# Catalisadores de níquel suportados em óxido de nióbio aplicados na reação de hidrodesoxigenação de ansiol

Eduarda H. M. Dias, Karen A. Resende, Igor F. Gomes, Glauco F. Leal, Cristiane B. Rodella, Daniela Zanchet

#### Resumo

O objetivo geral deste projeto é avaliar o desempenho de catalisadores de niquel suportados em óxido de nióbio na reação de hidrodesoxigenação (HDO) de anisol, uma molécula modelo do bio-óleo. As amostras de óxido de nióbio foram obtidas através da síntese hidrotérmica em diferentes temperaturas e volumes, tendo sido também avaliado o impacto da calcinação na fase cristalina formada. Foi utilizada a téncica de difração de raio X no estudo das fases cristalinas desse catalisador. Enquanto a temperatura de síntese e volume tiveram pouco impacto na fase formada, o aumento da temperatura de calcinação ao aumento de temperatura e transição de fase. Catalisadores com diferentes teores de níquel foram obtidos e avaliados na reação de HDO do anisol.

### Palavras-chave:

Nióbio, Catalisadores, Nanopartículas, Hidrodesoxigenaçã, bio-óleo.

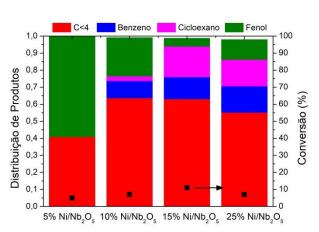
## Introdução

Devido as suas propriedades ácidas, o óxido de nióbio 6 utilizado na catálise como catalisador mássico ou como catalisador suportado, sendo ativo em diversas reações, em por exemplo, oxidações seletivas. como, hidrogenação, reações fotoquímicas e hidrodesoxigenação de biomassa. Entretanto, esse óxido apresenta diferentes estruturas cristalinas, as quais podem interferir produtos de catálise. Resultados anteriores<sup>2</sup> mostraram a dependência das fases cristalinas com a temperatura sendo que em temperaturas mais altas estruturas mais estáveis, como a monoclínica, são obtidas, e o sítio ativo ácido desse catalisador diminui. Desse modo, o objetivo deste trabalho é o estudo das diferentes fases cristalinas do óxido de nióbio obtido através da síntese hidrotérmica e sua dependência com a temperatura de síntese, visando aplicações na reação de hidrodedoxigenação (HDO) do anisol, uma molécula modelo do bio-óleo.

# Resultados e Discussão

Óxido de nióbio foi obtido através da síntese hidrotérmica, adaptando método descrito por Leal et al.2. Foram utilizadas duas temperaturas, 150 e 175 °C e diferentes volumes na síntese hidrotérmica. Também foram testadas duas temperaturas de calcinação, 400 °C e 600 °C. Os resultados de difração de raios X (DRX) mostraram que a temperatura de síntese e volume não tiveram impacto significativo no óxido formado, que apresentou a fase pseudo-hexagonal (TT). A calcinação a 400 °C não foi suficiente para alterar a cristalinidade do material. Apenas elevando-se a temperatura de calcinação para 600 °C foi possível obter a fase ortorrômbica (T) do óxido de nióbio. Amostras similares com fase TT e impregnadas com diferentes teores de níquel (5-25 %) foram testadas na reação de HDO do anisol. Os testes catalíticos foram realizados em reator tubular de leito fixo acoplado a um cromatógrafo a gás. Na reação de HDO, o anisol é vaporizado e reage com hidrogênio gasoso, formando benzeno, metano e água. Reações paralelas de hidrogenação e hidrogenólise podem ocorrer, levando a formação de outros produtos como fenol, ciclohexano, e frações leves (< C4). A Figura 1 mostra as distribuições de

produtos e conversão do anisol. É possível notar que o óxido de nióbio nas condições testadas favorece a hidrogenólise, favorecendo a formação de frações leves e a quebra da ligação O-CH<sub>3</sub>, produzindo fenol. Com o aumento do teor de níquel ocorre o favorecimento da reação de HDO desejada, com o aumento da fração de benzeno produzida. O aumento do teor de níquel também levou a um aumento do produto de hidrogenação do benzeno, o ciclohexano.



**Figura 1.** Testes catalíticos de HDO do anisol em catalisadores de níquel suportados em óxido de nióbio com fase cristalina TT. Condições reacionais: temperatura 200 °C, 0,2 ml/min anisol, 70 ml/min H<sub>2</sub>.

# Conclusões

Neste trabalho foi utilizada a síntese hidrotérmica para obtenção de óxido de nióbio e o impacto de alguns parâmetros na fase cristalina formada. Catalisadores suportados a base de níquel foram obtidos e testados na reação de HDO do anisol, sendo que o aumento do teor de níquel foi favorável a obtenção de benzeno.

# **Agradecimentos**

Agradecemos ao CNPq, CAPES e FAPESP pelo apoio financeiro.



<sup>&</sup>lt;sup>1</sup>. Hara, M. et al. J. Amer. Chem. Soc. .2011, 133 (12), 4224-4227.

<sup>&</sup>lt;sup>2</sup>. Leal, G.F. et al. J.Phys. Chem. C. 2019, 123, 3130-3143.