

**UNIVERSIDADE FEDERAL DE SÃO CARLOS**  
**CENTRO DE CIÊNCIAS EXATAS E TECNOLOGIA**  
**DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA QUÍMICA**

**Simulação do processo de produção do metanol a partir da reação de hidrogenação do CO<sub>2</sub> utilizando H<sub>2</sub> verde proveniente da eletrólise e CO<sub>2</sub> proveniente da absorção por Amina**

Eduardo Cotta Garcia

Trabalho de conclusão de curso apresentado ao Departamento de Engenharia Química da Universidade Federal de São Carlos, para obtenção do título de Bacharel em Engenharia Química.

Orientador: Prof. Dr. João Batista Oliveira dos Santos

**São Carlos – SP**

**2025**

## AGRADECIMENTOS

Primeiramente, gostaria de agradecer minha família, especialmente meus pais Ana Beatriz Mendes Barros Cotta Garcia e Paulo Augusto Nepomuceno Garcia, por todo o apoio que me deram durante a graduação e permitindo que eu chegasse nesse momento.

Gostaria de agradecer também ao Prof. Dr. João Batista Oliveira dos Santos que se disponibilizou para ser meu orientador neste trabalho, possibilitando, assim, que eu chegasse neste momento da minha formação.

Gostaria de agradecer a todos os meus amigos que fizeram parte da minha jornada nesta faculdade, sem vocês meu caminho não seria o mesmo.

A todo o DEQ/UFSCar, que me ensinou coisas que vou levar para toda a vida.

E gostaria de honrar a memória do Prof. Dr. José Mansur Assaf, que foi meu orientador durante minha iniciação científica e que me introduziu a área da catálise e à produção do metanol a partir do CO<sub>2</sub>.

Agradecemos o apoio do Programa de Recursos Humanos da Agência Nacional do Petróleo, Gás Natural e Biocombustíveis – PRH-ANP, suportado com recursos provenientes do investimento de empresas petrolíferas na Cláusula de PD&I da Resolução ANP nº 918/2023 (PRH39- Referente ao EDITAL nº1/2018/PRH-ANP e Novo EDITAL nº1/2025).” Este projeto teve o apoio financeiro da ANP, FAPESP (Projeto #2024/10494-5 e #2025/03311-4) e MCTI através da bolsa de iniciação científica concedida pelo programa PRH-39/UFSCar.

Assinatura

---

Eduardo Cotta Garcia

Assinatura

---

Prof. Dr. João Batista Oliveira dos Santos  
Orientador – Universidade Federal de São Carlos

Assinatura

---

Adriana Paula Ferreira Palhares  
Professora da Disciplina – Universidade Federal de São Carlos

**São Carlos – SP**  
**2025**

## RESUMO

A liberação excessiva de CO<sub>2</sub>, um gás do efeito estufa, contribui para a elevação da temperatura média do planeta, gerando impactos ambientais e financeiros significativos. A conversão de CO<sub>2</sub> em metanol por meio de hidrogenação, produzindo o metanol renovável, um combustível e uma importante matéria-prima para a indústria química, surge como uma alternativa promissora para reduzir a concentração desse gás na atmosfera. Dessa maneira, a simulação tanto do processo de geração do metanol renovável quanto das principais maneiras de obter as matérias primas, CO<sub>2</sub> e H<sub>2</sub>, é algo que pode gerar valor para o entendimento da geração desse produto. Portanto, o seguinte trabalho visou simular no *software* Aspen Plus versão 14 os processos de formação de metanol renovável a partir da reação catalítica, eletrólise da água em meio alcalino e a absorção de CO<sub>2</sub> proveniente de gases de estufa com monoetanolamina (MEA). Por meio dessas simulações foi possível observar verossimilhança com plantas já estabelecidas de produção de metanol verde da empresa islandesa *Carbon Recycling International* (CRI) e relacionar com as quantidades de CO<sub>2</sub> e de água necessárias para realizar tais empreendimentos. Dessa maneira, foi obtido um rendimento em massa de 72,5% para a captura de carbono e uma utilização de 2,25 toneladas de água na eletrólise alcalina por tonelada de metanol produzido.

**Palavras-chaves:** Metanol; Aspen Plus; Simulação; Hidrogenação do CO<sub>2</sub>.

## ABSTRACT

The excessive release of CO<sub>2</sub>, a greenhouse gas, contributes to the rise in the planet's average temperature, leading to significant environmental and economic impacts. Converting CO<sub>2</sub> into methanol through hydrogenation—yielding renewable methanol, a fuel and an important feedstock in the chemical industry—emerges as a promising alternative to reduce the concentration of this gas in the atmosphere. In this context, simulating both the renewable methanol production process and the main routes for obtaining the raw materials, CO<sub>2</sub> and H<sub>2</sub>, provides valuable insights into the generation of this product. Therefore, this work aims to simulate in Aspen Plus version 14 the processes involved in renewable methanol formation via catalytic reaction, alkaline water electrolysis, and CO<sub>2</sub> absorption from greenhouse gas streams using monoethanolamine (MEA). These simulations demonstrated consistency with existing green methanol production facilities, such as those developed by the Icelandic company Carbon Recycling International (CRI), and allowed a comparison of the required amounts of CO<sub>2</sub> and water needed for such operations. In this way, a mass yield of 72.5% was obtained for carbon capture and a consumption of 2.25 tons of water in alkaline electrolysis per ton of methanol produced.

Keywords: Methanol; Aspen Plus; Simulation; CO<sub>2</sub> Hydrogenation.

## SUMÁRIO

1. INTRODUÇÃO .....	10
2. REVISÃO BIBLIOGRÁFICA .....	12
2.1. Metanol .....	12
2.2. Reação de Hidrogenação do CO <sub>2</sub> .....	15
2.3. Absorção de CO <sub>2</sub> por aminas.....	19
2.4. Eletrólise da água .....	21
3. MATERIAIS E MÉTODOS.....	24
3.1. Hidrogenação do CO <sub>2</sub> .....	24
3.2. Absorção por Amina (MEA).....	26
3.3. Eletrólise da água .....	28
4. RESULTADOS E DISCUSSÕES .....	30
5. CONCLUSÕES E SUGESTÕES .....	34
6. REFERÊNCIAS .....	35

## LISTA DE FIGURAS

Figura 1	Diagrama de blocos simplificado da produção de metanol .....	12
Figura 2	Esquemática da produção de gás de síntese com a etapa de compressão.....	13
Figura 3	Demanda global de metanol por derivado.....	15
Figura 4	Vias de reação e principais intermediários propostos para a hidrogenação de CO <sub>2</sub> em metanol.....	17
Figura 5	Diagrama de blocos mostrando a diferença entre a origem de matérias primas na produção de metanol.....	18
Figura 6	Mecanismo de captura de CO <sub>2</sub> em solução de MEA.....	19
Figura 7	Fluxograma convencional para captura de CO <sub>2</sub> baseada em aminas.....	20
Figura 8	Reação de Produção de MEA.....	20
Figura 9	Diagrama esquemático de uma célula de eletrólise alcalina convencional.....	22
Figura 10	Princípio básico de uma célula de eletrólise com membrana de eletrólito polimérico (PEM) .....	23
Figura 11	Fluxograma montado no Aspen da produção de metanol a partir do H <sub>2</sub> e do CO <sub>2</sub> .....	26
Figura 12	Fluxograma montado no Aspen para a absorção de CO <sub>2</sub> por Amina....	27
Figura 13	Fluxograma montado no Aspen para a eletrólise da água em meio alcalino.....	29
Figura 14	Fluxograma montado no Aspen da produção de metanol renovável com os resultados dos parâmetros de pressão e de temperatura.....	31
Figura 15	Fluxograma montado no Aspen da absorção de CO <sub>2</sub> com os resultados dos parâmetros de pressão e de temperatura.....	32
Figura 16	Fluxograma montado no Aspen da eletrólise da água com os resultados dos parâmetros de pressão e de temperatura.....	33

## LISTA DE TABELAS

Tabela 1	Resultados da simulação da produção de Metanol renovável considerando os parâmetros da planta Geoge Olah .....	30
Tabela 2	Resultados da simulação da produção de Metanol renovável considerando os parâmetros de diferentes plantas da <i>Carbon Recycling International</i> .....	31

## **NOMENCLATURA**

$R_s$  - razão de pressão por estágio

$R_t$  - razão de pressão total

$N_s$  - número total de estágios

## **EQUAÇÕES**

1.1 Hidrogenação do  $\text{CO}_2$

1.2 *Reverse water gas shift reaction* (RWGS)

1.3 Hidrogenação do  $\text{CO}$

2.1 Reforma do vapor

2.2 Reforma autotérmica (ATR)

2.3 Gaseificação da biomassa

2.4 Gaseificação da biomassa

2.5 Gaseificação da biomassa

2.6 Geração de impurezas no processo de gaseificação da biomassa

2.7 Geração de impurezas no processo de gaseificação da biomassa

2.8 Eletrólise da água

## 1. INTRODUÇÃO

As questões ambientais ligadas às mudanças climáticas têm atraído grande atenção da comunidade científica, sendo que a última década (2011-2020) foi considerada a mais quente já registrada e o contínuo aquecimento do planeta irá agravar ainda mais os desastres climáticos como secas, enchentes e tempestades, por exemplo (ONU, 2025). A principal causa da mudança climática é a emissão de gases que intensificam o efeito estufa, sendo o dióxido de carbono ( $\text{CO}_2$ ) o mais relevante deles.

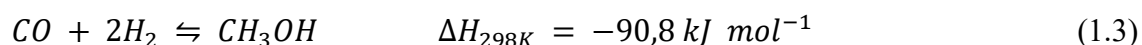
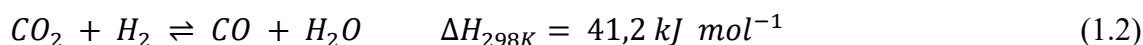
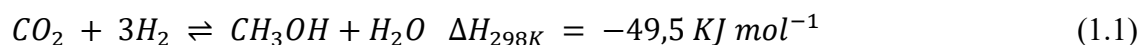
Dessa forma, diferentes estratégias para reduzir a emissão de dióxido de carbono têm sido estudadas e avaliadas. No entanto, muitas indústrias ainda dependem da liberação desse gás, não havendo alternativas economicamente viáveis e ambientalmente menos impactantes amplamente disponíveis. Nesse contexto, surgiram as tecnologias de captura e armazenamento de carbono e de captura e utilização de carbono (CCU). A primeira propõe capturar o  $\text{CO}_2$  gerado e armazená-lo em locais seguros, como formações rochosas subterrâneas, evitando danos ambientais. Já a tecnologia CCU busca converter o carbono capturado em produtos de maior valor agregado, promovendo o aproveitamento do  $\text{CO}_2$  excedente e favorecendo a transição para uma economia circular. (Assen et al., 2014; Xie et al., 2024)

Sendo assim, diversas formas de captura de carbono existem: adsorção, absorção físico-química, biorremediação, separação por membrana e separação criogênica. Dentre essas técnicas, a utilização de compostos de amina para a absorção do  $\text{CO}_2$  proveniente dos gases de exaustão proveniente das indústrias tem sido de interesse, por conta do menor custo envolvido e da fácil implementação. A absorção química por meio de soluções de amina já é utilizada para a remoção de  $\text{CO}_2$  do gás natural, assim, é considerada uma tecnologia com maturidade tecnológica alta. (Aghel et al., 2022; Bui et al., 2018)

O metanol destaca-se como um dos produtos mais promissores para aplicação na tecnologia de CCU e como alternativa aos combustíveis fósseis, pois possibilita o armazenamento de energia em uma forma líquida e segura. Além disso, pode ser utilizado diretamente como combustível, em células a combustível, e serve como um importante intermediário na indústria química. Diferentemente do hidrogênio, outro vetor energético de relevância para o futuro, o metanol não requer uma nova infraestrutura e apresenta menos desafios relacionados à segurança. Nesse contexto, George A. Olah propôs, em 2005, o conceito de “economia do metanol” como uma solução prática, sustentável e

escalável para o futuro energético global, capaz de promover segurança energética e reduzir os impactos ambientais associados à atual matriz baseada em petróleo e gás natural. (Olah, 2005)

Uma das formas de produzir metanol e, ao mesmo tempo, aproveitar o carbono capturado é por meio da hidrogenação do CO<sub>2</sub>, processo que pode ocorrer por duas rotas principais: a hidrogenação direta (1.1) do dióxido de carbono em metanol e a *reverse water gas shift reaction* (RWGS). Na rota direta, o CO<sub>2</sub> é ativado na superfície do catalisador, onde são formados intermediários que posteriormente são hidrogenados, resultando em metanol. Já na reação RWGS, ocorre inicialmente a conversão do CO<sub>2</sub> em monóxido de carbono (CO) e água (1.2), depois o CO formado é então reagido em uma etapa subsequente para gerar metanol (1.3). (Ibrahim et al., 2024; Marlin; Sarron; Sigurbjörnsson, 2018a)



Para que o metanol produzido por meio da hidrogenação do CO<sub>2</sub> seja considerado *verde*, em que apresenta uma baixa emissão de carbono na sua produção, o gás hidrogênio para reação também deve ser *verde*, sendo a principal rota para gerar esse tipo de H<sub>2</sub> é a eletrólise da água, em que se utiliza de uma corrente elétrica para separar as moléculas de água em gás hidrogênio e em gás oxigênio. Vale ressaltar que para o processo ser considerado *verde* a energia elétrica deve ser proveniente de fontes renováveis, ou seja, eólica ou solar. (Vedrtnam; Kalauni; Pahwa, 2025)

## 2. REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

### 2.1. Metanol

Atualmente, a principal rota de produção do metanol é a partir do gás de síntese, mistura composta principalmente por CO, H<sub>2</sub> e CO<sub>2</sub>, sendo que 90% do metanol produzido mundialmente é feito a partir do gás natural. A produção a partir do gás natural é dividida em três etapas principais: produção do gás de síntese, conversão do gás de síntese em metanol bruto e purificação por meio de destilação. Um diagrama de blocos esquematizando essas principais etapas está descrito na Figura 1. (“*Methanol Production and Applications*”, 2018; Reddy et al., 2014)

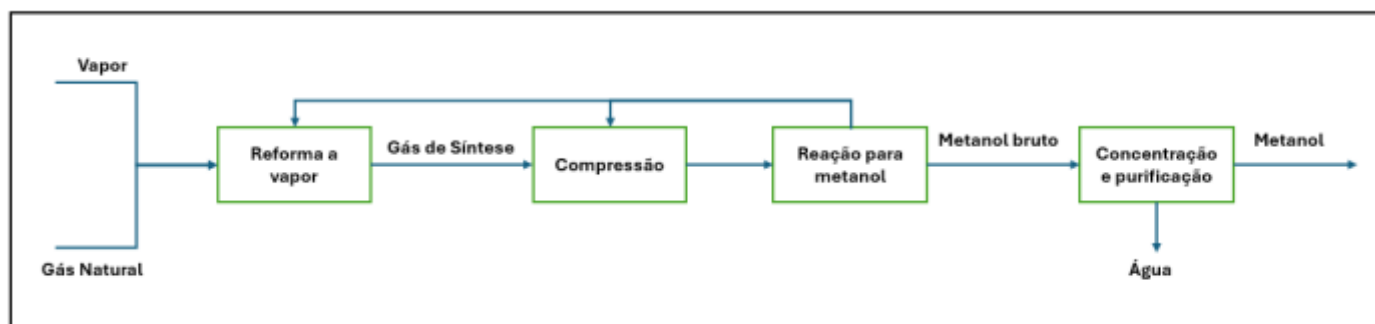
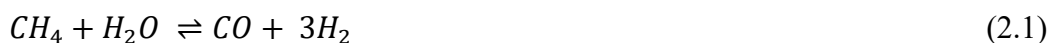


Figura 1 – Diagrama de blocos simplificado da produção de metanol. Fonte: elaborado por autor, adaptado de (Reddy et al., 2014)

A produção do gás de síntese é realizada principalmente por reforma a vapor (2.1) e por reforma autotérmica (ATR) (2.2). (“*Methanol Production and Applications*”, 2018)



Na reforma a vapor, os gases de alimentação, gás natural e vapor, passam por centenas de tubos preenchidos com catalisador, que são mantidos no forno de reforma a cerca de 840 °C. Essa é uma temperatura extrema para a maioria dos metais, por causa disso, ligas metálicas especiais resistentes a altas temperaturas são usadas para construir esses tubos. Por se tratar de uma reação endotérmica, o que significa que demanda muito calor, um consumo de combustível elevado é necessário. (Jackson, 2006)

A produção de metanol requer altas pressões, sendo assim, o gás reformado resfriado deve passar por um sistema de compressão dividido em três estágios: baixa, média e alta pressão. Após cada etapa há um resfriamento intermediário para controlar a temperatura gerada pela compressão e remover condensados formados. Esses compressores são acionados por uma única turbina a gás de grande potência, que consome uma quantidade significativa de combustível para fornecer a energia necessária ao processo. Ao final do último estágio, o gás atinge a pressão adequada, tipicamente entre 70 e 100 bar, e segue para o reator de síntese onde ocorre a formação do metanol. A etapa de produção e de compressão do gás de síntese está esquematizada na Figura 2 (Jackson, 2006; “Methanol Production and Applications”, 2018)

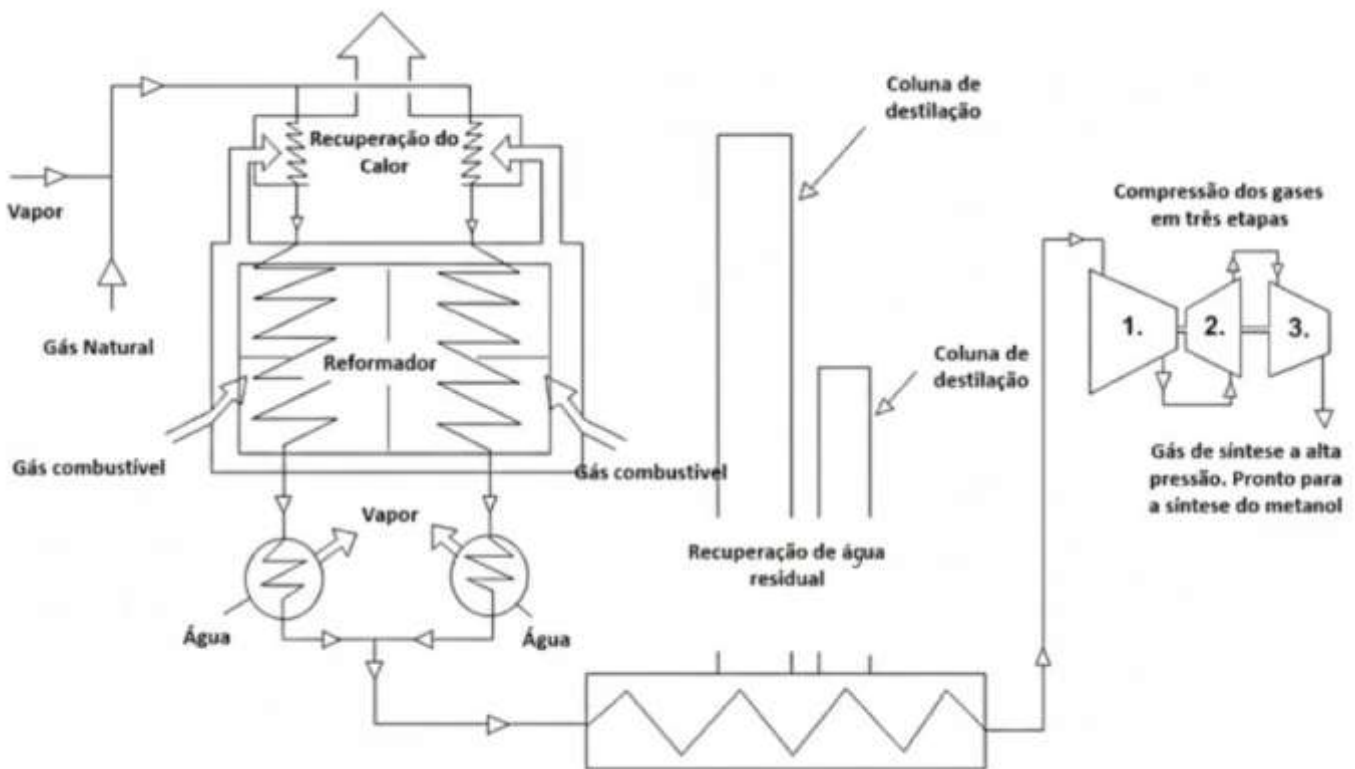
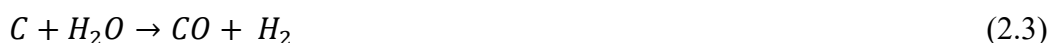


Figura 2 -Esquematização da produção de gás de síntese com a etapa de compressão. Fonte: (Jackson, 2006) adaptado.

Durante a produção do metanol por meio do gás de síntese, o catalisador mais utilizado é o catalisador de Cu/ZnO/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> devido à sua comprovada eficiência. O bom desempenho desse sistema catalítico motivou seu uso também na conversão de CO<sub>2</sub> em

metanol, baseando-se na hipótese de que os mecanismos reacionais envolvidos em ambos os processos são semelhantes. Após a síntese do metanol, este é purificado por meio de colunas de destilação (Niu et al., 2022)

O metanol também pode ser produzido a partir do carvão e da biomassa, passando pelas mesmas etapas que na produção a partir do gás natural: produção do gás de síntese, conversão do gás de síntese em metanol bruto e purificação por meio de destilação. A principal diferença está na primeira etapa, em que deve ocorrer o processo de gaseificação do carvão ou da biomassa (reações 2.3 a 2.5), uma técnica de conversão termoquímica que permite a conversão de biomassa sólida em misturas gasosas com a ajuda de agentes gaseificadores como ar/oxigênio, vapor e gases de combustão. Contudo, esta etapa de gaseificação gera muito mais impurezas (equações 2.6 e 2.7) comparada à geração do gás de síntese por meio do gás natural, o que gera a necessidade de etapas adicionais de purificação. (“Methanol Production and Applications”, 2018)



A Ásia-Pacífico, com destaque para a China, domina o mercado de metanol, respondendo por cerca de 51,2% da receita, impulsionada pela demanda para formaldeído, ácido acético e dimetil éter (DME). Segundo o relatório da Grand View Research, o mercado global de metanol, que era estimado em US\$ 38,5 bilhões em 2024, deve crescer a uma taxa composta de 9,1% ao ano até 2030, atingindo US\$ 64,14 bilhões. Entre os principais agentes no mercado estão empresas como BASF, Methanex, SABIC, Mitsui e Celanese. (GVR, 2025)

O principal uso do metanol está concentrado na indústria química, sendo a maioria de sua produção destinada à fabricação de formaldeído e o restante é empregado na produção de aditivos para combustíveis, ácido acético, acetatos de metila e vinila, além de diversos outros compostos químicos. A figura 3 mostra que há uma demanda de metanol de 30% para a produção de formaldeído, 12% para éter metil-terc-butilico (MTBE), 12% para combustíveis e 10% para ácido acético. Mais recentemente, a síntese de metanol passou a representar a segunda maior fonte de consumo de hidrogênio no

mundo, ficando atrás apenas da produção de amônia. (“Methanol Production and Applications”, 2018; Rafiee, 2020)

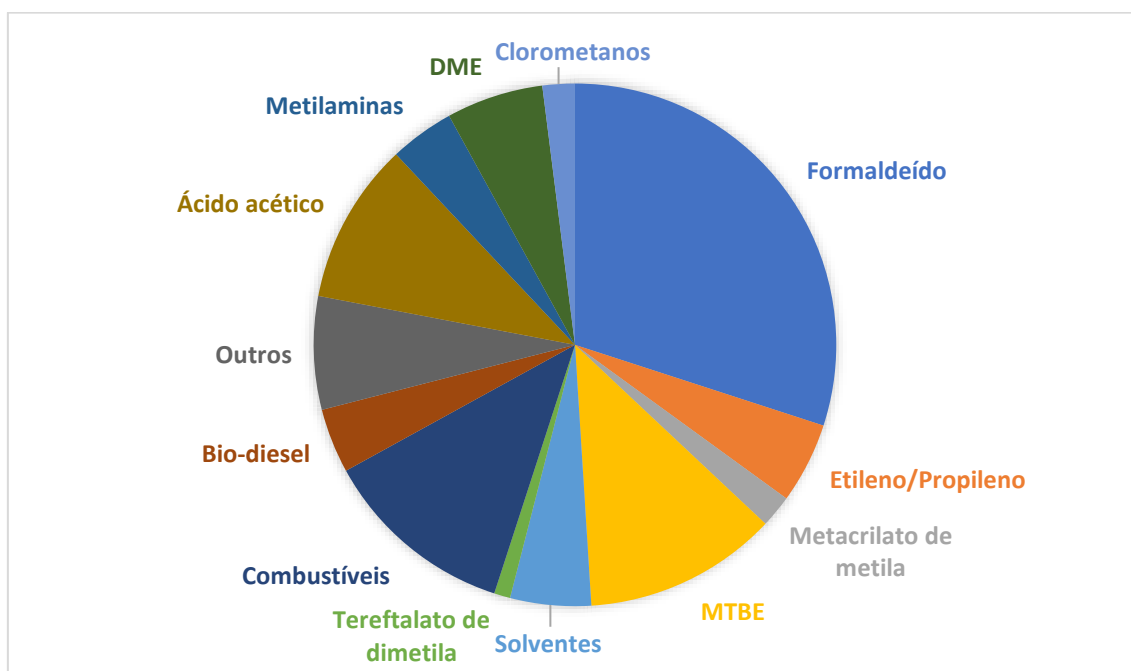


Figura 3 - Demanda global de metanol por derivado. Fonte: elaborado pelo autor, adaptado de (Rafiee, 2020)

Apesar de todos os produtos que podem ser fabricados utilizando o metanol, o Brasil importa 100% do metanol que é consumido internamente, isso ocorre, pois a matéria-prima principal, o gás natural, apresenta preço médio muito elevado em comparação à outros países. Contudo, considerando o alto potencial que o metanol tem como combustível limpo e como precursor para diversos produtos químicos, como o biodiesel já produzido no país, o metanol verde, proveniente da hidrogenação do  $\text{CO}_2$ , se apresenta ao Brasil como uma grande oportunidade de desenvolvimento industrial e sustentável. (Souza, 2025)

## 2.2. Reação de Hidrogenação do $\text{CO}_2$

Em relação a produção de metanol a partir somente do  $\text{CO}_2$  e do  $\text{H}_2$ , uma das maiores líderes no setor é a *Carbon Recycling International (CRI)*, empresa islandesa fundada em 2006 que já apresenta plantas de hidrogenação do  $\text{CO}_2$  em escala industrial. A primeira usina de metanol renovável é a George Olah, construída entre 2010-2012 em

Svartsengi na Islândia, com uma capacidade de 1300 a 4000 toneladas por ano de metanol. A unidade de produção foi desenvolvida para converter dióxido de carbono dos gases de combustão liberados por uma usina geotérmica adjacente, aproveitando a molécula de dióxido de carbono que, de outra forma, seria liberada na atmosfera. Dessa maneira, a planta George Olah é responsável por realizar a reciclagem de 5.500 toneladas de emissões de dióxido de carbono por ano.

A CRI também realizou outros investimentos na área desde então, como em 2022, em que contribuiu para a construção de uma nova planta em escala industrial de produção de metanol renovável na cidade de Anyang, na província chinesa de Henan. A planta está localizada adjacente a uma produção de gás de forno de coque (COG), de modo a transformar o CO<sub>2</sub> que seria liberado na atmosfera em um produto de valor agregado. A planta é capaz de produzir 110.000 toneladas de metanol por ano, contribuindo, assim, para o reciclo de 160.000 toneladas de CO<sub>2</sub> por ano. A CRI também está projetando uma nova planta de reciclo de carbono em Lianyungang, província de Jiangsu na China, com uma capacidade de produzir 100.000 toneladas de metanol por ano e, assim, reciclar 150.000 toneladas de CO<sub>2</sub> por ano.

A América do Sul também é pioneira no desenvolvimento de metanol verde, já que em 2022 foi inaugurado o projeto "Haru Oni" no Chile, planta que chegou a produzir na fase piloto 750.000 litros de metanol e utiliza como fonte de geração de hidrogênio a eletrólise da água. A planta pertence à startup chilena *Highly Innovative Fuels* (HIF) e foi construída em parceria com a *Siemens*. (CNN, 2022)

Três principais rotas têm sido consideradas para a síntese de metanol a partir da hidrogenação do CO<sub>2</sub>: a rota do formiato, a rota RWGS seguida da hidrogenação do CO, e a rota trans-COOH\* (em que o símbolo \* indica espécies adsorvidas na superfície do catalisador). As reações elementares de cada dessas rotas encontram-se organizadas na ilustração na Figura 4. (Araújo; Mitchell; Pérez-Ramírez, 2024)

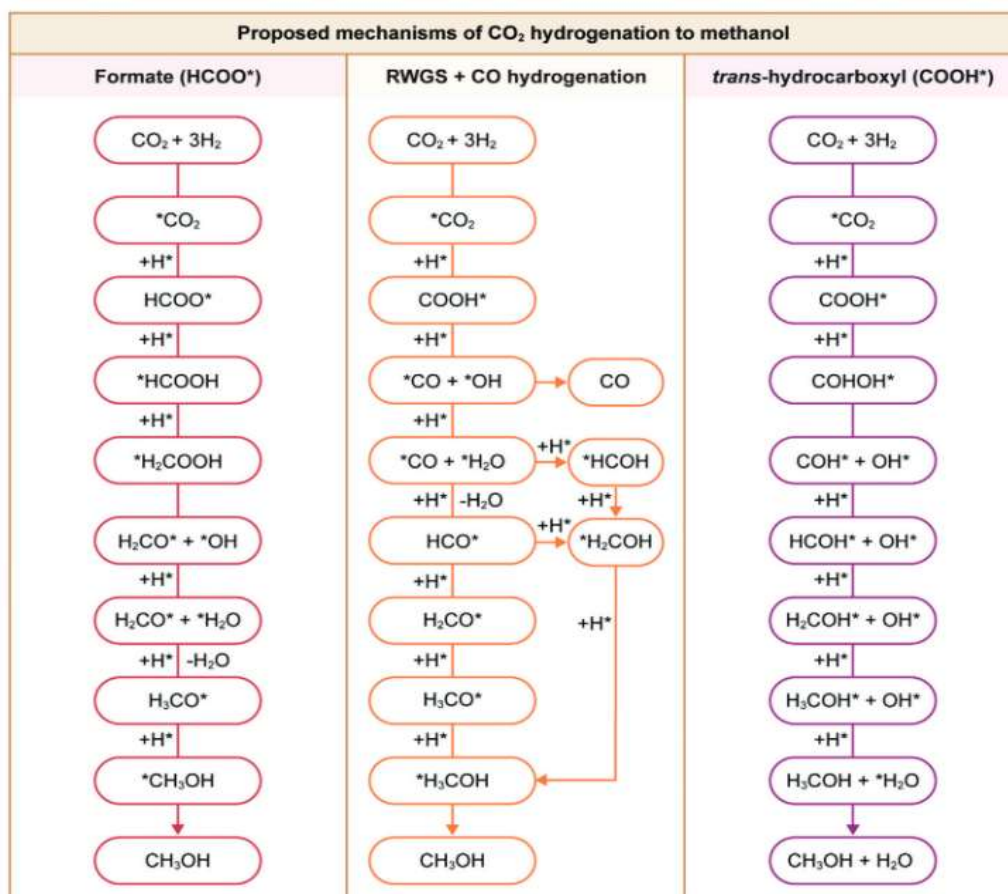


Figura 4 – Vias de reação e principais intermediários propostos para a hidrogenação de CO<sub>2</sub> em metanol. Fonte: (Araújo; Mitchell; Pérez-Ramírez, 2024)

A rota de síntese de metanol a partir do CO<sub>2</sub> requer uma quantidade adicional de hidrogênio para promover a remoção de um átomo de oxigênio da molécula de CO<sub>2</sub>, originando água como subproduto. Além disso, a hidrogenação do CO<sub>2</sub> em metanol compete com a reação RWGS, que produz predominantemente monóxido de carbono (CO). Esse CO formado pode, subsequentemente, ser convertido em metanol por meio de hidrogenação, embora essa conversão dependa significativamente do tipo de catalisador utilizado e da cinética do processo. (Ibrahim et al., 2024)

Por ser uma reação exotérmica, a hidrogenação direta do CO<sub>2</sub> em metanol é favorecida em temperaturas mais baixas. No entanto, a alta estabilidade da molécula de dióxido de carbono dificulta sua ativação nessas condições. Dessa forma, é necessário definir uma temperatura de operação adequada para equilibrar esses efeitos. Em geral, a reação ocorre em temperaturas relativamente baixas, sob altas pressões e com razões molares H<sub>2</sub>/CO<sub>2</sub> variando entre 3 e 4. Já a rota RWGS, de natureza endotérmica, é favorecida em temperaturas elevadas o que pode ser indesejável, já que leva ao consumo

excessivo de hidrogênio e à diminuição do rendimento em metanol. Além disso, a geração de água durante o processo pode causar a sinterização dos catalisadores, comprometendo sua atividade e estabilidade. (San et al., 2025; Schwiderowski; Ruland; Muhler, 2022; Zhong et al., 2020)

A produção de metanol via hidrogenação do  $\text{CO}_2$  é fortemente influenciada pelas condições operacionais, como temperatura e pressão de reação, composição da alimentação gasosa e velocidade espacial. Diversos estudos têm investigado essa reação sob uma ampla faixa de parâmetros, com pressões variando de 1 a 440 bar, temperaturas entre  $100\text{ }^\circ\text{C}$  e  $360\text{ }^\circ\text{C}$  e razões molares  $\text{H}_2/\text{CO}_2$  de 3 a 14. De modo geral, as condições mais favoráveis à formação de metanol situam-se em temperaturas entre  $200\text{ }^\circ\text{C}$  e  $300\text{ }^\circ\text{C}$  e pressões de 30 a 100 bar, faixas que proporcionam um bom equilíbrio entre conversão e seletividade. (Kanuri et al., 2022)

A produção de metanol a partir do  $\text{CO}_2$  difere do método tradicional, a partir do gás natural, principalmente no fornecimento das matérias primas, sendo estas a captura e o tratamento do carbono e a formação de hidrogênio, normalmente por meio da eletrólise da água, diferente da reforma do gás natural para a geração de gás de síntese. Isso é ilustrado na figura 5.

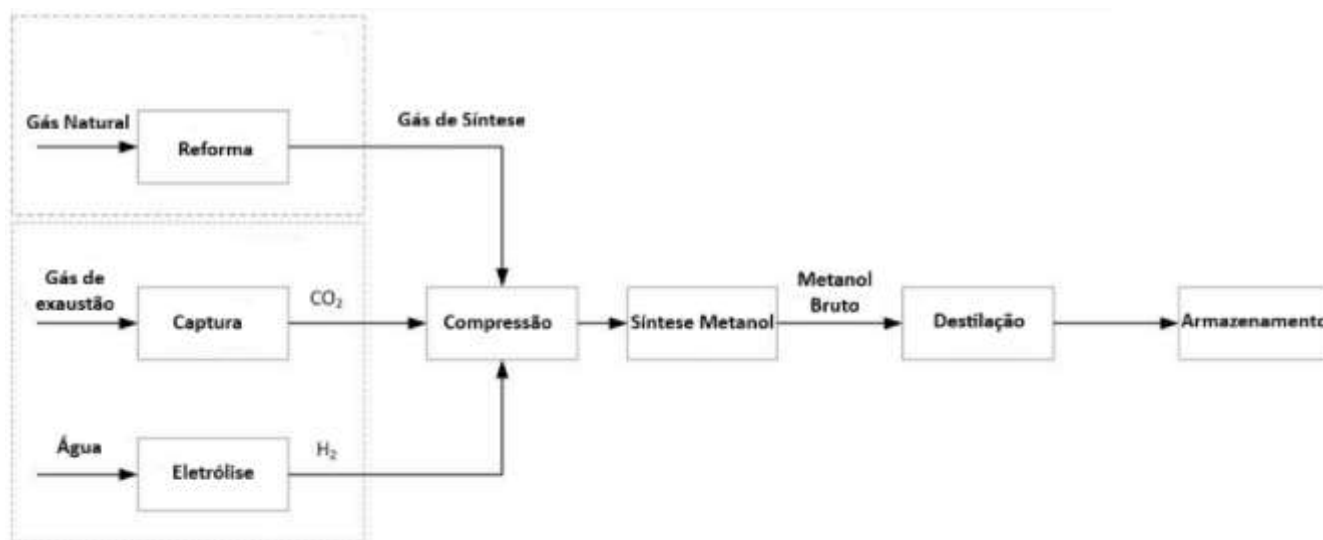


Figura 5: Diagrama de blocos mostrando a diferença entre a origem de matérias primas na produção de metanol. Fonte: (Marlin; Sarron; Sigurbjörnsson, 2018) adaptado.

### 2.3. Absorção de CO<sub>2</sub> por aminas

A absorção de CO<sub>2</sub> por aminas é um processo químico usado para capturar dióxido de carbono de correntes gasosas, onde o gás é dissolvido em uma solução aquosa de amina em uma torre de absorção. A monoetanolamina (MEA) é um dos principais compostos utilizados nos tratamentos de gases devido principalmente ao seu baixo custo, taxa de reação rápida e à sua resistência térmica. Uma das grandes desvantagens do processo de absorção por aminas é a grande quantidade de energia requerida para a regeneração do absorvente. (Dallos; Altsach; Kotsis, 2001; Kwak et al., 2012)

A captura do CO<sub>2</sub> ocorre por meio de um absorvedor, onde uma solução aquosa de amina entra em contato com o gás em se deseja purificar ocorrendo uma absorção química e ocorre uma absorção química, ou seja, o ocorre uma reação química. A reação de absorção da solução de MEA com CO<sub>2</sub> é complexa e diferentes rotas podem ter preferência a depender das concentrações dos gases (Lv et al., 2015), mas consiste na formação de um carbamato a pequenas concentrações de CO<sub>2</sub> ou na formação de HCO<sub>3</sub><sup>-</sup> e CO<sub>3</sub><sup>2-</sup> e na hidrólise do carbamato, para altas concentração de dióxido de carbono. Os mecanismos reacionais estão representados na Figura 6. Após a absorção do CO<sub>2</sub>, ocorre um processo de dessorção em uma coluna stripper, a fim de separar a MEA do gás, o processo de absorção industrial do CO<sub>2</sub> por meio da monoetanolamina está esquematizado na Figura 7. (Oh et al., 2016)

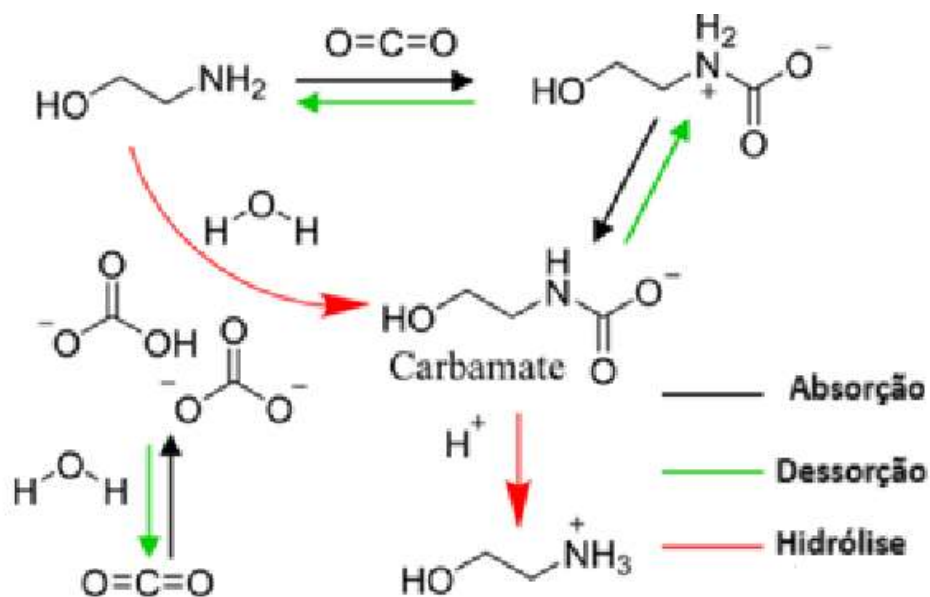


Figura 6: Mecanismo de captura de CO<sub>2</sub> em solução de MEA. Fonte: (Lv et al., 2015) adaptado.

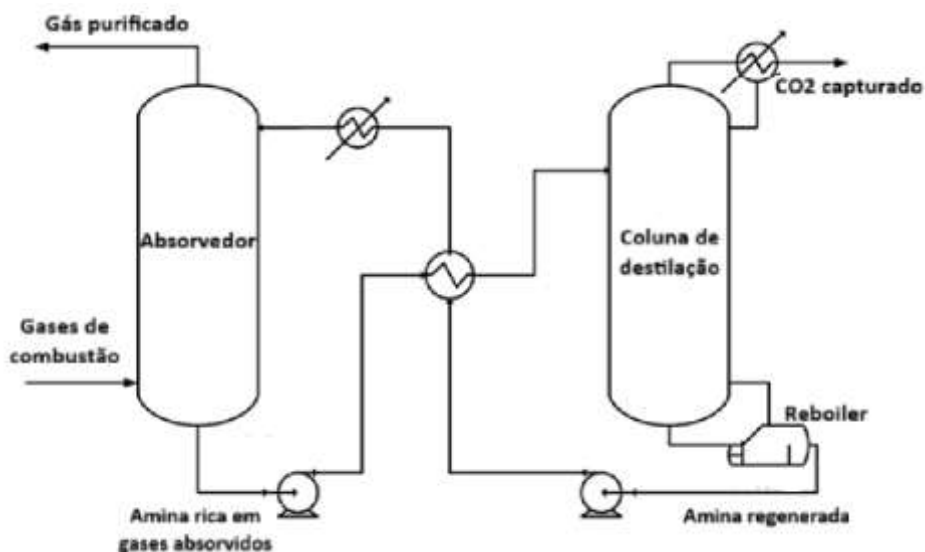


Figura 7: Fluxograma convencional para captura de CO<sub>2</sub> baseada em aminas. Fonte: (Oh et al., 2016) adaptado.

A produção de monoetanolamina (MEA) ocorre por meio da reação entre amônia (NH<sub>3</sub>) em meio aquoso e óxido de etileno (EO) (Figura 8). Trata-se de uma reação exotérmica que não requer catalisador. A operação é conduzida sob pressões entre 50 e 70 bar, a fim de manter a amônia na fase líquida. Cada molécula de NH<sub>3</sub> pode reagir com uma, duas ou três moléculas de EO, originando, respectivamente, monoetanolamina (MEA), dietanolamina (DEA) ou trietanolamina (TEA). A composição final da mistura depende diretamente da razão molar NH<sub>3</sub>/EO, permitindo ajustar o processo conforme o produto desejado: quanto maior a proporção de amônia, maior será a formação de MEA. (Luis, 2016)

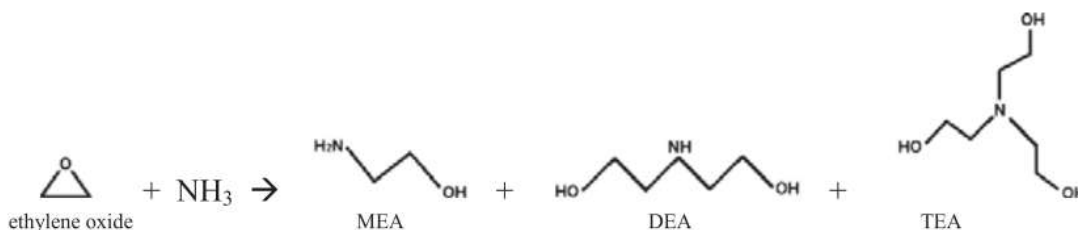


Figura 8 – Reação de Produção de MEA. Fonte: (Luis, 2016)

## 2.4. Eletrólise da água

A eletrólise da água é um processo eletroquímico no qual a eletricidade é usada para separar a água em dois gases, hidrogênio e oxigênio. A reação pode ser expressa da seguinte forma:



A eletrólise pode ser classificada em três maneiras diferentes de acordo com o eletrólito usado na célula eletrolítica: eletrólise alcalina, eletrólise de membrana eletrolítica polimérica (PEM) e eletrólise de vapor em alta temperatura (HT). (“FUELS – HYDROGEN PRODUCTION | Water Electrolysis”, 2009)

Eletrólise alcalina: utiliza-se uma solução aquosa alcalina como eletrólito, normalmente hidróxido de potássio a concentrações de 20% a 40% em peso. O processo ocorre a temperaturas entre 343 K e 363 K e a pressão ambiente ou até 3 Mpa. A eletrólise alcalina é uma tecnologia já bem estabelecida, e atualmente a maior parte do hidrogênio obtido por eletrólise é gerada por meio de eletrolisadores alcalinos.

Uma célula de eletrólise alcalina é composta por dois compartimentos, um catódico e um anódico, separados por um diafragma poroso que impede a mistura de hidrogênio e oxigênio, mas permite a passagem de íons  $OH^-$ . Esses compartimentos são preenchidos por uma solução aquosa de KOH, que atua como eletrólito e circula continuamente para garantir condução iônica, remoção de calor e homogeneidade química. Nos dois lados da célula ficam os eletrodos perfurados, geralmente de níquel, materiais que favorecem a liberação de bolhas gasosas e reduzem a resistência ao fluxo de corrente. Durante a operação, o  $H_2$  é produzido no cátodo e o  $O_2$  no ânodo, enquanto os íons  $OH^-$  atravessam o diafragma para fechar o circuito iônico. Este processo está esquematizado na Figura 9.

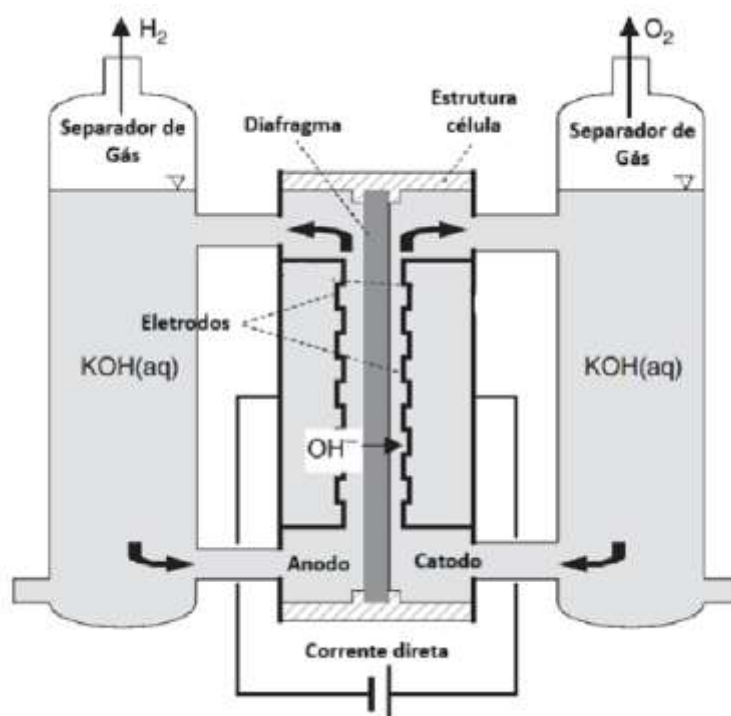


Figura 9: Diagrama esquemático de uma célula de eletrólise alcalina convencional. Fonte: (“FUELS – HYDROGEN PRODUCTION | Water Electrolysis”, 2009)

No caso da eletrólise de membrana eletrolítica polimérica (PEM), esta utiliza de uma membrana sólida polimérica como eletrólito e separador de gases, representado pela Figura 10. Essa membrana é composta por um material ácido perfluorado, como Nafion, que conduz prótons  $H^+$  através de sua estrutura quando água é fornecida ao anodo. A água alimentada ao lado do oxigênio se decompõe: libera elétrons, forma oxigênio gasoso e prótons atravessam a membrana em direção ao catodo. No catodo, esses prótons se combinam com elétrons provenientes da fonte externa para formar hidrogênio de alta pureza. O uso da membrana sólida elimina a necessidade de solução alcalina ou outros eletrólitos líquidos, tornando o processo mais seguro, compacto e adequado para operação pressurizada. (“FUELS – HYDROGEN PRODUCTION | Water Electrolysis”, 2009)

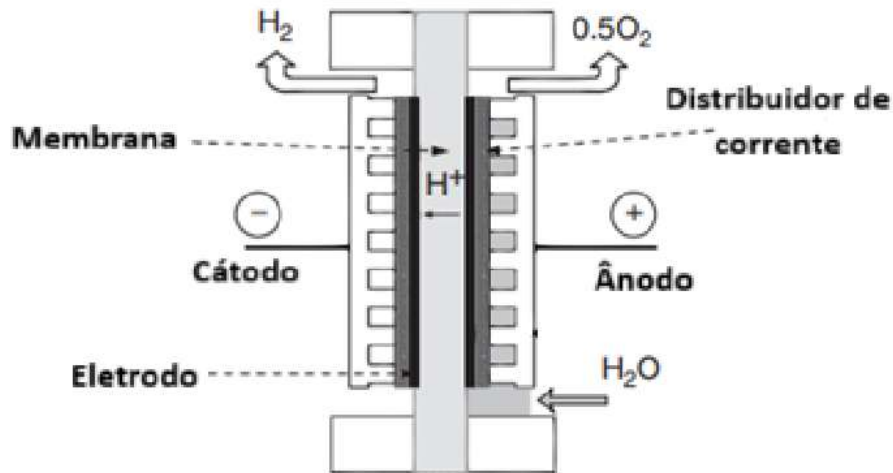


Figura 10: Princípio básico de uma célula de eletrólise com membrana de eletrólito polimérico (PEM). Fonte: (“FUELS – HYDROGEN PRODUCTION | Water Electrolysis”, 2009) adaptado.

A eletrólise de vapor em alta temperatura é realizada em células eletrolíticas de óxido sólido (SOECs), que operam tipicamente entre 700 °C e 1000 °C. Nessa faixa de temperatura, a energia térmica reduz significativamente a energia elétrica necessária para quebrar a molécula de água, tornando o processo potencialmente mais eficiente do ponto de vista termodinâmico. O eletrólito é um óxido sólido cerâmico que conduz íons óxido  $O^{2-}$ . O vapor de água é alimentado ao catodo, onde recebe elétrons e se converte em hidrogênio e íons óxido. Esses íons atravessam o eletrólito sólido até o anodo, onde são descarregados formando oxigênio gasoso.

### 3. MATERIAIS E MÉTODOS

As simulações dos processos foram realizadas utilizando o *software* Aspen Plus versão 14, que é um *software* desenvolvido pela empresa AspenTech que utiliza de modelos matemáticos e equações para prever o desempenho do processo, utilizando um vasto banco de dados de propriedades termodinâmicas.

#### 3.1. Hidrogenação do CO<sub>2</sub>

As simulações do processo de hidrogenação do CO<sub>2</sub> para a formação de metanol foram baseadas no trabalho de (Rosa, 2025), em que ela realizou uma avaliação tecnô-econômica do processo considerando os limites termodinâmicos. O fluxograma desenvolvido no Aspen Plus versão 14 está representado na figura 11, em que o processo começa com duas correntes, uma com alimentação de CO<sub>2</sub> e outra com alimentação de H<sub>2</sub>, provenientes do processo de absorção por amina (MEA) e hidrólise da água, respectivamente. Para esta etapa, foi utilizado o modelo termodinâmico UNIFAC que avalia as interações moleculares considerando a contribuição combinatória e residual dos grupos funcionais presentes nas moléculas, em lugar de analisar suas estruturas integrais. (*Aspen Physical Property System*, 2001)

Primeiramente, as duas correntes de alimentação são unidas no equipamento “Mix1”, sendo que a alimentação ocorre a pressão de 2 bar e temperatura de 30 °C. Em seguida a corrente deve passar um processo de compressão em estágios, no caso de uma compressão para 100 bar, são necessários quatro compressores. Entre cada estágio de compressão é necessário a instalação de trocadores de calor por conta do aumento de temperatura provocado pelos compressores. O tipo dos compressores simulados no Aspen Plus versão 14 foi o isentrópico. A metodologia utilizada por (Rosa, 2025) para o número de compressores é baseada no texto (Bloch, 1933), descrito pela equação 3.1, em que  $R_s$  (razão de pressão por estágio) é uma função de  $R_t$  (razão de pressão total) e  $N_s$  (número total de estágios) e não deve ultrapassar o valor de três.

$$R_s = (R_t)^{1/N} \quad (3.1)$$

Após o processo de compressão, a corrente de CO<sub>2</sub> e H<sub>2</sub> pressurizadas (7) passam por um trocador de calor e para a etapa de reação, este processo ocorre em um reator do tipo estequiométrico no Aspen Plus versão 14 (RStoic). O RStoic é um tipo de reator disponível no Aspen Plus utilizado para representar reações químicas em situações em que a cinética não é conhecida ou não é relevante, mas onde a estequiometria e o grau de conversão ou extensão da reação são definidos. Esse bloco simula reatores por conversão, nos quais se informa a conversão de um reagente com base na quantidade alimentada, permitindo ao *software* determinar as correntes de saída. Ele é particularmente útil para estimar o balanço de massa e energia do processo, inclusive o calor liberado ou absorvido pela reação.

Baseando-se nos dados sobre a planta de geração de metanol renovável George Olah da *Carbon Recycling International* (CRI) em Svartsengi na Islândia e no trabalho de (Rosa, 2025), optou-se por uma temperatura de operação de 250°C e pressão de operação de 100 bar. (Dieterich et al., 2020)

Após a etapa de reação, ocorre uma separação dos produtos por meio de um tambor flash, onde duas correntes são formadas, uma em fase líquida e outra em fase gasosa. No Aspen Plus versão 14, utilizou-se o bloco Flash2, em que é possível modelar um flash padrão com duas correntes de saída e definir a pressão e a temperatura de operação. O fluxo de líquido (11) que sai na base do vaso flash é composto principalmente por metanol e água, já o fluxo de gás que sai do topo (14) do flash é composto majoritariamente por H<sub>2</sub>, CO e CO<sub>2</sub>.

A corrente de saída de gás do flash passa por um separador que funciona como uma purga, um reciclo de 95% foi considerado para o sistema. Esta purga é importante pois evita o acúmulo de monóxido de carbono no sistema, além de prevenir erros de convergência no *software* Aspen Plus versão 14. Depois da separação, a corrente passa por um trocador de calor e por um compressor, a fim de adequar as condições do fluxo para o retorno ao sistema antes do reator.

A corrente líquida proveniente do flash então passa para o último processo de separação que, para fins de simplificação, foi utilizado um separador de componentes no Aspen Plus versão 14, este é representado pelo bloco Sep no *software* e é capaz de separar componentes com base em vazões especificadas ou frações de divisão. Utilizou-se uma separação de 99% do metanol. Para uma simulação mais verossímil, a utilização de colunas de destilação seria mais adequada, mas para fins deste trabalho o separador é satisfatório.

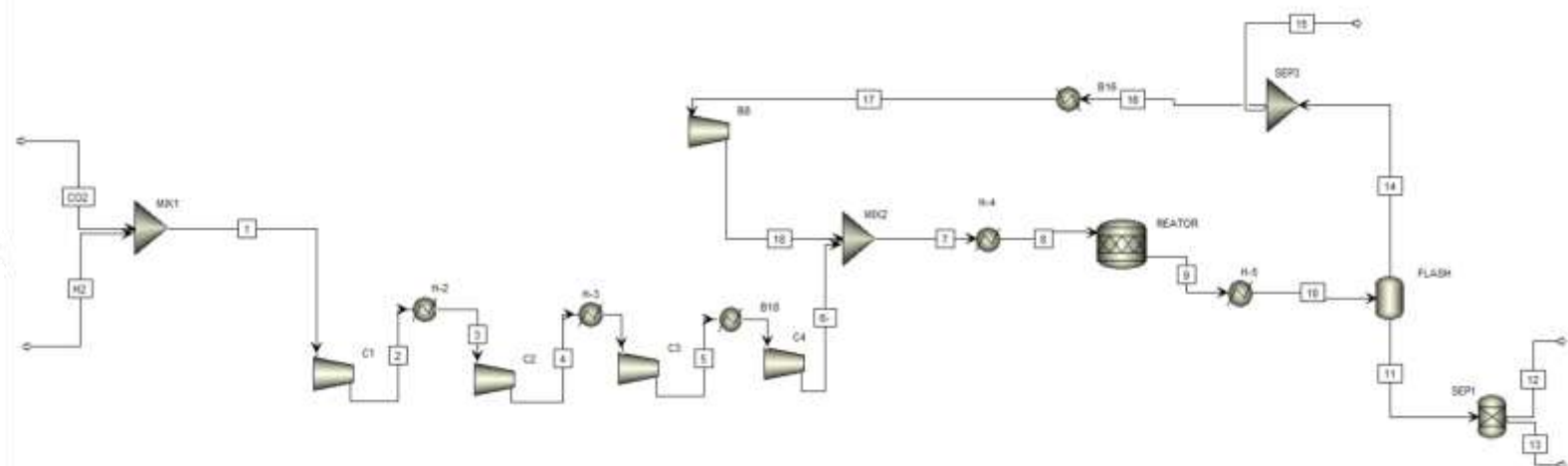


Figura 11: Fluxograma montado no Aspen da produção de metanol a partir do H<sub>2</sub> e do CO<sub>2</sub>. Fonte: elaborado pelo autor.

### 3.2. Absorção por Amina (MEA)

Para a simulação do processo de absorção do CO<sub>2</sub> por meio de amina, foi considerado a monoetanolamina (MEA), por conta de sua alta utilização, apresenta mais de 50 anos de uso industrial (Oh et al., 2016). A simulação foi realizada baseando-se no exemplo padrão pré-instalado no Aspen Plus versão 14, neste caso no arquivo ENRTL-RK MEA no local de captura de carbono. Esta simulação utiliza do modelo termodinâmico ENRTL-RK, ou seja, é o modelo NRTL de eletrólitos assimétrico com a equação de estado de Redlich-Kwong e a lei de Henry para sistemas eletrolíticos sob estado de referência assimétrico para espécies iônicas, como descrito no próprio *software*. (Aspen Physical Property System, 2001)

O sistema apresenta três alimentações, uma que contém gases de combustão (FLUEGAS), representado aproximadamente o que seria expelido na atmosfera por uma indústria, composta por gás nitrogênio, gás oxigênio, água e dióxido de carbono, este que será absorvido. Nas outras duas correntes de alimentação, uma contém os íons presentes na água (WATERMU) e a outra contém a monoetanolamina (MEAMU).

Os gases de combustão, junto com água e uma solução aquosa de monoetanolamina entram em um absorvedor, representado no Aspen por uma coluna de destilação RadFrac que é um bloco de simulação avançado utilizado para representar e estudar colunas de destilação mais complexas, incluindo destilação azeotrópica, extrativa

e reativa. Ele é capaz de tratar sistemas fortemente não ideais, múltiplas correntes de entrada e de produto, além de diversos tipos de internos de coluna. O absorvedor apresenta três correntes de saída, no topo há a saída dos gases que não foram absorvidos (GASOUT), composto principalmente por  $O_2$ ,  $N_2$  e água. No meio da coluna, sai uma corrente composta principalmente por  $H_2O$  (WATEROUT), que será logo incorporada à corrente de alimentação de água. A corrente no fundo do absorvedor (RICHOUT) é composta principalmente por monoetanolamina, água e  $CO_2$ , está que irá para as etapas de purificação onde o dióxido de carbono será separado.

A corrente do fundo do absorvedor passa por um trocador de calor a fim de aumentar a temperatura antes de entrar em uma coluna de destilação, também RadFrac. Esta coluna também apresenta três saídas, uma no fundo (LEANOUT) composta principalmente por água que depois é resfriada e misturada à corrente de alimentação de MEA. A corrente de condensado (COND) é composta por água, MEA e  $CO_2$ , que depois passa por um processo extra de separação em um tambor flash, no Aspen um Flash2, a fim de concentrar a quantidade de monoetanolamina.

A última corrente que sai da coluna de destilação ( $CO_2OUT$ ) é a composta praticamente em sua totalidade de  $CO_2$ , e que será conectada na corrente de alimentação de dióxido de carbono na simulação de produção do metanol verde. Todo o fluxograma feito no Aspen Plus versão 14 pode ser visualizado na Figura 12.

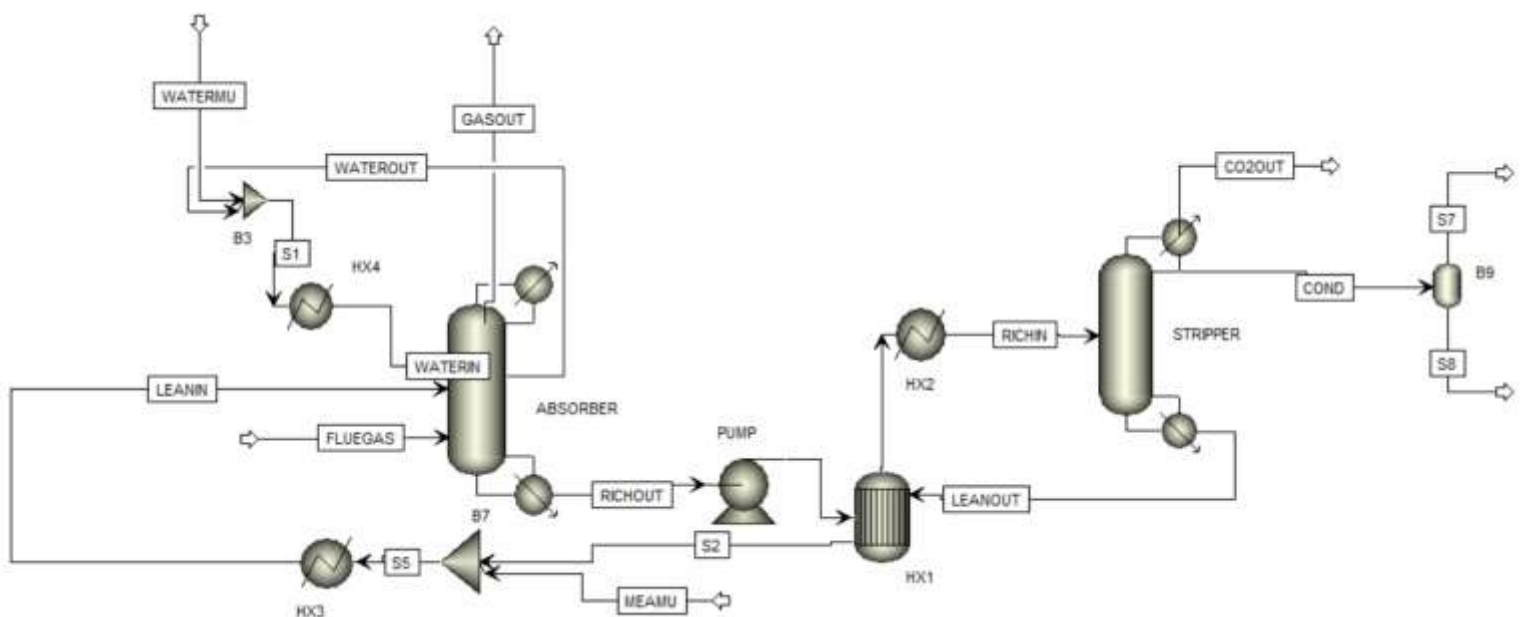


Figura 12: Fluxograma montado no Aspen para a absorção de  $CO_2$  por Amina (MEA). Fonte: Elaborado pelo autor.

### 3.2. Eletrólise da água

A simulação da eletrólise da água foi realizada em meio alcalino também baseando-se em um exemplo padrão pré-instalado no Aspen Plus versão 14, neste caso: *Green hydrogen production using na alkaline electrolyzer*. O modelo termodinâmico utilizado nesta simulação é o NRTL, modelo não aleatório de dois líquidos, que descreve como moléculas diferentes interagem entre si por meio de parâmetros de energia que representam a afinidade ou repulsão entre pares de componentes. O NRTL é especialmente eficiente para sistemas com forte não idealidade, como misturas contendo álcool-água, eletrólitos orgânicos ou substâncias altamente polares. (*Aspen Physical Property System*, 2001).

A simulação apresenta uma entrada de reagente (H<sub>2</sub>O-IN), que contém somente água a 25°C e 1 bar e é bombeado para um vaso flash, bloco *Flash2* no Aspen. Este tambor flash também é alimentado por uma corrente de solução aquosa rica em gás oxigênio (O<sub>2</sub>-STACK) proveniente da representação da célula eletrolítica. A corrente de cima do flash é composta majoritariamente por gás oxigênio e passa novamente por uma etapa de separação a fim de purificar ainda mais a corrente de O<sub>2</sub>. A corrente de baixo do flash (R-O<sub>2</sub>-KOH) contém uma solução aquosa básica, contendo hidróxido de potássio que passa por um trocador de calor antes de entrar na célula eletrolítica.

A célula eletrolítica na simulação é representada por um Stack no Aspen Plus versão 14 que é uma estrutura usada para agrupar e executar vários modelos ACM, *Aspen Custom Modeler*, em sequência, ou seja, como se fosse um conjunto organizado de blocos personalizados. Neste caso, está sendo usado um modelo que simula uma célula de eletrólise da água em meio alcalino.

Sendo assim, no bloco *Stack* há duas correntes de saída, uma contendo uma solução rica em oxigênio (O<sub>2</sub>-STACK) que vai para o flash junto com a água de alimentação e outra com uma solução rica em gás hidrogênio (H<sub>2</sub>-STACK). Esta corrente também é direcionada a um flash, onde é separado em uma corrente contendo H<sub>2</sub> no topo (H<sub>2</sub>PROD) e em uma corrente contendo uma solução aquosa básica (R-H<sub>2</sub>-KOH). Este sistema pode ser observado na Figura 13, que apresenta o fluxograma completo da eletrólise da água em meio alcalino no Aspen Plus versão 14.

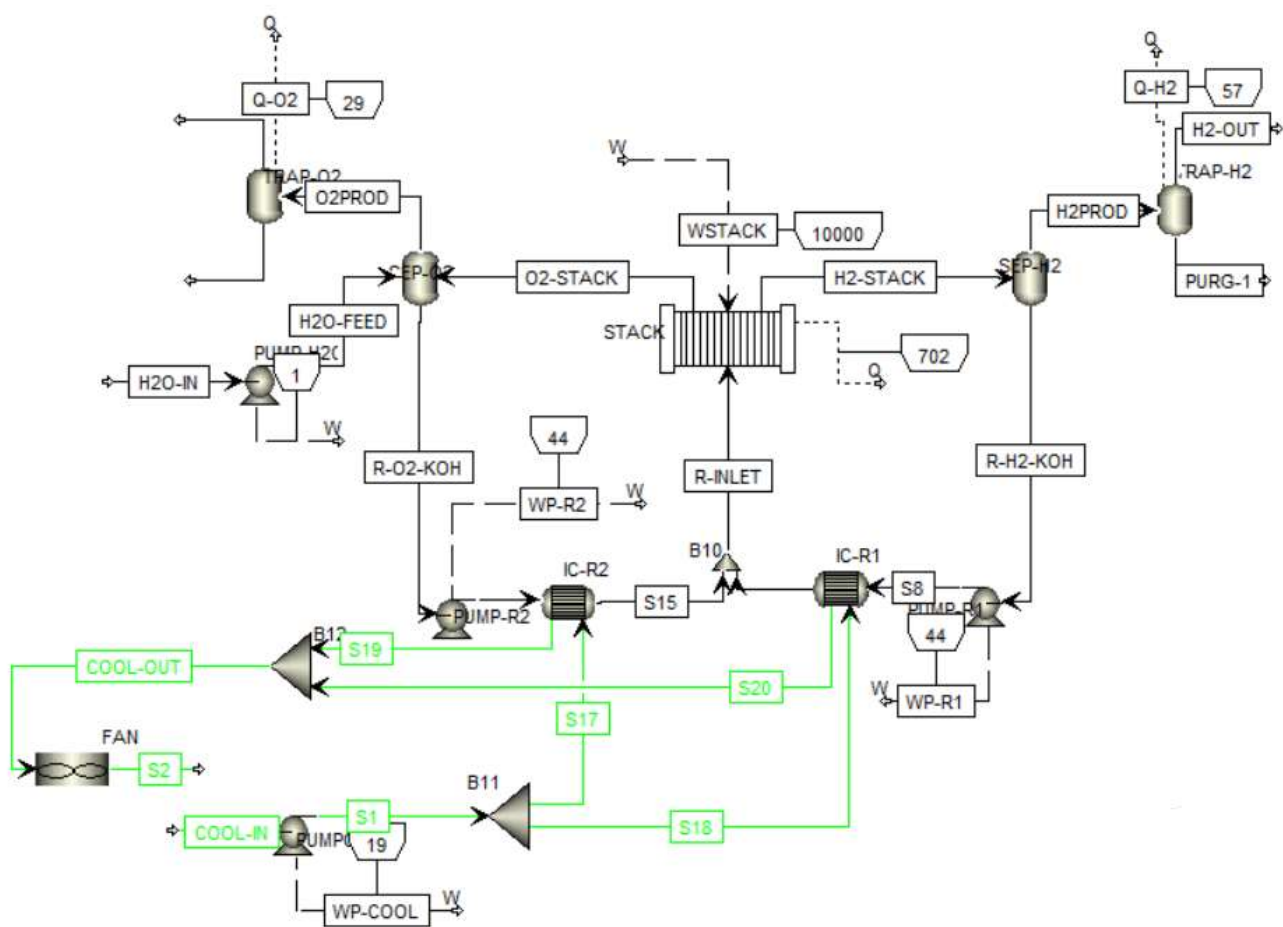


Figura 13: Fluxograma montado no Aspen para a eletrólise da água em meio alcalino. Fonte: Elaborado pelo autor.

#### 4. RESULTADOS E DISCUSSÕES

Primeiramente, foi realizado o teste considerando a alimentação e as condições de operação da planta de geração de metanol renovável George Olah da *Carbon Recycling International* (CRI) em Svartsengi na Island e no trabalho de (Rosa, 2025), em que se utilizou uma conversão das reações de 45%, operação da reação a 250 °C e alimentação de 5.500 toneladas por ano de dióxido de carbono e de 750 toneladas por ano de gás hidrogênio, considerando uma proporção molar de 1/3. Sendo assim, a tabela 1 foi obtida durante a simulação.

Tabela 1: Resultados da simulação da produção de metanol renovável considerando os parâmetros da planta Geoge Olah.

Componente	Alimentação (ton/ano)	Produção (ton/ano)
Dióxido de Carbono	5.500,00	-
Gás Hidrogênio	750,00	-
Metanol	-	3.166,15

Fonte: elaborado pelo autor

Dessa maneira, considerando que a *Carbon Recycling International* (CRI) afirma que a planta George Olah é capaz de produzir entre 1300 e 4000 toneladas de metanol renovável por ano, pode-se afirmar que o resultado obtido na simulação está, então, de acordo com a realidade. O fluxograma com os parâmetros de temperatura, dentro dos círculos, e pressão, dentro dos hexágonos, pode ser visto na figura 14.

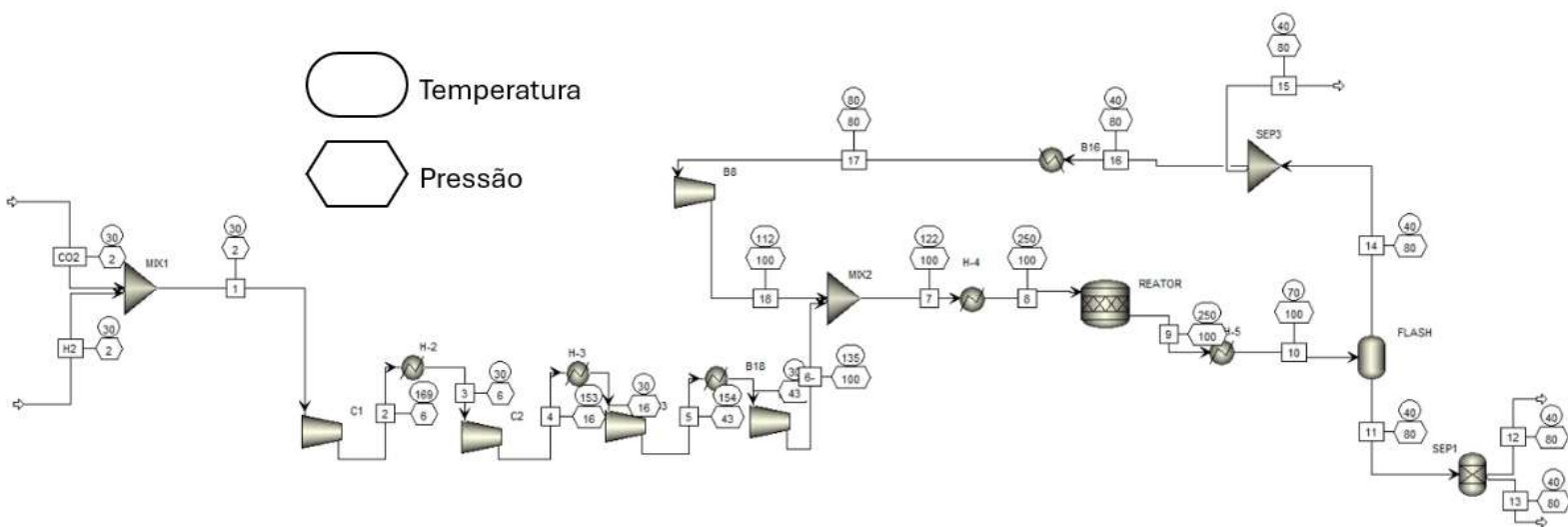


Figura 14: Fluxograma montado no Aspen da produção de metanol renovável com os resultados dos parâmetros de pressão e de temperatura. Fonte: elaborado pelo autor

Além disso, também a simulação também foi testada para as outras plantas de geração de metanol renovável da *Carbon Recycling International* (CRI): as plantas de Anyang e de Lianyungang, ambas na China. Em Anyang, a planta é capaz de reciclar 160.000 toneladas de CO<sub>2</sub> por ano, enquanto a de Lianyungang é capaz de recilcar 150.000 toneladas de CO<sub>2</sub> por ano. Considerando as mesmas condições de operação de 250 °C no reator, 100 bar de pressão e proporção molar entre CO<sub>2</sub> e H<sub>2</sub> de 1/3, obtiveram-se os resultados presentes na Tabela 2.

Tabela 2: Resultados da simulação da produção de Metanol renovável considerando os parâmetros de diferentes plantas da *Carbon Recycling International*.

Indústria	Alimentação CO <sub>2</sub> (ton/ano)	Produção Metanol CRI (ton/ano)	Produção Metanol Simulação (ton/ano)
Geroge Olah	5500,00	1.300,00-4.000,00	3.166,15
Anyang	160.000,00	110.000,00	93.035,58
Lianyungang	150.000,00	100.000,00	87.221,39

Fonte: elaborado pelo autor.

Considerando que no site da *Carbon Recycling International*, consta que as plantas de Anyang e de Lianyungang produzem 110.000 toneladas de metanol por ano e

100.000 toneladas de metanol por ano, respectivamente, pode-se afirmar que a simulação nessas condições está gerando menos metanol que o esperado, 93.035 toneladas por ano para a planta de Anyang e 87.221,39 toneladas por ano para a planta de Lianyungang. Essa discrepância pode estar relacionada às condições de temperatura e de pressão da reação, sendo que a CRI não consta estes valores para as plantas chinesas, também é possível que as conversões das reações sejam diferentes das utilizadas na simulação. Na Figura 15 é apresentado o fluxograma da simulação no Aspen Plus versão 14 com os valores de temperatura e de pressão em cada corrente.

Nas simulações realizadas para a absorção de CO<sub>2</sub> por meio da monoetanolamina (MEA), observou-se um rendimento em massa de 72,5% para o dióxido de carbono recuperado, ou seja, da alimentação de CO<sub>2</sub> nos gases de combustão 27,5% é perdido no processo, sendo a maioria perdida para os gases liberado. Dessa maneira, para utilizar uma alimentação de 5.500,00 toneladas de CO<sub>2</sub> por ano, como na planta islandesa George Olah, seriam necessários no total 7.586,20 toneladas por ano de CO<sub>2</sub> por ano.

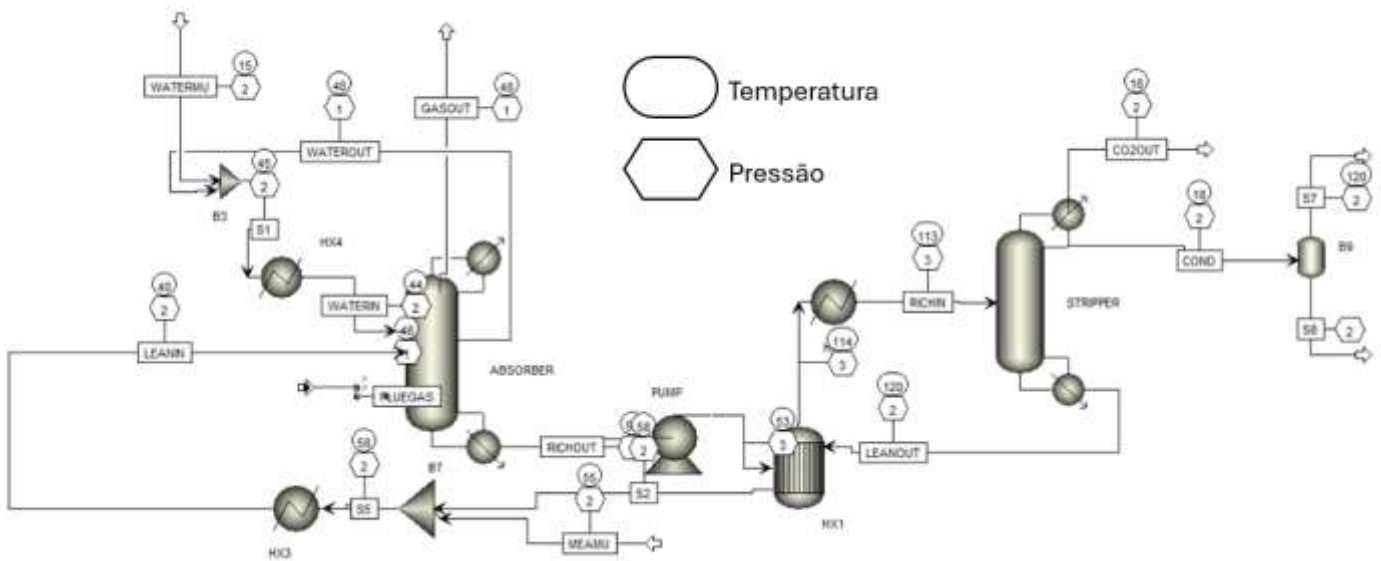


Figura 15: Fluxograma montado no Aspen da absorção de CO<sub>2</sub> com os resultados dos parâmetros de pressão e de temperatura. Fonte: elaborado pelo autor.

Para a produção de hidrogênio por meio da eletrólise da água, foi observado na simulação padrão do Aspen Plus versão 14 que 34485,80 toneladas de água por ano é capaz de produzir 3629,25 toneladas de gás hidrogênio por ano. Dessa maneira,

considerando esta proporção, para a planta de produção de metanol verde George Olah, seriam necessários 7126,63 toneladas de água por ano. Considerando o valor calculado na simulação do processo de geração do metanol de 3166,15 toneladas de metanol por ano, pode-se obter o valor de 2,25 toneladas de água para o uso na eletrólise por tonelada de metanol produzido. A Figura 16 é apresentada o fluxograma do processo de eletrólise da água com os valores de pressão e de temperatura para cada corrente.

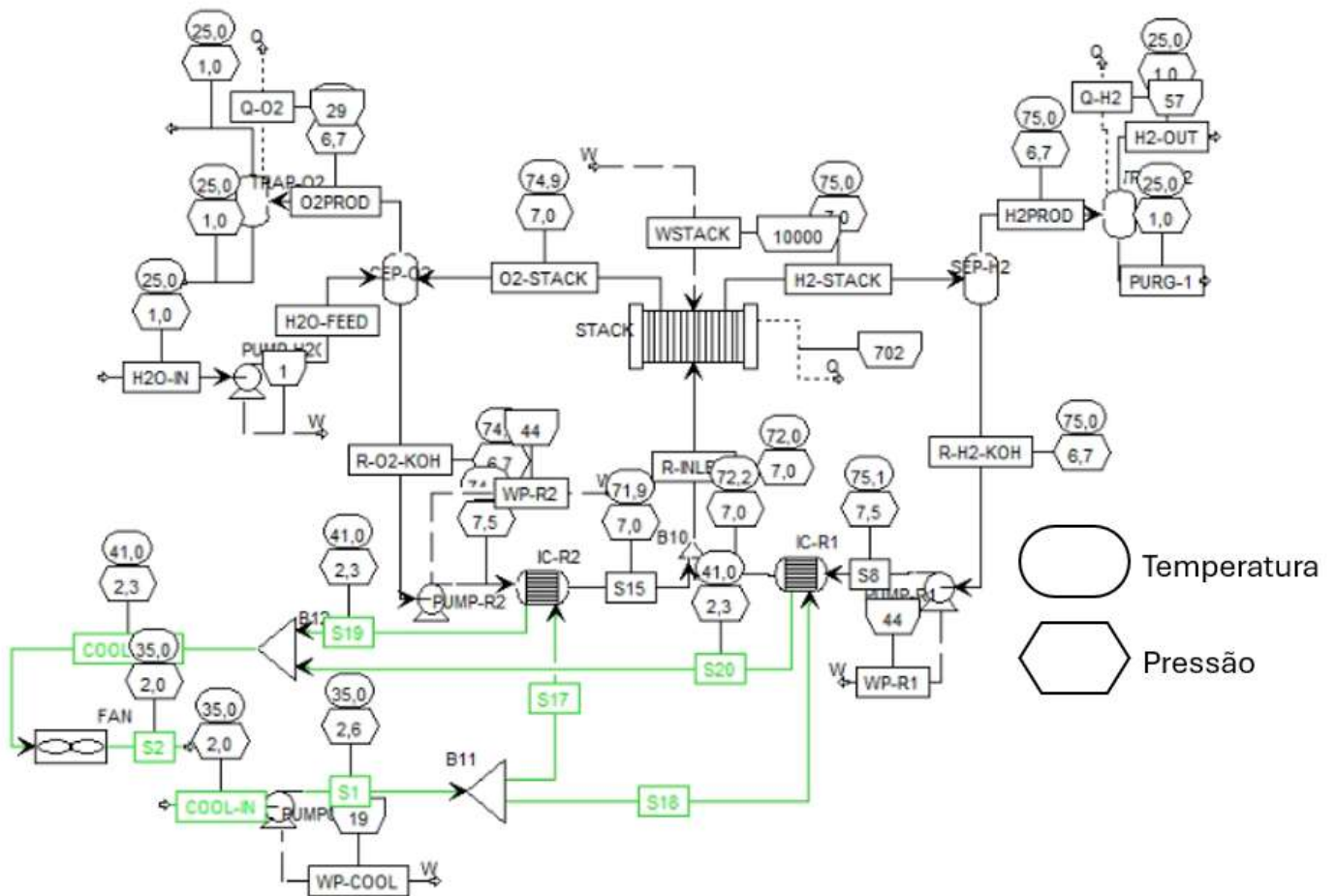


Figura 16: Fluxograma montado no Aspen da eletrólise da água com os resultados dos parâmetros de pressão e de temperatura. Fonte: elaborado pelo autor.

## 5. CONCLUSÕES E SUGESTÕES

As comparações realizadas entre os resultados das simulações no Aspen Plus e os valores disponibilizados de produção de metanol renovável das plantas da *Carbon Recycling International* (CRI) mostraram uma proximidade do sistema proposto no *software* com a realidade. No caso da comparação com a planta George Olah na Islândia, o valor de metanol obtido estava de acordo com a faixa fornecida pela empresa, enquanto nas indústrias chinesas de Anyang e de Lianyungang apresentaram valores próximos, mas menores do que os oferecidos. Essa discrepância entre os valores pode ser resultado de diversos fatores de operação, dentre eles: temperatura e pressão de operação da reação e taxa de conversão das reações.

Com as simulações realizadas para a absorção de CO<sub>2</sub> por meio da monoetanolamina (MEA) e para a eletrólise de água, foi possível obter um padrão para o consumo das matérias primas necessárias, dióxido de carbono e água para a produção de metanol renovável, sendo está uma etapa importante para o entendimento do processo como um todo.

Em relação às simulações de eletrólise da água e de absorção de CO<sub>2</sub> por meio da monoetanolamina, deve-se considerar que ambos os processos apresentam grandes gastos econômicos para a produção: energia elétrica e consumo de H<sub>2</sub>O para a eletrólise da água e recuperação da monoetanolamina para a absorção de CO<sub>2</sub>.

Sendo assim, uma análise econômica do processo de produção de metanol a partir do dióxido de carbono e do hidrogênio seria de interesse para pesquisas futuras. Vale ressaltar que, durante a eletrólise da água, há a produção de gás oxigênio, fator que deve ser considerado em uma possível análise econômica.

Além disso, por conta do rendimento em massa de 72,5% para o dióxido de carbono recuperado na etapa de absorção, futuras otimizações no fluxograma podem ser desejáveis, como a adição de colunas de absorção extras nos gases de saída (GASOUT). Dessa maneira, será evitado ainda mais a emissão de CO<sub>2</sub> para a atmosfera.

Considerando todas as possíveis variáveis comentadas para a simulação do reator, seria de interesse futuro realizar simulações com variação de algum desses fatores, mantendo o resto constante, ou utilizar um bloco de reator no Aspen Plus que considera a cinética da reação, RPlug, de modo que seria necessário somente a variação das condições de pressão e de temperatura.

## 6. REFERÊNCIAS

AGHEL, Babak *et al.* Review on CO<sub>2</sub> capture by blended amine solutions. **International Journal of Greenhouse Gas Control**, v. 119, p. 103715, 1 set. 2022.

ALAMRI, Abdulmajeed. THE METHANOL PROCESS, A BASIC INTRODUCTION What is Methanol by J.Jackson. [S.d.].

ARAÚJO, Thaylan Pinheiro; MITCHELL, Sharon; PÉREZ-RAMÍREZ, Javier. Design Principles of Catalytic Materials for CO<sub>2</sub> Hydrogenation to Methanol. **Advanced Materials**, v. 36, n. 48, p. 2409322, 2024.

ASPEN TECHNOLOGY, INC. *Physical property methods and models*. Version 11.1. Cambridge, MA: Aspen Technology, Inc., 2001.

ASSEN, Niklas von der *et al.* Life cycle assessment of CO<sub>2</sub> capture and utilization: a tutorial review. **Chemical Society Reviews**, v. 43, n. 23, p. 7982–7994, 3 nov. 2014.

BUI, Mai *et al.* Carbon capture and storage (CCS): the way forward. **Energy & Environmental Science**, v. 11, n. 5, p. 1062–1176, 16 maio 2018.

**Chile inaugura primeira planta industrial do mundo para combustíveis verdes**. Disponível em: <<https://www.cnnbrasil.com.br/economia/macroeconomia/chile-inaugura-primeira-planta-industrial-do-mundo-para-combustiveis-verdes/>>. Acesso em: 14 dez. 2025.

DALLOS, A.; ALTSACH, T.; KOTSIS, L. Enthalpies of Absorption and Solubility of Carbon Dioxide in Aqueous Polyamine Solutions. **Journal of Thermal Analysis and Calorimetry**, v. 65, n. 2, p. 419–423, 1 ago. 2001.

DIETERICH, Vincent *et al.* Power-to-liquid via synthesis of methanol, DME or Fischer–Tropsch-fuels: a review. **Energy & Environmental Science**, v. 13, n. 10, p. 3207–3252, 14 out. 2020.

FUELS – HYDROGEN PRODUCTION | Water Electrolysis. p. 394–413, 1 jan. 2009.

IBRAHIM, Abdulrauf Onimisi *et al.* A microkinetic study of CO<sub>2</sub> hydrogenation to methanol on Pd<sub>1</sub>–Cu(111) and Pd<sub>1</sub>–Ag(111) catalysts: a DFT analysis. **Physical Chemistry Chemical Physics**, v. 26, n. 14, p. 10622–10632, 3 abr. 2024.

KANURI, Suresh *et al.* An insight of CO<sub>2</sub> hydrogenation to methanol synthesis: Thermodynamics, catalysts, operating parameters, and reaction mechanism. **International Journal of Energy Research**, v. 46, n. 5, p. 5503–5522, 2022.

KWAK, No-Sang *et al.* A study of the CO<sub>2</sub> capture pilot plant by amine absorption. **Energy, Asia-Pacific Forum on Renewable Energy 2011**. v. 47, n. 1, p. 41–46, 1 nov. 2012.

LUIS, Patricia. Use of monoethanolamine (MEA) for CO<sub>2</sub> capture in a global scenario: Consequences and alternatives. **Desalination**, v. 380, p. 93–99, 15 fev. 2016.

LV, Bihong *et al.* Mechanisms of CO<sub>2</sub> Capture into Monoethanolamine Solution with Different CO<sub>2</sub> Loading during the Absorption/Desorption Processes. **Environmental Science & Technology**, v. 49, n. 17, p. 10728–10735, 1 set. 2015.

MARLIN, Dana S.; SARRON, Emeric; SIGURBJÖRNSSON, Ómar. Process Advantages of Direct CO<sub>2</sub> to Methanol Synthesis. **Frontiers in Chemistry**, v. 6, 27 set. 2018a.

MARLIN, Dana; SARRON, Emeric; SIGURBJÖRNSSON, Ómar. Process Advantages of Direct CO<sub>2</sub> to Methanol Synthesis. **Frontiers in Chemistry**, v. 6, p. 446, 27 set. 2018b.

**Methanol Market Size And Share | Industry Report, 2030**. Disponível em: <<https://www.grandviewresearch.com/industry-analysis/methanol-market>>. Acesso em: 21 nov. 2025.

Methanol Production and Applications: An Overview. In: **Methanol**. [S.l.]: Elsevier, 2018. p. 3–28.

NIU, Juntian *et al.* Comprehensive review of Cu-based CO<sub>2</sub> hydrogenation to CH<sub>3</sub>OH: Insights from experimental work and theoretical analysis. **International Journal of Hydrogen Energy**, v. 47, n. 15, p. 9183–9200, 19 fev. 2022.

OH, Se-Young *et al.* Energy minimization of MEA-based CO<sub>2</sub> capture process. **Applied Energy**, v. 169, p. 353–362, 1 maio 2016.

OLAH, George A. Beyond Oil and Gas: The Methanol Economy. **Angewandte Chemie International Edition**, v. 44, n. 18, p. 2636–2639, 2005.

RAFIEE, Ahmad. Modelling and optimization of methanol synthesis from hydrogen and CO<sub>2</sub>. **Journal of Environmental Chemical Engineering**, v. 8, n. 5, p. 104314, 1 out. 2020.

REDDY, Satish *et al.* Cost Effective CO<sub>2</sub> Capture from Flue Gas for Increasing Methanol Plant Production. **Energy Procedia**, v. 63, p. 1407–1414, 31 dez. 2014.

ROSA, Clara Perecin. Avaliação técnico-econômica do processo de hidrogenação seletiva de CO<sub>2</sub> a metanol considerando os limites termodinâmicos. 14 fev. 2025.

SAN, Xiaoguang *et al.* Comprehensive insight into Cu-based catalysts for CO<sub>2</sub> hydrogenation to methanol. **Sustainable Materials and Technologies**, v. 45, p. e01437, 1 out. 2025.

SCHWIDEROWSKI, Philipp; RULAND, Holger; MUHLER, Martin. Current developments in CO<sub>2</sub> hydrogenation towards methanol: A review related to industrial application. **Current Opinion in Green and Sustainable Chemistry**, v. 38, p. 100688, 1 dez. 2022.

SOUZA, Carolina. **Brasil importa 100% do metanol que consome, mas pode liderar produção verde. Além da Superfície**, 16 out. 2025. Disponível em: <<https://alemdasuperficie.org/setor/cenario-brasileiro/brasil-importa-100-do-metanol-que-consome-mas-pode-liderar-producao-verde/>>. Acesso em: 14 dez. 2025

VEDRTNAM, Ajitanshu; KALAUNI, Kishor; PAHWA, Rahul. A review of water electrolysis technologies with insights into optimization and numerical simulations. **International Journal of Hydrogen Energy**, v. 140, p. 694–727, 20 jun. 2025.

XIE, Shaoqu *et al.* Integration of carbon capture with heterogeneous catalysis toward methanol production: chemistry, challenges, and opportunities. **Catalysis Reviews**, v. 66, n. 4, p. 1478–1517, 1 out. 2024.

ZHONG, Jiawei *et al.* State of the art and perspectives in heterogeneous catalysis of CO<sub>2</sub> hydrogenation to methanol. **Chemical Society Reviews**, v. 49, n. 5, p. 1385–1413, 9 mar. 2020.

