

## 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 da <sup>1</sup>, OLIVEIRA; Alexandra Silva Monteiro de <sup>2</sup>, RIBEIRO; Mauro Celso <sup>3</sup>**

### 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, ( $\text{CO} + \text{H}_2$ ), 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 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  $\text{CO} + \text{H}_2$ . **Métodos** Precursores de catalisadores de  $\text{Me:Fe}_2\text{O}_3$  (Me: Mg, Ca, Sr) com proporções atômicas Me:Fe 5:100 foram preparados por impregnação incipiente de  $\text{Fe}_2\text{O}_3$  com carbonatos de metais alcalinos, seguida de calcinação a  $500^\circ\text{C}$  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  $270^\circ\text{C}$  por 1 h sob fluxo de 5% CO em He e posteriormente mais 1 h em mistura de  $\text{H}_2:\text{CO}$  (razão molar 0,7:1). Nessas condições difratogramas no intervalo de  $10\text{-}110^\circ$  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  $\text{Fe}_2\text{O}_3$  a  $\text{Fe}_3\text{O}_4$  diminui progressivamente de  $215^\circ\text{C}$  (catalisador não-promovido) a  $168^\circ\text{C}$  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

<sup>1</sup> Universidade Federal Fluminense, jeanflavio@id.uff.br

<sup>2</sup> Universidade Federal Fluminense, alexandraoliveira@id.uff.br

<sup>3</sup> Universidade Federal Fluminense, mauroribeiro@id.uff.br

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+H<sub>2</sub>. 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 Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub> e a carburização do Fe<sub>3</sub>O<sub>4</sub>, gerando potencialmente sítios ativos para a SFT. Contudo, que, com relação ao promotor industrial K, tal efeito promotor torna-se excessivo, levando à 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

<sup>1</sup> Universidade Federal Fluminense, jeanflavio@id.uff.br

<sup>2</sup> Universidade Federal Fluminense, alexandraoliveira@id.uff.br

<sup>3</sup> Universidade Federal Fluminense, mauroribeiro@id.uff.br