Gestão:

Reunião de Acompanhamento e Avaliação - RAA 2026

HIDROGENAÇÃO SELETIVA DE CO2 A ÁCIDO FÓRMICO UTILIZANDO CATALISADORES DE RUTÊNIO E LÍQUIDOS IÔNICOS BÁSICOS COMO ADITIVOS DE REAÇÃO

Marques, C. M. [1]; Stieler, R. [2]; .[1]Bolsista do PRH 50/UFRGS, curso de Bacharel em Química, Porto Alegre – RS. E-mail: carlosmezmarques@gmail.com [2]Docente do curso de Química da Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre – RS. E-mail: rafael.stieler@ufrgs.br

INTRODUÇÃO

A elevação contínua das emissões de CO_2 nas últimas décadas tem sido um dos principais propulsores do aquecimento global e das mudanças climáticas em curso. Portanto, o desenvolvimento de tecnologias eficientes para a captura e utilização de CO_2 é essencial para mitigar o acúmulo atmosférico desse gás de efeito estufa. No entanto, a estabilidade cinética e termodinâmica do CO_2 torna a sua conversão um desafio, exigindo tipicamente sistemas catalíticos que operam sob condições severas. Entre as abordagens disponíveis, a hidrogenação catalítica do CO_2 a ácido fórmico (AF) emergiu como uma estratégia promissora, não apenas para o aproveitamento do carbono, mas também para o armazenamento de hidrogênio, visto que o AF pode atuar como um transportador líquido de hidrogênio. Além disso, o AF é um composto versátil com amplas aplicações na agricultura, indústria têxtil, medicina e tecnologias ligadas à energia. Nesse contexto, o presente estudo propõe uma alternativa em etapa única mais sustentável para a produção de AF.

METODOLOGIA EXPERIMENTAL



Figura 1. Reator de alta pressão utilizado para as reações de hidrogenação do CO_2.

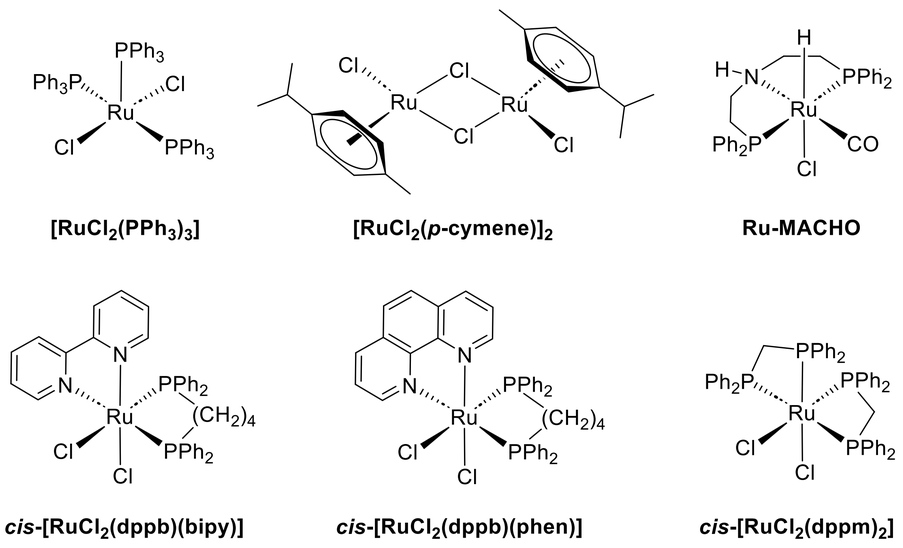


Figura 2. Complexos de rutênio triados para a hidrogenação do CO_2.

RESULTADOS E DISCUÇÃO

Tabela 1. Triagem de complexos de rutênio.

Catalyst	[FA]/[IL]	TON	FA (mol/L)
$[RuCl_2(PPh_3)_3]$	0.35	1740	0.21
$[RuCl_2(p\text{-cymene})]_2$	0.38	1877	0.23
Ru-MACHO	0.56	2803	0.34
cis-$[RuCl_2(dppb)(bipy)]$	0.19	971	0.12
cis-$[RuCl_2(dppb)(phen)]$	0.24	1185	0.14
cis-$[RuCl_2(dppm)_2]$	1.08	5411	0.65

Condições reacionais: [Ru] = 0,132 µmol; 0,66 mmol BMIm.OAc; 1 mL de solvente (90% DMSO 10% H_2O); 70 °C; $P_{H_2} = P_{CO_2}$ = 30 bar.

Tabela 2. Triagem de LIs.

IL	[FA]/[IL]	TON	FA (mol/L)
BMIm.OAc	0.67	4453	0.40
BMMIm.OAc	0.62	4144	0.37
BMMIm.Cl	0.02	117	0.01
$BMIm.NTF_2$	0.02	107	0.01
EMIm.OAc	0.77	5143	0.46

Condições reacionais: 0,099 µmol de *cis*-$[RuCl_2(dppm)_2]$; 0,66 mmol de LI; 1 mL de solvente (90% DMSO 10% H_2O); 70 °C; $P_{H_2} = P_{CO_2}$ = 30 bar.

Tabela 3. Triagem de solventes.

Solvent	[FA]/[IL]	TON[a]	FA (mol/L)[b]
90% DMSO 10% H_2O	0.77	5143	0.46
80% DMSO 20% H_2O	0.39	2600	0.23
100% DMSO	1.59	10593	0.95

Condições reacionais: [Ru] = 0,099 µmol de *cis*-$[RuCl_2(dppm)_2]$; 0,66 mmol EMIm.OAc; 1 mL de solvente; 70 °C; $P_{H_2} = P_{CO_2}$ = 30 bar.

Tabela 4. Triagem de temperatura.

T (°C)	[FA]/[IL]	TON[a]	FA (mol/L)[b]
70	1.59	10593	0.95
80	1.82	12109	1.09
90	1.54	10265	0.92

Condições reacionais: [Ru] = 0,099 µmol de *cis*-$[RuCl_2(dppm)_2]$; 0,66 mmol EMIm.OAc; 1 mL de DMSO; $P_{H_2} = P_{CO_2}$ = 30 bar.

Tabela 5. Triagem da concentração de catalisador.

Ru (µmol)	[FA]/[IL]	TON[a]	FA (mol/L)[b]
0.099	1.82	12109	1.09
0.066	1.67	16700	1.00
0.033	1.23	24502	0.74

Condições reacionais: [Ru] = *cis*-$[RuCl_2(dppm)_2]$ 0,66 mmol EMIm.OAc; 1 mL de DMSO; 80°C; $P_{H_2} = P_{CO_2}$ = 30 bar.

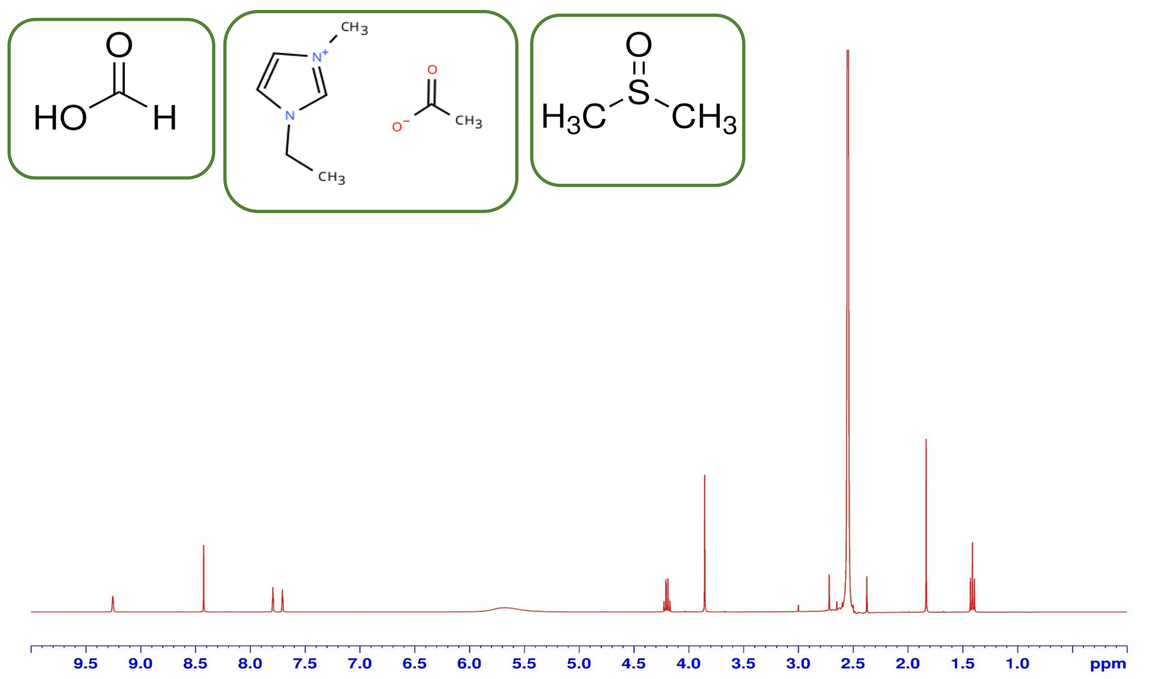
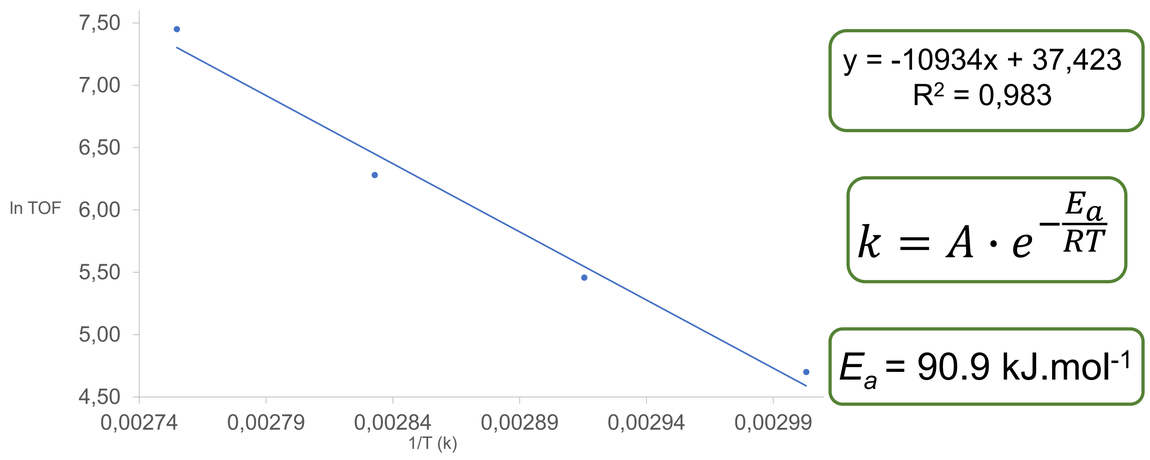


Figura 3. Espectro de RMN de ^1H das condições experimentais otimizadas.



CONCLUSÃO

A atividade do sistema catalítico para a hidrogenação do CO_2 foi confirmada, com o *cis*-$[RuCl_2(dppm)_2]$ demonstrando ser o complexo mais ativo e o EMIm.OAc como o líquido iônico ideal. Experimentos de reciclo serão realizados posteriormente no estudo para investigar a robustez do sistema.

REFERÊNCIAS

[1] L. C. Dresch et al., J. Catal., 436, 115633 (2024).
[2] J. Klankermayer et al., Angew. Chem. Int. Ed., 55, 7296 (2016).
[3] A. Weilhard et al., Nat. Commun., 12, 231 (2021).

AGRADECIMENTOS

Instituto de Química
BRAZILIAN ADVANCED CENTER FOR GREEN AND SUSTAINABLE CATALYSIS