

# PRODUÇÃO DE CATALISADOR NANOESTRUTURADO PARA A TRIRREFORMA DO METANO

**Aluno: Gustavo Melo Bretz**  
**Orientador: Roberto R. Avillez**

## Introdução

Foi feita uma pesquisa para a produção de um catalisador nanoestruturado para a trirreforma do metano. Nela, realizou-se testes variando o melhor desempenho para a obtenção de um material com óxido de magnésio e níquel metálico com grande área superficial e que tenha bons efeitos de catálise variando-se a proporção de óxido de magnésio e de níquel, o tempo do processo térmico, a temperatura e os métodos de produção.

## Objetivos

Estudar o melhor método de obtenção de um composto nanoestruturado de óxido de magnésio e níquel metálico que sirva como catalisador para a trirreforma do metano

## Metodologia

Esta pesquisa procura produzir um catalisador nanoestruturado que possa ser empregado na trirreforma do metano. Em particular, o catalisador deverá acelerar as reações que envolvam metano (como um gás adicionado) e os gases provenientes da queima de uma turbina, ou da fabricação de aços, CO<sub>2</sub>, CO, H<sub>2</sub>O e O<sub>2</sub> residual. Para isso, o material proposto é o óxido de magnésio com níquel metálico, já empregado para este tipo de catálise, mas com uma rota de produção distinta do modelo clássico de impregnação.

A produção desse composto começa com a mistura de álcool polivinílico (“*poly vinyl alcohol*”, PVA) e água na proporção de 10 gramas de PVA para cada 100 mL de água. Essa mistura é aquecida a 70°C com agitação contínua para que se forme um gel.

Uma solução aquosa de nitrato de magnésio e nitrato de níquel é adicionada ao gel mantendo a temperatura e a agitação, com uma proporção de 1 grama de nitrato de níquel e de nitrato de magnésio para cada 1 grama de PVA. As concentrações de nitrato de níquel e de nitrato de magnésio são calculadas de antemão para garantir a proporção final de óxido de magnésio e níquel metálico, por exemplo, 20% em massa de níquel metálico e 80% em massa de óxido de magnésio considerando que a reação foi de 100%.

O próximo passo é o tratamento térmico. Ele consiste em aquecer uma pequena quantidade do gel resultante da etapa anterior num forno que chega a temperaturas próximas a 1200°C. O tratamento térmico faz com que todos os elementos evaporem deixando apenas o óxido de magnésio e o níquel metálico, ou o óxido de níquel.

O tempo foi analisado para saber sobre a cinética da reação, mantendo-se a uma temperatura constante de 600°C para verificar a cinética de variação do peso do material. Foi constatado que o tempo para a evaporação da maior parte da água e dos nitratos foi na primeira hora de tratamento térmico.

Depois desse passo, foi feita uma análise de raios X para determinar as fases presentes e respectivas quantidades. Observou-se que somente 1% em massa do material era de níquel metálico, enquanto que era esperado 20%, e a maioria do níquel estava na forma de óxido de níquel misturado com óxido de magnésio. Um novo tratamento térmico foi realizado com ambiente controlado com argônio e uma nova análise de raios X foi feita e constatou-se 9% de níquel metálico.

Testes foram feitos para analisar como a temperatura interfere no processo de produção deste material. Foram realizados tratamentos térmicos de 500°, 600°, 700°, 800°, 900° e de 1000°C com diferentes amostras, fixando a quantidade de nitrato de níquel e de

nitrito de magnésio, deixando sempre por uma hora antes de retirar do forno para uma análise de raios X e uma comparação entre as amostras.

Foi constatado que duas redes cristalinas se formaram na amostra, uma solução de óxido de magnésio e níquel, ambas com a estrutura do cúbica de face centrada (CFC). O aumento da temperatura causa um aumento no tamanho do grão como esperado, enquanto o parâmetro da rede cristalina diminuiu de 0,4213nm para 0,4206nm. A estrutura cristalina sempre se manteve cúbica de face centrada, e a quantidade de níquel metálico variou de 3% a 6% entre 500°C e 700°C mas a partir de 800°C a quantidade de níquel metálico foi de 1%. Estes resultados sugerem que a queima do PVA causou uma atmosfera redutora nas temperaturas mais baixas que se tornou oxidante em temperaturas elevadas, um efeito relacionado com a cinética mais acelerada da queima do PVA. Com o objetivo de manter a atmosfera mais redutora, a entrada do forno foi fechada com um isolante térmico, dificultando a entrada de ar atmosférico.

Com a ajuda de uma ferramenta de termodinâmica computacional, constatou-se que a faixa de temperaturas entre 600° e 700°C era a mais apropriada para a produção de níquel metálico. Além disso, uma redução da quantidade de ar atmosférico no ambiente realmente torna a atmosfera menos oxidante. Este cálculo sugere que um tratamento nesta faixa de temperatura, com uma atmosfera mais redutora, pode eliminar um segundo tratamento térmico para a redução do níquel, otimizando o tempo necessário para produzir o material.

Além da temperatura, o tempo de aquecimento também foi estudado. A temperatura foi fixada em 600°C e o tempo variando: 15 minutos, 30, 60, 120 e 240 minutos. Como já era de se esperar, o tamanho do grão aumentou de 8,5 nm após 15 min de tratamento para 13 nm após 240 min. A distância entre os raios atômicos aumentou de 0,4211 nm para 0,4213nm.

Outras variáveis serão analisadas na nova etapa: a taxa de aquecimento que pode controlar em parte a liberação de gases durante a queima do PVA, fator importante no controle da microestrutura, e a proporção em massa de óxido de magnésio para níquel metálico, pois a quantidade de níquel metálico afeta o efeito do catalisador.

Finalmente, para um catalisador, a área de contato do material é muito importante, pois sua função depende da sua área superficial. Amostras foram enviadas para análise da área superficial por BET. Por enquanto, o microscópio eletrônico de varredura possibilitou uma primeira análise da mesoestrutura do material. Observou-se que para maiores temperaturas, as dimensões dos vazios formados durante a queima do PVA aumenta.

### **Conclusões**

De acordo com os resultados obtidos até o momento, pode-se ter certeza de que a temperatura ideal para a obtenção de óxido de magnésio e níquel metálico está por volta de 500 e 600°C. e que o tempo necessário para que a reação se inicie é por volta dos 5 minutos. Pode-se concluir também que formam-se duas redes cristalinas uma dentro da outra, compostas por óxido de magnésio com óxido de níquel e de níquel metálico, ambas CFC, além de que a temperatura influencia no tamanho do grão, na quantidade de níquel metálico e no parâmetro da rede cristalina, assim como o tempo e o ambiente redutor. Foi possível eliminar uma parte do processo onde o ambiente para um segundo tratamento térmico era feito com um gás inerte, mas essa etapa pode ser feita no primeiro tratamento térmico do material onde o ambiente tornou-se mais redutor apenas isolando-o do ar atmosférico.

### **Referências**

1 - MOURA, Alexandrina Sobreira de . Direito de habitação às classes de baixa renda. **Ciência & Trópico**, v.11, n.1, p. 71-78, jan./jun. 1983.

2 - SIMPÓSIO BRASILEIRO DE REDES DE COMPUTADORES, 13.,1995, Belo Horizonte. **Anais...** Belo Horizonte: UFMG, 1995.665p.

3 - TELLES, P. C. S. **Tubulações industriais: materiais, projeto e desenho**. 7.ed. Rio de Janeiro: Livros Técnicos e Científicos, 1989. 384p.