



UNICAMP

Catalisadores para Reação de Deslocamento Gás-Água

Ana Carmem Guilherme Bacchin (IC), Daniela Zanchet (PQ)

E-mail: carmem.bacchin@gmail.com

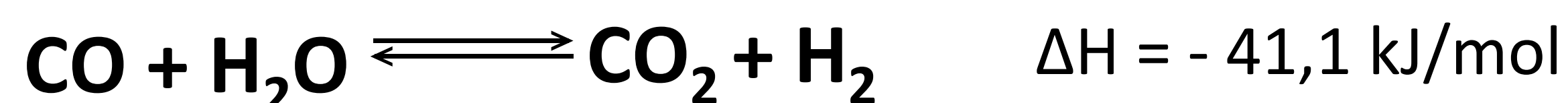
Instituto de Química - IQ, Universidade Estadual de Campinas - UNICAMP

Agência financiadora: PIBIC/CNPq; Palavras-Chave: Catalisador-Reação de deslocamento-Óxido de

ferro. Microscopia Eletrônica de Transmissão dos Catalisadores

Introdução

Reação de Deslocamento Gás-Água (WGSR)



Objetivo: Estudo termodinâmico e cinético da WGSR, abordando a influência de catalisadores na conversão e seletividade da reação.

Catalisadores avaliados:

- ✓ Catalisador Industrial CuO-ZnO, de baixas temperaturas (LTS).
- ✓ Catalisador Nanoestruturado Fe₃O₄/Al₂O₃, de altas temperaturas (HTS).

Metodologia

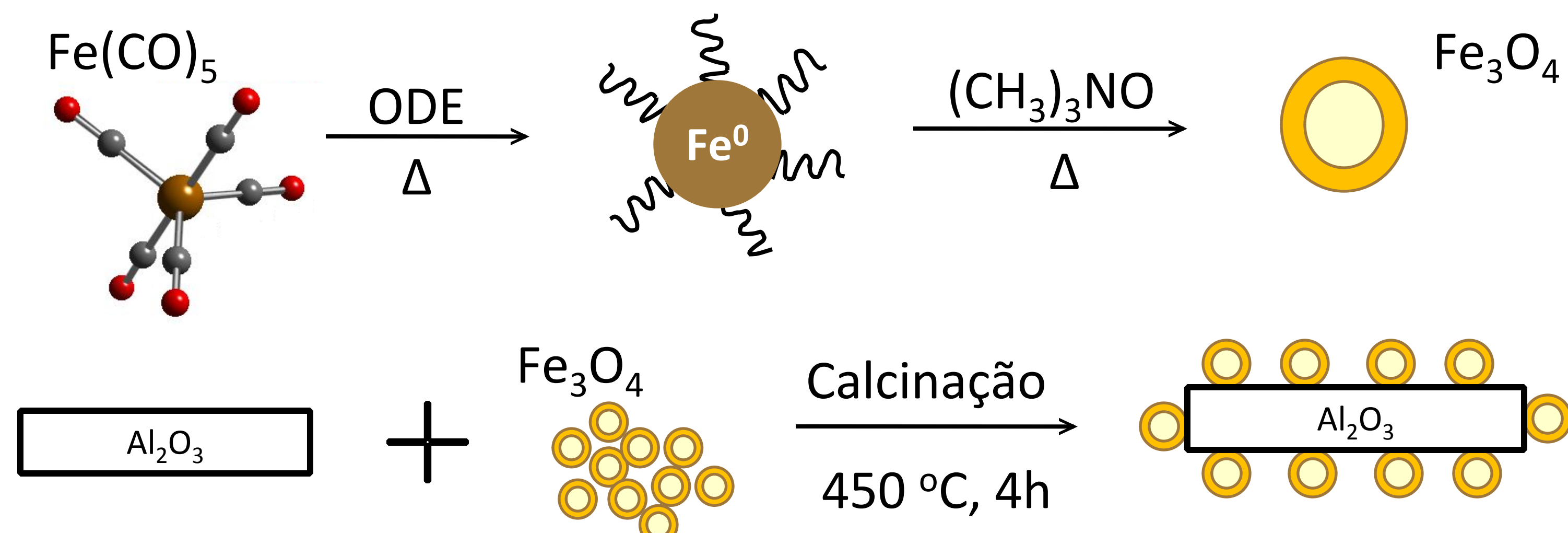
Análise termodinâmica¹ da WGSR

- ✓ Cálculo da constante de equilíbrio.
- ✓ Obtenção do limite termodinâmico para a conversão de CO.

Análise cinética² da WGSR

- ✓ Eliminação de gradientes de pressão e temperatura, externos e internos.
- ✓ Obtenção da energia de ativação aparente (E_a).

Síntese do catalisador nanoestruturado^{3,4}

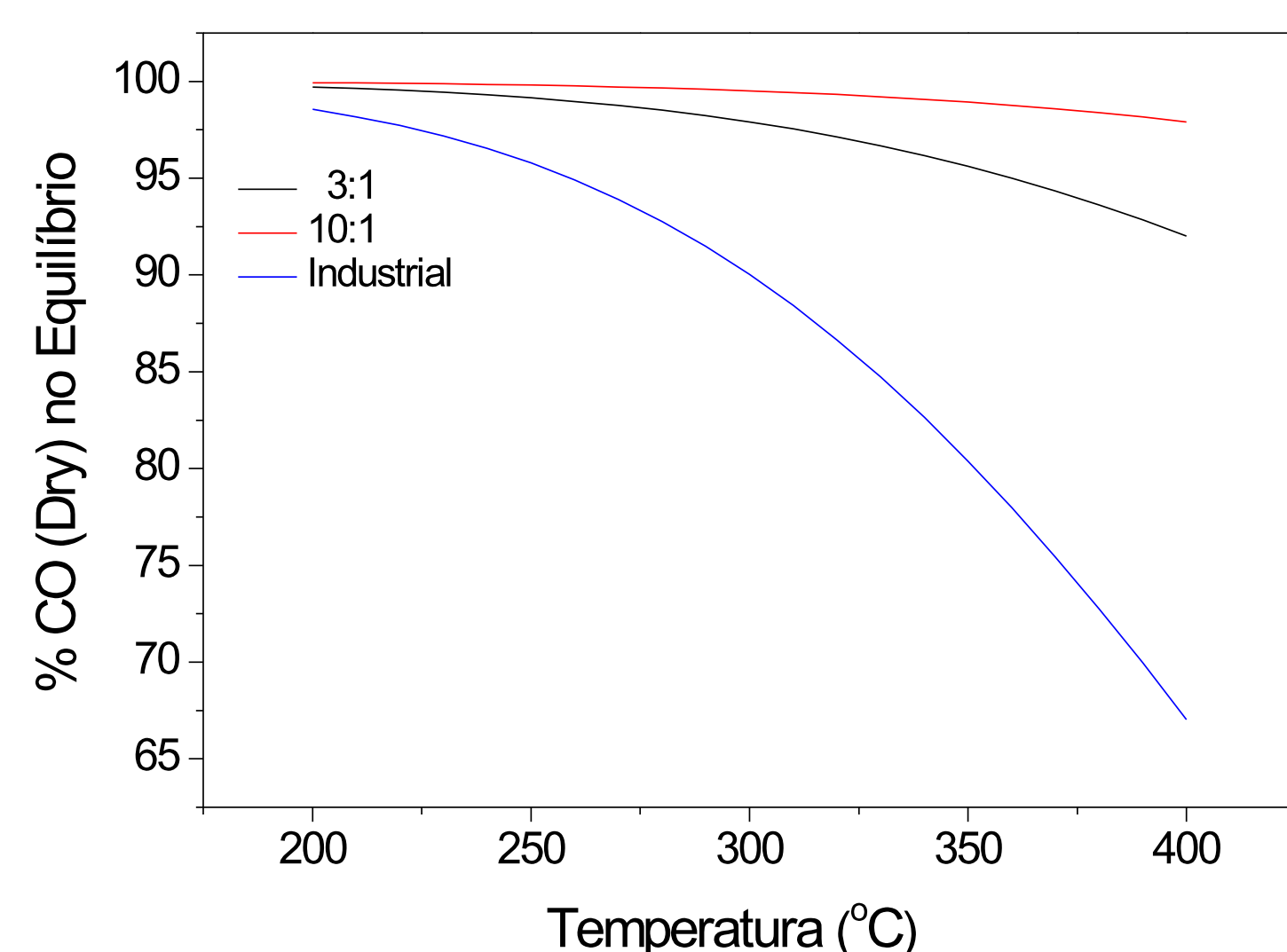


Teste catalítico e operação da linha reacional

- ✓ Razão CO:H₂O = 3:1 ; 4% em CO.
- ✓ Redução *in situ*, 300° C, 1 h em H₂ para o catalisador industrial LTS.

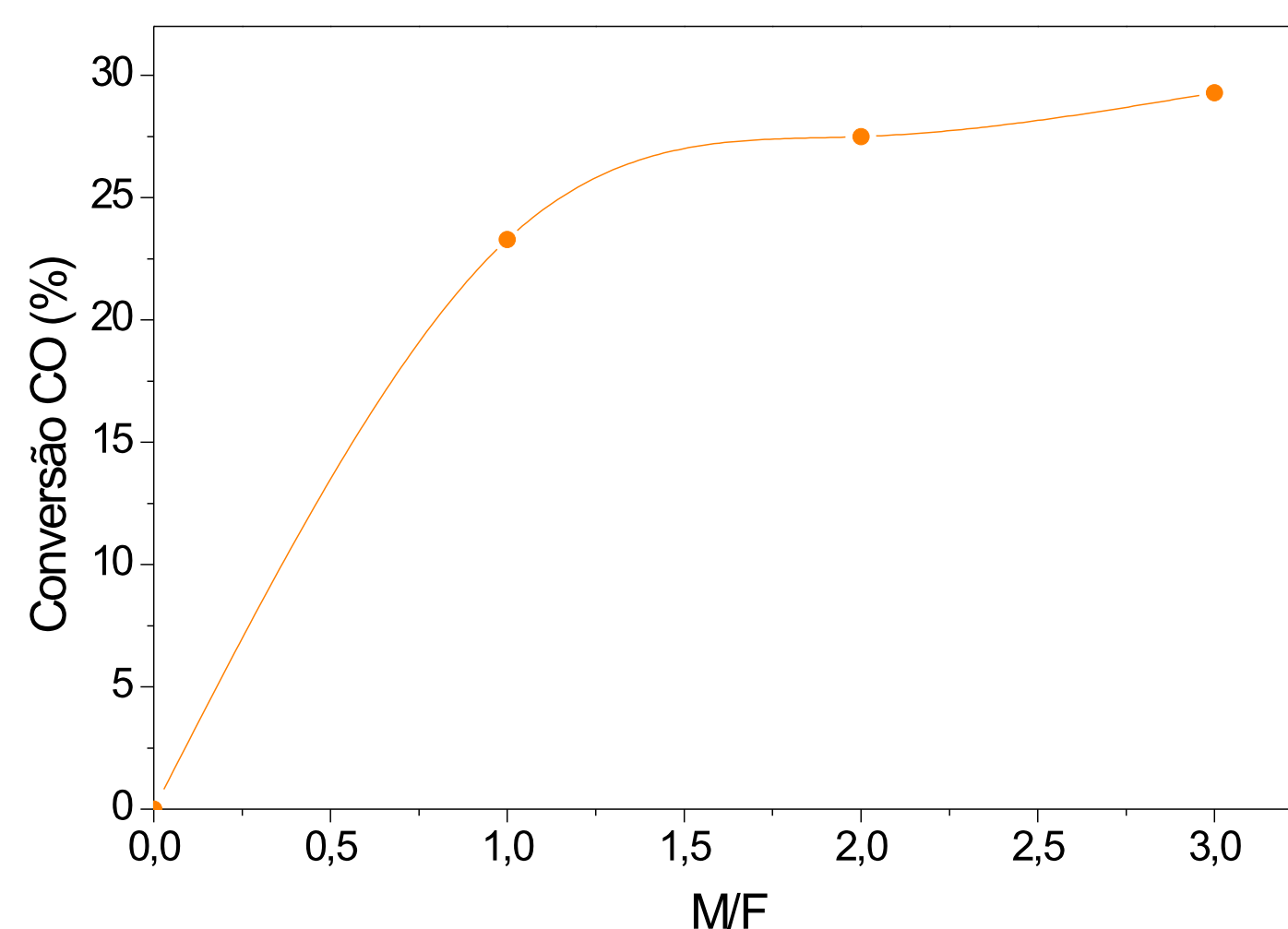
Resultados e Discussão

❖ Análise Termodinâmica



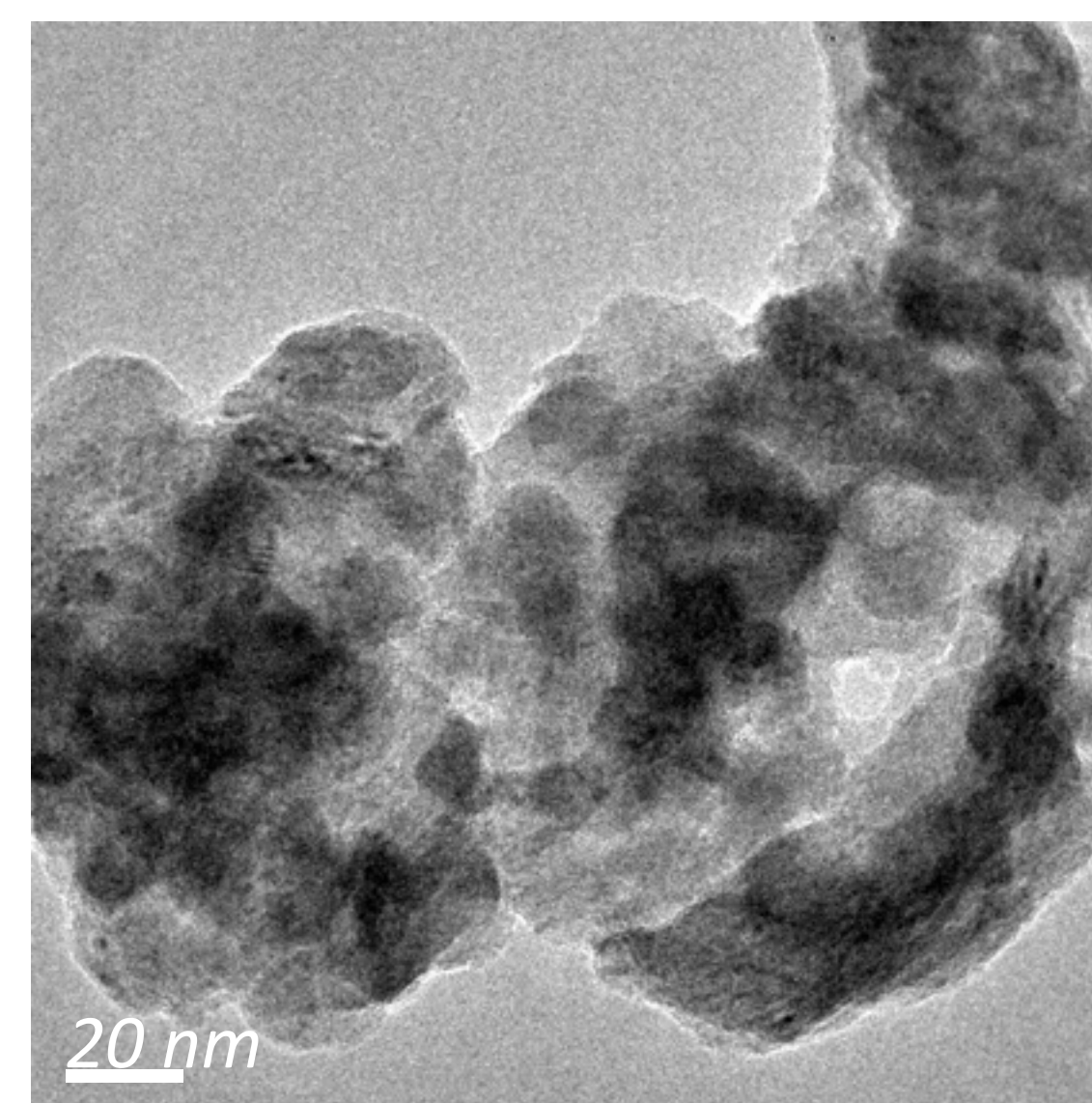
✓ Limite termodinâmico nas razões de CO:H₂O de 3:1, 10:1 e composição industrial do gás de entrada.

❖ Efeitos Difusivos

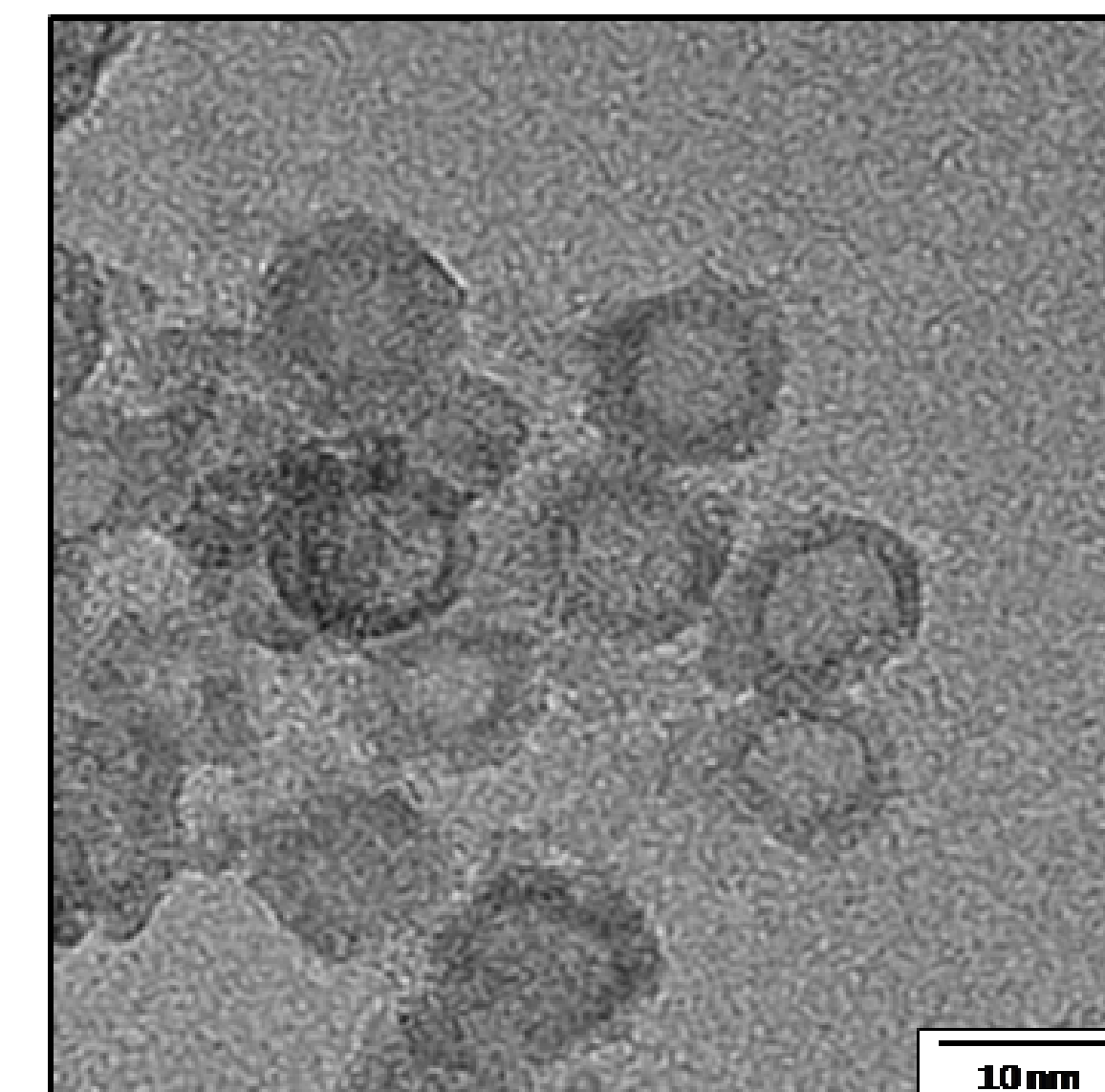


✓ Condição massa/fluxo na qual não há interferências da difusão interna de massa.
✓ $\Delta T = 2.10^{-3} \text{ K}$; $\Delta P = 4,5.10^{-8} \text{ Pa}$ Não há difusão externa durante os testes catalíticos.

LTS - Catalisador Industrial

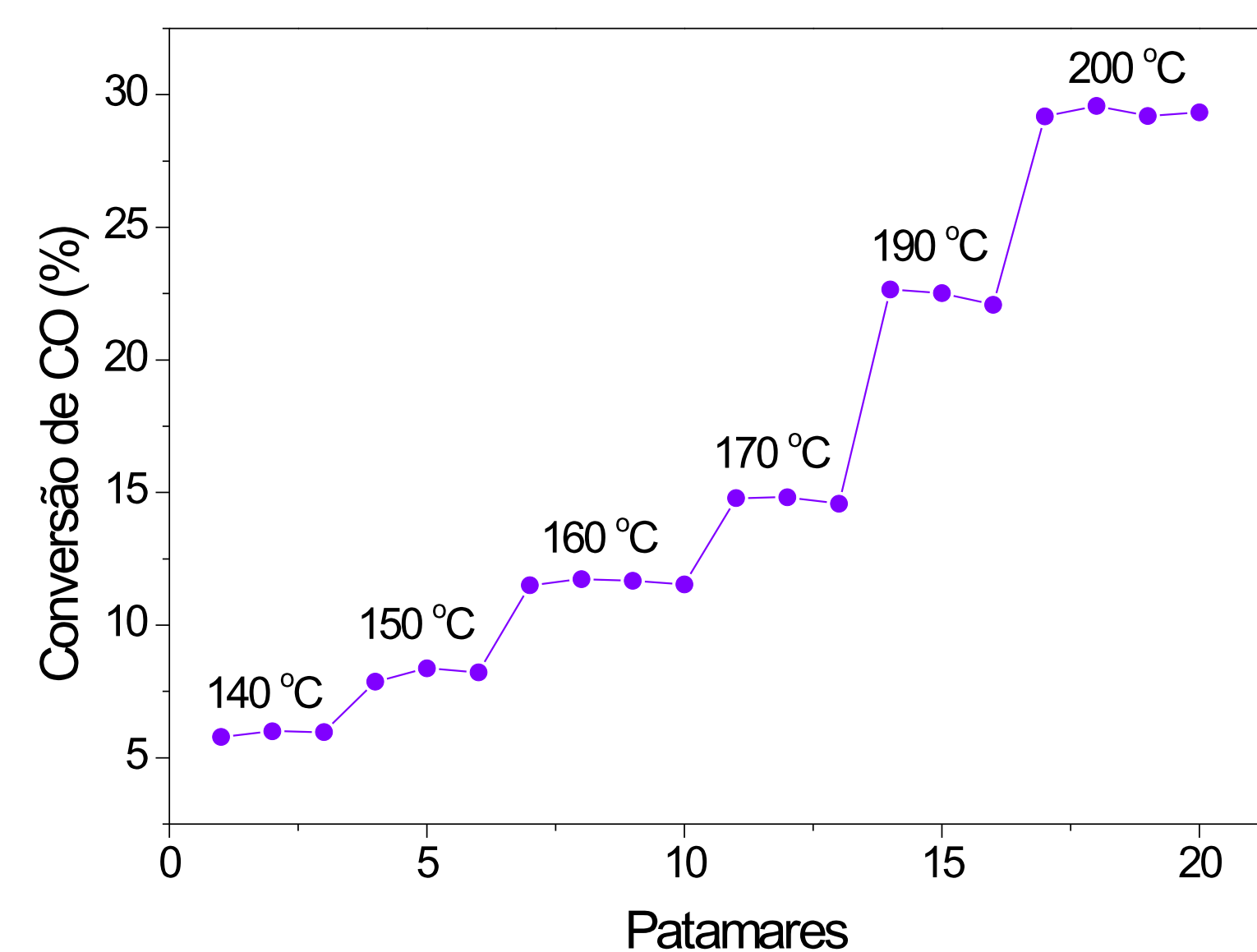


HTS - Catalisador Nanoestruturado

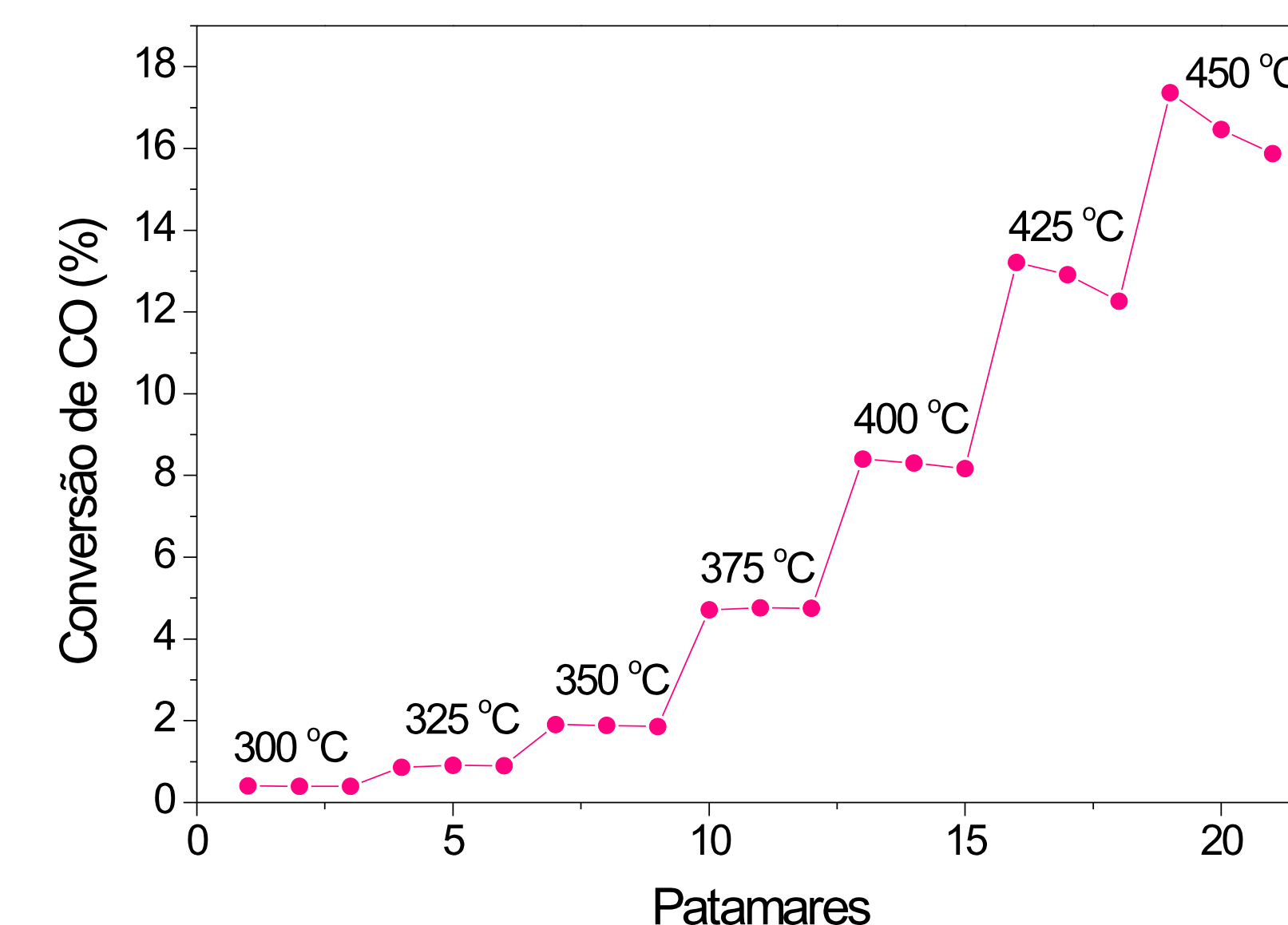


❖ Conversão de CO para WGS

LTS - Catalisador Industrial



HTS - Catalisador Nanoestruturado



Catalisador	E _a (kJ/mol)
LTS industrial	42,6
HTS nanoestruturado	89,3

Conclusão

- ❖ Tendência decrescente do limite termodinâmico com aumento da temperatura (WGSR exotérmica).
- ❖ Ausência de gradientes de pressão e temperatura (internos e externos).
- ❖ Oxidação total do núcleo de ferro metálico das nanopartículas.
- ❖ Energias de ativação pela linearização da equação de Arrhenius para o catalisador LTS e HTS de 42,6 e 89,3 kJ/mol, respectivamente.

Referências Bibliográficas

- ¹RATNASAMY, C.; Catalysis Review: Science and Engineering, v.51, p.325 – 440, 2009.
- ²BRADLY, S. A.; The American Chemical Society, v.411, 00097-6156, 1988.
- ³KORYABKINA, N. A.; Journal of Catalysis, v.217, p. 233-239, 2003.
- ⁴PENG, S.; Journal of the American Chemical Society, v.128, 33, 10676-7, 2006.

Agradecimentos

