



**Programa: Pós-Graduação em Engenharia Química, de Materiais e
Processos Ambientais**

Nível: Doutorado

**Os catalisadores de Cu/ZnO/Al e os a base de In₂O₃/ZrO₂ na
síntese de metanol a partir de CO₂: uma abordagem sob a luz das
vacâncias de oxigênio**

Bruna. J. da S. Bronsato, Lucia Gorenstin Appel, Roberto Ribeiro de Avillez
E-mail: brunabronsato@gmail.com, lucia.appel@int.gov.br, avillez@puc-rio.br

Os impactos climáticos causados pelas emissões de CO₂ na atmosfera têm impulsionado a utilização desse gás como matéria-prima na síntese de compostos, como o metanol. Esse álcool é uma molécula plataforma diferenciada e possibilita a geração de combustíveis e produtos químicos. Nesse contexto, os catalisadores tradicionais Cu/ZnO/Al^[1] e os promissores à base de In₂O₃ e ZrO₂^[2] destacam-se na produção de metanol a partir da hidrogenação do CO₂, utilizando H₂ proveniente da eletrólise da água. A pesquisa foi dividida em duas etapas. Inicialmente, investigou-se o papel do Al nos catalisadores de Cu/ZnO/Al. Quatro catalisadores foram preparados e avaliados por meio de testes catalíticos e técnicas de caracterização distintas (DRX, XPS, TPSR-CO₂/H₂, TPD-H₂O, TPD-CO₂, TPD-NH₃ e titulação com N₂O). Os resultados indicaram que a taxa máxima de formação de metanol está associada a um teor ótimo de Al (3,8% at), demonstrando uma correlação entre as vacâncias de oxigênio formadas e o desempenho catalítico. Foi demonstrado que o Al possui um papel indireto na síntese de metanol a partir do CO₂, favorecendo a formação de vacâncias de oxigênio, as quais podem ser defeitos cruciais para a formação de metanol. Na segunda etapa, explorou-se a relação entre vacâncias de oxigênio e desempenho na síntese de metanol pela hidrogenação do CO₂, utilizando catalisadores à base de In₂O₃ e ZrO₂. Modificações nas fases In₂O₃ e ZrO₂ otimizaram o sistema, favorecendo a formação de vacâncias de oxigênio. O inédito catalisador 0,6Pt-In₂O₃+6ZnZrO₂ apresentou o melhor desempenho, correlacionando-se fortemente com a presença de defeitos de oxigênio. Cálculos computacionais indicaram que a dopagem do In₂O₃ com Pt²⁺ ou da ZrO₂ com In³⁺, bem como a formação de uma interface entre In₂O₃-ZrO₂, podem aumentar a mobilidade de oxigênio, melhorando a taxa de formação de metanol. Assim, essa pesquisa destacou a relevância das vacâncias de oxigênio na síntese de metanol a partir da hidrogenação do CO₂, ao relacionar diferentes conjuntos de catalisadores e desenvolver um novo catalisador. As informações geradas nesse estudo são interessantes para o desenvolvimento e futura exploração industrial da síntese de metanol a partir do CO₂, contribuindo na viabilização de processos mais sustentáveis.

Referências Bibliográficas

- [1] D. Laudenschleger, H. Ruland; M. Muhler. Identifying the nature of the active sites in methanol synthesis over Cu/ZnO/Al₂O₃ catalysts. *Nature communications*, 11 (1): 3898, 2020.
- [2] ZHANG, Xueqiang et al. Support Effect and Surface Reconstruction in In₂O₃/m-ZrO₂ Catalyzed CO₂ Hydrogenation. *ACS Catalysis*. 12(7): 3868-3880, 2022.