



Evento	Salão UFRGS 2014: SIC - XXVI SALÃO DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA DA UFRGS
Ano	2014
Local	Porto Alegre
Título	Avaliação do efeito da adição de compostos orgânicos sobre as propriedades estruturais e catalíticas de catalisadores Co/SiO ₂
Autor	JULIANA SCHENHEL ZOTTI
Orientador	NILSON ROMEU MARCILIO

A adição de quantidades subestequiométricas de compostos orgânicos durante a síntese de catalisadores à base de Co revelou-se uma interessante estratégia para modificar as propriedades do material, especialmente no que se refere ao tamanho dos cristalitos da fase ativa. Essas modificações conduziram ao aumento das taxas de diferentes reações. Este trabalho pretende ampliar o entendimento desta proposta, avaliando a adição de diferentes compostos orgânicos e as modificações na estrutura e nas propriedades catalíticas de catalisadores Co/SiO₂.

As amostras foram preparadas pelo método de impregnação com excesso de solvente usando nitrato de cobalto hexaidratado como precursor e sílica aerosil como suporte. As amostras modificadas foram sintetizadas com a adição, à mistura aquosa, de sorbitol (Sor), ácido cítrico (Cit) ou D-glucose (Glu), com razão molar Co/composto orgânico de 5. Após as etapas de agitação à temperatura ambiente por 2 horas, houve a secagem a 60 °C por 14 h em estufa. O material na faixa $0,355 < dp < 0,500$ mm foi calcinado, sob fluxo de ar sintético, na temperatura de 400°C por 4 h. As amostras foram caracterizadas por *TGA-DTA*, *DRX*, *TPR* e *TPO*. As reações de decomposição do etanol foram conduzidas em reator de leito fixo a pressão atmosférica, entre 250 e 450°C, carga de 0,1 g, vazão de etanol de 0,4 mL/h e análise por cromatografia gasosa.

As curvas *TGA* mostraram picos associados à remoção de água e à decomposição dos nitratos e consequente formação dos óxidos de cobalto e um pico de forte intensidade associado à decomposição do composto orgânico. As curvas sugeriram uma mudança no mecanismo de decomposição do nitrato de Co com a adição de composto orgânico, sugerindo uma mudança no mecanismo de formação e crescimento dos cristalitos do óxido de cobalto. A análise *DRX* revelou uma estrutura pobremente cristalina para os materiais calcinados, com um largo pico centrado em $2\theta \approx 21^\circ$. Os perfis de *TPR* mostraram picos de redução na faixa de temperatura entre 200 e 500°C. Outro pico, em temperaturas acima de 600°C, também foi observado. Os picos associam-se à redução dos óxidos de cobalto com maior (200-500 °C) e menor (acima de 600 °C) tamanhos de cristalitos. A adição dos três tipos de compostos orgânicos diminuiu a área do pico em temperaturas menores e aumentou a área do pico em temperaturas mais elevadas. Desta forma, sugere que, para os catalisadores modificados, há um maior número de cristalitos de óxidos de Co com menores tamanhos. Apesar de ter sido sugerido menor tamanho de cristalitos de Co₃O₄ para as amostras modificadas, os resultados de atividade revelaram maiores conversões de etanol para a amostra não modificada. Além disso, as amostras modificadas formaram maior quantidade de coque, conforme mostrado pela análise *TPO* das amostras após os testes. O resultado possivelmente decorra da ausência da etapa de redução anteriormente à reação. Uma vez que as amostras modificadas provavelmente possuem cristalitos com menores tamanhos, a maior parte dos sítios ativos destas amostras não é reduzida à fase metálica (que é mais ativa) durante a própria reação, conduzindo a menores conversões de etanol para estas amostras preparadas com compostos orgânicos. A seletividade da reação, quando comparada em valores similares de conversão de etanol, mostrou maior seletividade para compostos oxigenados para as amostras modificadas.

Assim, os resultados sugeriram a formação de cristalitos de Co₃O₄ com menores diâmetros para as amostras modificadas. Entretanto, os resultados de atividade mostraram menores conversões de etanol para estas amostras em função das condições adotadas nos testes. As próximas etapas incluirão testes com redução em H₂ antes dos testes de atividade, bem como caracterizações adicionais das amostras, que ajudem a melhor avaliar os efeitos dos diferentes compostos orgânicos adicionados sobre as propriedades dos materiais.

