

Lead institution: Escola Politécnica da Universidade de São Paulo (USP) – Work Address of the position: Departamento de Eng. Química – Av. Prof. Lineu Prestes, 580 Cidade Universitária	
Supervisor name: Rita Maria de Brito Alves	Department: Chemical Engineering
Co-supervisor (if any): Camila Emila Kozonoe	Department: Chemical Engineering
Recipient: http://www.rcgi.poli.usp.br/opportunities/ Ref: 17SIR032 http://www.rcgi.poli.usp.br/opportunities/application-form-rcgi/	Type: Undergraduate Scientific Initiation Number of months: 12
Project title: (Portuguese and English) Oxidação do CO Utilizando Nanotubos de Carbono promovidos com Níquel – Projeto 13 Oxidation of CO Using Carbon Nanotubes Promoted with Nickel – Project 13	
Research theme area: (Portuguese and English) oxidação do CO; nanopartículas; nanotubos de carbono oxidation of CO; nanoparticles; carbon nanotubes	
Abstract (Portuguese and English) Espera-se que a pesquisa de iniciação científica seja desenvolvida em colaboração com pesquisadores do <u>projeto 13</u> do programa de Físico Química do Research Centre for Gas Innovation – RCGI da USP (programa e projetos estão disponíveis no site do RCGI www.usp.br/rcgi). A oxidação de CO é considerada uma das reações mais estudadas na catálise heterogênea. Embora diversos estudos tenham sido desenvolvidos neste tema, permanece incerto o impacto de algumas propriedades dos catalisadores, como a mobilidade de oxigênio, o número de sítios ativos e as facetas preferencialmente expostas, no desempenho destes materiais. Neste trabalho foram estudados catalisadores a base nanotubos de carbono, promovidos com Níquel, comparando com outros promotores e o suporte comercial de alumina, para a oxidação seletiva do CO, investigando como a mobilidade de oxigênio da estrutura dos óxidos afeta o desempenho catalítico e como o número de sítios ativos de Ni e a natureza das facetas expostas influenciam a oxidação de CO sobre nanoestruturas com morfologia superficial, forma, tamanho e composição química apresentados nos nanotubos de carbono. Os catalisadores a base de nanotubos de carbono com nanopartículas de Ni, foram preparados pelo método de impregnação úmida do respectivo nitratos. Os desempenhos catalíticos foram relacionados com a mobilidade de oxigênio estrutural dos materiais. Os resultados para os catalisadores 5% Ni/MWNTC e Ni/Al ₂ O ₃ foram comparados com relação à atividade dos mesmos, no intuito de observar quanto de metal existe na superfície adsorvida. Os catalisadores foram caracterizados por microscopia de transmissão (TEM), microscopia de varredura (MEV), difração de raios-X (DRX), espectroscopia Raman e redução com H ₂ à temperatura programada (TPR-H ₂).	

This Undergraduate Scientific Initiation position is expected to be developed in collaboration with researchers from the Project 13 of the Physical Chemical Programme of the Research Centre for Gas Innovation (RCGI) at the University of Sao Paulo (USP) -- summary of the program and projects can be found in the RCGI website at www.usp.br/rcgi.

The oxidation of CO is considered one of the most studied reactions in heterogeneous catalysis. Although several studies have been developed on this topic, the impact of some properties of the catalysts, such as oxygen mobility, number of active sites and the preferentially exposed facets, on the performance of these materials remains uncertain. In this work, catalysts based on nickel-promoted carbon nanotubes were studied, comparing with other promoters and the commercial support of alumina, for the selective oxidation of CO, investigating how the oxygen mobility of the oxides structure affects the catalytic performance and how the number of Ni sites and the nature of the exposed facets influence the oxidation of CO on nanostructures with surface morphology, shape, size and chemical composition presented in carbon nanotubes. The catalysts based on carbon nanotubes with Ni nanoparticles were prepared by the wet impregnation method of the respective nitrates. The catalytic performances were related to the structural oxygen mobility of the materials. The results for the 5% Ni/MWCNT and Ni/Al₂O₃ catalysts were compared with their activity, in order to observe how much metal exists on the adsorbed surface. The catalysts were characterized by transmission electron microscopy (TEM), scanning microscopy (SEM), X-ray diffraction (XRD), Raman spectroscopy and H₂ reduction at programmed temperature (TPR-H₂).

Description (Portuguese and English)

A síntese de partículas nano está bem estabelecida e explorada em muitas aplicações, no entanto, as extraordinárias propriedades do grafeno abrem novas fronteiras para o seu estudo como composto com nano partículas (NP), atingindo os efeitos sinérgicos de componentes individuais. Recentemente, vários metais, óxidos metálicos e NP semicondutoras foram incorporadas às estruturas dos nanotubos de carbono com o objetivo de adquirir propriedades excepcionais em forma composta. Na década passada, iniciaram-se os estudos com os nanotubos de carbono (CNT) como suporte de novos catalisadores. Nanotubos de carbono são únicas ou múltiplas folhas de grafeno exibindo uma cavidade interna e uma parede externa. Muitas vezes, as nanopartículas de metais são suportadas na superfície externa do CNT, ao passo que os vazios (nanocavidades) podem ser usados para inserir diferentes NP com o objetivo de obter compósitos inteligentes com combinações peculiares de propriedades.

O objetivo deste trabalho está voltado para a síntese e caracterização de nanopartículas de níquel, suportados em nanotubos de carbono (NTC) e comparar com o catalisador comercial no suporte de alumina. A caracterização dos nanomateriais antes e após tratamento e a reação por diferentes técnicas, particularmente por TPD, TEM, SEM, Raman, DRX, objetivando identificar as fases ativas, e o mecanismo superficial. Pretende-se também utilizar estes catalisadores sintetizados na oxidação do CO no intuito de verificar a atividade dos mesmos calculando o CO adsorvido no metal.

The synthesis of nanoparticles is well established and exploited in many applications, however, the extraordinary properties of graphene opened new frontiers for its study as a compound with nanoparticles (NP), reaching synergistic effects of individual components. Recently, several metals, metal oxides and NP semiconductors were incorporated into the structures of the carbon nanotubes in order to acquire exceptional properties in composite form. In the past decade, studies with carbon nanotubes (CNT) have begun to support new catalysts. Carbon nanotubes are single or multiple sheets of graphene exhibiting an inner cavity and an outer wall. Often, metal nanoparticles are supported on the outer surface of the CNT, whereas voids (nanocavity)

can be used to insert different NPs in order to obtain intelligent composites with peculiar combinations of properties.

The objective of this work is focused on the synthesis and characterization of nickel nanoparticles, supported on carbon nanotubes (NTC) and compared with the commercial catalyst in alumina support. The characterization of nanomaterials before and after treatment and the reaction by different techniques, particularly TPD, TEM, SEM, Raman, XRD, aimed at identifying the active phases, and the surface mechanism. It is also intended to use these catalysts synthesized in the oxidation of CO in order to verify their activity by calculating the CO adsorbed on the metal.

Requirements to fill the position. (Ex: specific experience, minimum or maximum years after concluding the course) (Portuguese and English)

Os requisitos da posição são:

- Ter conhecimento em fundamentos da catálise;
- Ter habilidades em atividades de laboratório;
- Escrever e ler relatórios e artigos em inglês;
- Apresentar resultados de pesquisa em conferências, reuniões e eventos;
- Estar no segundo/terceiro ano de graduação em engenharia química;
- Ser comunicativo e disposto a aprender;
- É desejável média geral acima de 7.0.

Este projeto é adequado para um indivíduo altamente qualitativo + quantitativo. O candidato aprovado se juntará a uma equipe de pesquisadores multidisciplinares com oportunidades de colaboração internacional.

O candidato selecionado receberá bolsa concedida pela FAPESP. Maiores informações e inscrição em <http://www.rcgi.poli.usp.br/opportunities/application-form-rcgi/> (REF 17SIR032) até 20 de Novembro de 2017.

The requirements of the position are to:

- To have knowledge in the fundamentals of catalysis;
- To have skills in laboratory activities;
- To write and read reports and articles in English;
- To present research outputs at conferences, meetings and events;
- To being in the second/ third year of graduation in chemical engineering;
- To be communicative and willing to learn.
- It is desirable an overall grade above 7.0.

This project is well-suited to a highly qualitative + quantitative individual. Scripting skills will be beneficial alongside excellent communication. The successful applicant will join a team of leading multi-disciplinary researchers with opportunities for international collaboration.

The selected candidate will be given fellowship granted by FAPESP. More information and application at <http://www.rcgi.poli.usp.br/opportunities/application-form-rcgi/> (REF 17SIR032) up to 20 November 2017.