

6 Conclusões

- A partir da nova técnica de preparação empregada foi possível conduzir uma dopagem substitucional da $m\text{-ZrO}_2$ com átomos de Zn, i.e., a criação de um óxido misto superficial de Zn e Zr ($\text{Zn}_x\text{Zr}_{1-x}\text{O}_{2-y}$), sem a geração de alguma outra fase no material.
- As vacâncias geradas como consequência da dopagem, promoveram a mobilidade de oxigênio e a redutibilidade do material. Este efeito promoveu as propriedades de óxido-redução da $m\text{-ZrO}_2$.
- As vacâncias na superfície do material, também promoveram a dissociação de moléculas de água presentes no meio reacional, de forma a fornecer espécies oxidantes úteis na regeneração do catalisador.
- As propriedades de óxido-redução da $m\text{-ZrO}_2$ foram incrementadas em proporção direta à quantidade de dopante presente no material, na faixa e condições estudadas.
- O incremento nas propriedades de óxido-redução da $m\text{-ZrO}_2$ não afetaram de maneira significativa as propriedades básicas nem as propriedades texturais. Já a densidade de sítios ácidos parece razoavelmente modificada pela presença de Zn.
- Testes catalíticos na reação reversa de deslocamento da água (RWGS), serviram como provas indiretas da promoção das propriedades óxido-redutoras do catalisador.
- Foi possível obter acetona, como produto principal, a partir de etanol, em uma única etapa reacional, mediante o emprego do catalisador $\text{Zn}_x\text{Zr}_{1-x}\text{O}_{2-y}$.
- Conferiu-se que a produção de acetona a partir de etanol, envolve acetaldeído como intermediário da reação.
- Demonstrou-se que a ausência de cobre nos catalisadores não foi impedimento para que a reação ocorresse, uma vez que as funções associadas a este elemento foram realizadas pelo óxido misto.

- Em geral, pode-se inferir que o mecanismo reacional seguido pelo sistema estudado segue as seguintes etapas:
 - o Formação de espécies etóxido na superfície do catalisador.
 - o Desidrogenação do etóxido em acetaldeído na superfície do catalisador.
 - o Geração de espécies acetato mediante a reação do acetaldeído com o oxigênio da rede cristalina do catalisador, o qual se reduz no processo.
 - o Ketonização de espécies acetato produzindo acetona e CO₂.
 - o Espécies oriundas da dissociação da água regeneram o catalisador reduzido.
- Demonstrou-se que a técnica desenvolvida no presente estudo, resultou efetiva na síntese do óxido misto de Zn e Zr.
- A simplicidade da técnica, assim como da composição do catalisador desenvolvido são indicativos preliminares na viabilização deste processo para um possível uso industrial na reação de interesse ou em outras que requeiram as mesmas propriedades físico-químicas.