

Estudo de Adsorção de Água em Wustita para Aplicação Catalítica na Produção de H₂ Combustível

Gabriela N. Pereira,^a Glauco F. Silva,^a Marcelo Marques,^b Lara K. Teles,^b Antônio M. Da Silva Jr.^a

*a: Universidade Federal Rural do Rio de Janeiro, Departamento de Química-ICE, BR 465, Km 7, 23.897-000, Seropédica-RJ, Brazil.
antonio.msj1@gmail.com*

b: Grupo de Materiais Semicondutores e Nanotecnologia, Instituto Tecnológico de Aeronáutica, DCTA, 12228-900 São José dos Campos, Brazil.

Resumo: Observando o quadro energético global atual, existem várias evidências de que este encontra-se em processo de transformação. Com o crescimento da demanda energética, se torna preocupante a utilização majoritária de combustíveis de origem fóssil. Desta forma, tem-se buscado a implementação de fontes alternativas limpas e que sejam economicamente viáveis. Um forte candidato a este papel é o hidrogênio molecular, por ser renovável, sustentável e apresentar menor impacto ambiental[2]. Um dos métodos para a produção de H₂ é o processo chamado *chemical looping combustion*[1]. Este é caracterizado por duas reações químicas paralelas e fisicamente separadas, sendo uma de oxidação de um catalisador óxido metálico: $12\text{FeO} + 4\text{H}_2\text{O} = 4\text{Fe}_3\text{O}_4 + 4\text{H}_2$; e outra de oxidação de um composto hydrogenado orgânico: $\text{CH}_4 + 4\text{Fe}_3\text{O}_4 = \text{CO}_2 + 2\text{H}_2\text{O} + 12\text{FeO}$. Somadas, as duas equações resultam em: $\text{CH}_4 + 2\text{H}_2\text{O} = \text{CO}_2 + 4\text{H}_2$. A produção em duas etapas separadas é a grande vantagem desse processo, pois evita a necessidade de subsequentes estágios de purificação e remoção de subprodutos. Alguns catalisadores diferentes podem ser utilizados, sendo que os constituídos a base de Fe são comparativamente baratos, disponíveis em grandes quantidades e são pouco agressivos ao meio ambiente. No presente trabalho, tem-se interesse particular no processo oxidativo do catalisador, devido a questões, a nível molecular, ainda em aberto na literatura[3]. Estão sendo simulados mecanismos de transferência de oxigênio da água para duas superfícies (111) da wustita, contendo terminações de O e Fe. O formalismo empregado é a DFT+U, utilizando condições periódicas de contorno, como implementado no pacote computacional VASP. Tem-se, como objetivo inicial, o estudo topológico da adsorção molecular da água na superfície, bem como suas decorrentes barreiras energéticas para a obtenção do produto oxidado, segundo cálculos empregando a metodologia *Nudged Elastic Band* (NEB).

Palavras-chave: Hidrogênio Combustível, Chemical Looping, DFT, Wustita.

Referências:

- [1] S. Bhavsar *et al.*, *Catalysis Today* **228**, 96 (2014).
- [2] T. S. Veras *et al.*, *Int. J. Hydrogen Energy* **42**, 2018 (2017).
- [3] J. L. Daschbach *et al.*, *J. Phys. Chem. B* **109**, 10362 (2005).