendimentos de ciclohexeno.

Esses resultados indicam que a técnica de *magnetron sputtering* pode fornecer catalisadores de rutênio tão ativos na hidrogenação de benzeno quanto os disponíveis no mercado. A presença de cloreto residual sobre o catalisador parece ser prejudicial para a seletividade da reação sob as condições destes experimentos.