

## Projeto para Bolsa PIBIC de iniciação científica

**Título:** Conversão catalítica da celulose com catalisadores de carbeto de tungstênio

**Orientadora:** Dra. Cristiane Barbieri Rodella

**Unidade do CNPEM:** Laboratório Nacional de Luz Síncrotron (LNLS)

### Introdução

A crescente demanda mundial por energia, as preocupações ambientais com poluição e emissão de gases de efeito estufa, além da escassez do petróleo no futuro, tem alertado e provocado ações governamentais, industriais e do meio científico para a busca de fontes alternativas de energia limpa e sustentável, como a biomassa. Neste contexto, a celulose é a fonte de biomassa de maior abundância e pode ser obtida como resíduo de diversos processos industriais, sem comprometer a geração de alimentos. Dentre estes resíduos, no Brasil destaca-se a geração do bagaço de cana-de-açúcar no processo de obtenção de etanol. Uma rota para o processamento da celulose do bagaço de cana é a catálise heterogênea. A utilização de um catalisador adequado em condições reacionais controladas (temperatura, pressão, agitação e tempo de reação) pode promover a transformação seletiva da celulose num produto químico de interesse industrial. O Laboratório Nacional de Luz Síncrotron (LNLS) em parceria com o Laboratório Nacional de Ciência e Tecnologia do Bioetanol (CTBE) desenvolve catalisadores a base de carbeto de tungstênio para a conversão da celulose do bagaço da cana-de-açúcar. Catalisadores a base de carbeto de metais de transição, como o carbeto de tungstênio ( $W_xC$ ,  $x=1$  ou  $2$ ) apresentam desempenho catalítico semelhante ao de metais nobres em reações catalíticas que envolvem hidrogênio. Deste modo, podem ser uma alternativa de eficiência equivalente e menor custo aos catalisadores a base de Ru e Pt aplicados em reações de conversão da celulose. As características texturais e estruturais do carbeto de tungstênio e conseqüentemente, seu desempenho catalítico estão estreitamente relacionados aos parâmetros de síntese. A correlação entre estes parâmetros deve ser compreendida, controlada e otimizada para ampliação das suas propriedades catalíticas.

## Objetivos

Estudo do desempenho catalítico de catalisadores à base de carbeto de tungstênio suportados em carvão ativo (WxC/C) na conversão da celulose de bagaço de cana-de-açúcar. As propriedades catalíticas serão avaliadas em função da promoção do catalisador com níquel e da funcionalização do suporte. Além disso, será feito um estudo da influência dos parâmetros reacionais como tempo de reação, temperatura e razão celulose/catalisador nos sistemas catalíticos que apresentem melhor desempenho. As propriedades estruturais e texturais dos catalisadores serão avaliadas e correlacionadas com as propriedades catalíticas.

## Metodologia

A preparação do sistema W/C na proporção de 30% em massa de W no suporte será feita pelo método de impregnação seca, a partir do gotejamento de uma solução aquosa de paratungstato de amônia. Após a impregnação com o precursor de W, parte da amostra será modificada com Ni (2% em massa) por impregnação seca de nitrato de níquel. Além do uso de carvão ativo como recebido, o mesmo passará por um processo de funcionalização com solução 15% de  $\text{SO}_3$  com objetivo de promover espécies  $\text{SO}_3\text{H}$  na superfície do carvão e estas facilitarem o processo de hidrólise da celulose.

Após impregnação e secagem, o material será carburado em reator de leito fixo sob fluxo da mistura  $\text{CH}_4/\text{H}_2$  e aquecimento contínuo até temperaturas na faixa de  $650\text{-}850^\circ\text{C}$ .

Os catalisadores serão caracterizados por difração de raios X nas linhas de difração de raios X do LNLS para determinar da fase carbeto de tungstênio formada ( $\text{W}_2\text{C}$  e/ou WC) e tamanho de cristalito. A área superficial, tipo e distribuição do tamanho de poros serão determinados por absorção de  $\text{N}_2$  a 77K em equipamento da Micromeritics disponível no CTBE. As reações catalíticas serão realizadas em reator batelada com dispositivo para armazenamento do catalisador instalado no laboratório de hidrogenação do LNLS. A celulose estará dispersa em água e o catalisador inserido quando as condições reacionais de temperatura, pressão e agitação foram atingidas. Após termino da reação e resfriamento os produtos da reação serão analisados por cromatografia líquida e gasosa. A partir de curvas de calibração os compostos formados serão identificados e os valores de atividade e seletividade do catalisador serão determinados.