

Integração de estudos químico-quânticos e experimentais na modificação sonoeletrocatalítica do óleo essencial de cravo-da-india (*Syzygium aromaticum*)

Leticia C. Santos^{1,4}, Camila C. de Araújo², Leticia M. Vilar², Joacy V. Ferreira³, Danilo G. Pessoa⁴, Marcelo Navarro³, Sofia Suely F.B. Rodrigues¹, Ana Carla da Silva⁴, Daniella Maria do A.F. Navarro⁴, Márcio Vilar¹

¹Instituto Federal de Pernambuco (IFPE- Recife), ²Colégio Santa Emilia-Olinda, ³Instituto Federal de Pernambuco (IFPE- Afogados da Ingazeira), ⁴Departamento de Química Fundamental da Universidade Federal de Pernambuco (UFPE)

Palavras-Chave: química computacional, ultrassom, química verde.

Introdução

Os óleos essenciais são extratos vegetais obtidos a partir de diversas partes das plantas através de métodos específicos, geralmente por destilação com vapor d'água, amplamente utilizados em várias indústrias, incluindo cosméticos, alimentos e farmacêuticos [1]. Com o aumento do interesse por produtos ecológicos, cresce a demanda por pesquisas que busquem compostos naturais para substituir substâncias sintéticas ou tradicionais, com o objetivo de reduzir sua presença nos produtos. Nesse cenário, a modificação dos componentes químicos dos óleos essenciais surge como uma alternativa tecnológica inovadora. Esse processo pode não apenas modificar, mas também amplificar a atividade biológica dos compostos, tanto isoladamente quanto em combinação sinérgica dentro do óleo essencial [2].

A hidrogenação é um processo amplamente utilizado na indústria química para a produção de uma gama de produtos, como margarina, gorduras vegetais, combustíveis e intermediários químicos. Tradicionalmente, este processo é conduzido na presença de catalisadores metálicos, como níquel, platina ou paládio, sob condições de alta pressão e temperatura, garantindo a saturação eficiente de óleos vegetais, a síntese de compostos farmacêuticos e a refinação de combustíveis [3,4]. Com o avanço das tecnologias, inovações recentes na hidrogenação têm focado no desenvolvimento de catalisadores mais eficientes e na exploração de técnicas alternativas, como a hidrogenação eletrocatalítica (HEC), que oferece vantagens significativas em termos de controle reacional e economia de energia [5].

Uma alternativa verde e promissora utilizada para melhorar a eficiência de processo de HEC é a aplicação de ultrassom (US), dando origem a uma área crescente na química, denominada de sonoeletroquímica. Quando aplicado em soluções, o US gera cavitação acústica, um fenômeno caracterizado pela formação e colapso violento de microbolhas de vapor, que libera grandes quantidades de energia em pontos localizados. Esse fenômeno melhora significativamente o transporte de massa, aumenta a taxa de transferência de elétrons e promove a limpeza da superfície do eletrodo, tornando-se particularmente útil em processos eletrocatalíticos [6,7]. Na sonoeletroquímica, a combinação de US com técnicas eletroquímicas tem se mostrado eficaz na aceleração de reações e na obtenção de rendimentos superiores, o que a torna uma ferramenta valiosa para a otimização de processos como a hidrogenação sonoeletrocatalítica (HSEC) de óleos essenciais [8].

Em processos (eletro)catalíticos, o estudo químico-quântico tem se mostrado uma ferramenta essencial para compreender os mecanismos de reação de hidrogenação. Utilizando a Teoria do Funcional da Densidade (DFT), é possível calcular propriedades eletrônicas de moléculas, prever as regiões mais reativas e entender como os elétrons interagem durante a hidrogenação [9]. Esses estudos permitem identificar os sítios reativos da molécula, como o orbital molecular de fronteira (LUMO), sendo crucial para entrada de elétrons e subsequente adição de hidrogênio. A otimização geométrica e a análise das cargas atômicas realizadas através da DFT fornecem insights sobre as mudanças estruturais que ocorrem durante a hidrogenação, possibilitando uma previsão precisa do comportamento reacional. Essa abordagem teórica não só complementa os estudos experimentais, mas também oferece uma

base sólida para a otimização de condições reacionais e o desenvolvimento de novos catalisadores [10].

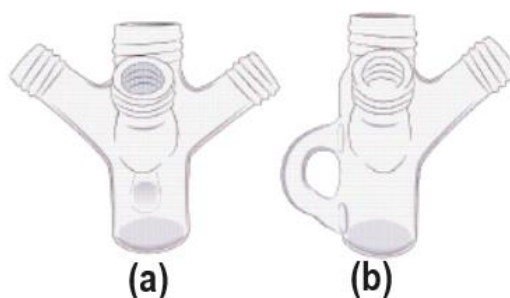
Neste sentido, este trabalho visa integrar a abordagem químico-quântico e uma análise experimental para o estudo da HSEC do óleo essencial (OE) de cravo-da-india (*Syzygium aromaticum*). A combinação dessas metodologias permite uma compreensão mais profunda do processo de hidrogenação, abordando tanto os aspectos teóricos quanto práticos. O estudo químico-quântico busca elucidar o mecanismo de reação da hidrogenação do componente majoritário do OE (eugenol), identificando os principais sítios reativos e as mudanças estruturais na molécula [9]. Por outro lado, a análise experimental explora como diferentes intensidades de US influenciam os rendimentos reacionais, oferecendo uma melhor compreensão sobre a aplicação prática e otimização do processo de HSEC de óleos essenciais [11].

Material e Métodos

Para extração do OE foram usados 500 g de cravo-da-índia (botão seco floral). Isso foi triturado em liquidificador e colocado em balão de fundo redondo com 3L de água destilada. Em seguida, o material foi submetido a hidrodestilação (3h) utilizando um aparato de Clavenger modificado. Posteriormente, o OE obtido foi seco com Na_2SO_4 anidro e armazenado sob refrigeração para posterior análise e identificação dos componentes

Os procedimentos de HSEC foram realizados em um Autolab PGSTAT101 potenciostato/galvanostato, utilizando o programa Nova 1.1. Para a aplicação de US foi usado um equipamento Bandelin Sonopuls ultrasonic homogenizer HD 2070, o qual dispõe de uma ponteira ultrassônica cilíndrica (*probe*) de Ti (MS73 microtip; liga Ti- 6Al-4V) com diâmetro de 3 mm, suportando uma potência máxima de 70 W e $20\text{KHz} \pm 500\text{Hz}$ de frequência. Como célula sonoeletrólítica, foi utilizado um reator aletado de 50 mL (Figura 1) (BR 30 2017 003822 0), contendo três vias: uma para o ânodo de sacrifício de Ni, outra para o eletrodo de trabalho (grafite ou Ni) e uma terceira para a retirada de alíquotas e monitoramento da temperatura. A abertura superior foi usada para inserção do *probe*.

Figura 1. Reator sonoeletrólítico. (a) Visão frontal e (b) lateral do reator aletado (BR 30 2017 003822 0).



Fonte: Os autores.

Os eletrodos (0,1 dm de diâmetro; $A=9,43\text{ cm}^2$), foram inseridos nas hastes laterais do reator (distância entre eletrodos: 2,0 cm). Em seguida, o reator foi preenchido com 30 mL de solução 0,2 M de NaCl e 0,5 mmol (77,43 μL) de OE. O *probe* foi imerso 3,0 cm na solução e ficou a 0,5 cm de distância de cada eletrodo.

Os parâmetros eletroquímicos foram: $i = 33\text{ mA}$ e $j = 3,5\text{ mA/cm}^2$ por 48 minutos até o consumo total de 2 F/mol. As reações sonoeletrólíticas utilizaram 7, 14, 21, 28 e 35W (10, 20, 30, 40 e 50%) de potência elétrica, em modo contínuo. O potencial da cela variou entre -1,95 V e -2,31 V em todas as reações.

Após cada reação, a solução foi extraída com éter etílico e os rendimentos determinados por CG, usando um Agilent Technologies 7820A com coluna capilar HP-5 30 m x 0,25 mm x 0,25 μm e detector FID/TCD. As condições operacionais foram: temperatura do injetor de 240 $^{\circ}\text{C}$, temperatura inicial do forno de 60 $^{\circ}\text{C}$ até 220 $^{\circ}\text{C}$ (taxa de 10 $^{\circ}\text{C}/\text{min}$), tempo de injeção de

25 minutos e temperatura do detector de 290 °C. O nitrogênio (pureza 99,999%) foi o gás de arraste. As relações entre os picos cromatográficos e as substâncias foram baseadas na análise do cromatograma dos reagentes.

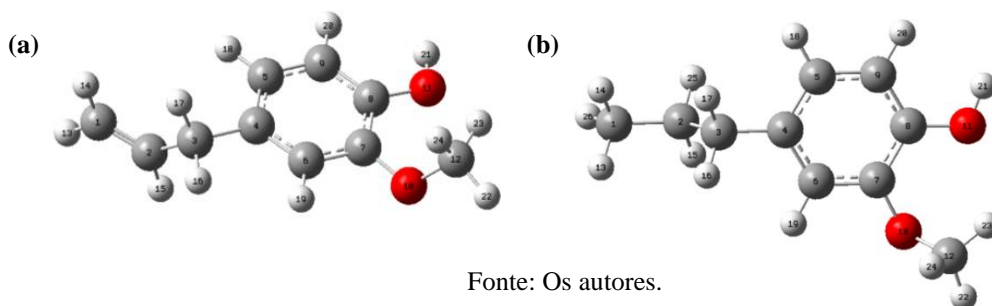
Os espectros de massas dos produtos de hidrogenação e do OE foram obtidos com um espectrômetro de massas com ionização eletrônica Agilent Technologies 5977B GC/MSD single quadrupole, acoplado a um cromatógrafo Agilent Technologies 7890B com coluna capilar HP-5MS 30 m x 0,25 mm x 0,25 µm. As condições operacionais foram: temperatura do injetor de 240 °C, temperatura inicial do forno de 60 °C até 220 °C (taxa de 10 °C/min), tempo de injeção de 30 minutos e gás de arraste hélio 5.0 analítico.

Resultados e Discussão

O OE de cravo-da-india é amplamente conhecido por seu aroma característico e suas propriedades antimicrobianas e analgésicas. Entre os principais compostos presentes nesse óleo, encontra-se o eugenol (**1**) (Figura 2a). Destaca-se como o principal responsável pelo aroma pungente e pelas propriedades terapêuticas [12,13]. A hidrogenação do (**1**) permite a produção de derivados como o dihidroeugenol (**2**), um composto cujas propriedades físicas e químicas são significativamente alteradas, o que amplia o escopo de sua aplicação em diferentes setores industriais.

O estudo teórico iniciou com a otimização geométrica do (**1**) em seu estado fundamental, utilizando a Teoria do Funcional da Densidade (DFT) com o funcional B3LYP implementado no software Gaussian 2009. Para isso, aplicou-se a função de base 6-31++G(d,p), o que permitiu calcular as cargas atômicas utilizando o modelo Natural Population Analysis (NPA).

Figura 2. Estruturas moleculares otimizadas do: (a) Eugenol (**1**) e (b) Dihidroeugenol (**2**).



Fonte: Os autores.

As distâncias de ligação obtidas confirmaram a estrutura molecular do (**1**), com destaque para a ligação C1-C2, que apresentou comprimento de 1,33 Å, característico de uma ligação dupla [9,10]. Além disso, as distâncias de ligação no anel aromático (de C4 a C9), em torno de 1,40 Å, corroboram com a ressonância nessa região molecular e estão de acordo com resultados experimentais obtidos, que apontam 1,39 Å

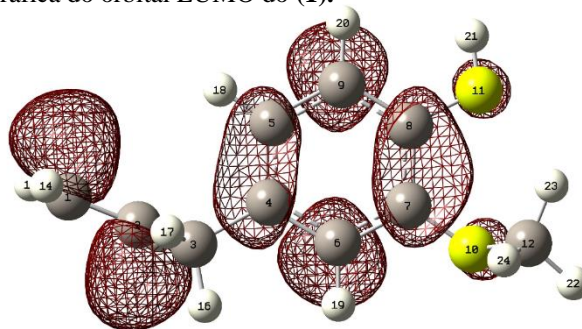
Tabela 1. Distâncias das ligações do (**1**) neutro

Ligação	Distância (Å)	Ligação	Distância (Å)
C1-C2	1.33	C7-C8	1.40
C2-C3	1.51	C8-C9	1.39
C3-C4	1.52	C9-C5	1.39
C4-C5	1.40	C8-O11	1.37
C4-C6	1.40	C7-O10	1.37
C6-C7	1.39	O10-C12	1.43

A HSEC do (**1**), ocorre por meio da entrada de $2e^-$ e $2H^+$, produzindo o (**2**) (Figura 2b). Neste sentido, a representação gráfica do orbital molecular de fronteira LUMO do (**1**) neutro, é

representada na Figura 3.

Figura 3. Representação gráfica do orbital LUMO do (1).



Fonte: Os autores.

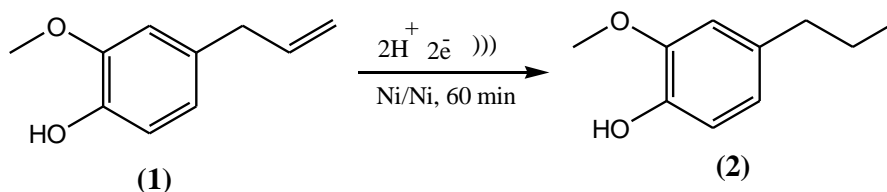
A representação gráfica do orbital molecular de fronteira LUMO do (1), neutro e ainda não ocupado por elétrons, revelou que os orbitais localizados nos átomos C1, C2, C3, C4, C5, C6, C7, C8, C9, O10 e O11 são os principais responsáveis pela formação do LUMO, sendo, portanto, as regiões diretamente envolvidas na reação de redução. Para confirmar essas evidências, foram calculadas as cargas atômicas do (1) tanto em seu estado fundamental quanto em seu estado reduzido (carga -2).

Tabela 2. Cálculo das cargas atômicas NPA para a molécula de eugenol, no estado fundamental e após a redução

Átomo	Estado fundamental	Estado reduzido (-2)	Δ
C1	-0,44	-0,80	0,36
C2	-0,20	-0,44	0,24
C3	-0,49	0,56	
C4	-0,05	-0,85	0,80
C5	-0,22	0,69	
C6	-0,23	-0,16	
C7	0,26	0,12	0,14
C8	0,26	0,16	0,11
C9	-0,30	-0,20	
O10	-0,56	-0,29	
O11	-0,70	-0,40	
C12	-0,29	-0,12	

Os dados da Tabela 2 mostram que a entrada de dois elétrons no (1), aumenta a densidade eletrônica dos átomos C1, C2, C4, C7 e C8. Apesar da maior variação ocorrer em C4, este não deve ser local de entrada de elétrons, pois está localizado no anel aromático, e ocorre uma deslocalização de cargas nesta região, o que justifica essa variação. Portanto, o mecanismo de hidrogenação do (1), envolve a entrada de $2e^-$ nos átomos C1 e C2, seguida da entrada de $2H^+$, produzindo (2) (Figura 3).

Figura 3. Hidrogenação sonoeletrocatalítica do (1)

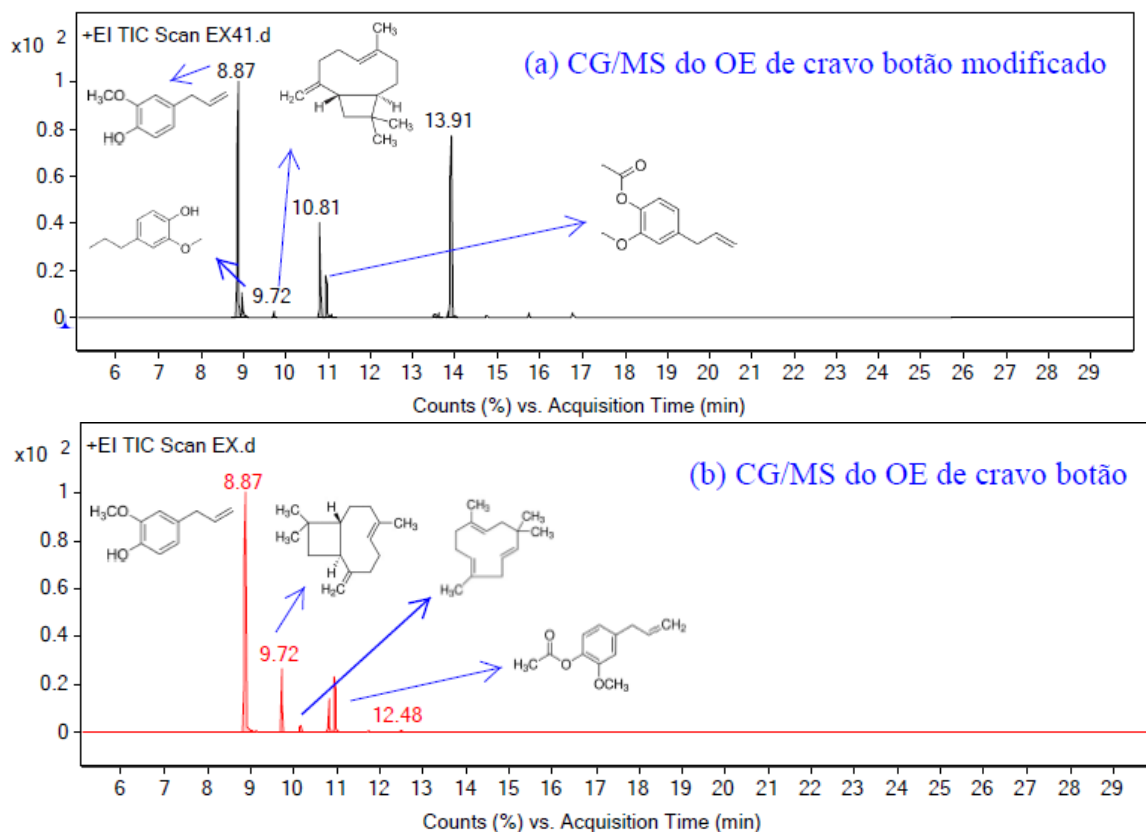


Fonte: Os autores

A comprovação da proposta mecanística foi obtida através da cromatografia gasosa acoplada à espectrometria de massas (GC-MS) do OE, que identificou o (1) como o principal componente, além de outros compostos significativos como β -cariofileno, α -humuleno e

acetato de eugenila (Figura 4b), corroborando dados da literatura [12,13]. A reação de HSEC do OE produziu o (2), como evidenciado pelas análises de GC-MS da Figura 4a, confirmando a eficácia do processo de hidrogenação.

Figura 4. Espectro de massas do OE modificado (a) e do OE *in natura* (b)



Fonte: Os autores

Diante do exposto, o OE foi submetido à HSEC. Os dados da Tabela 3, demonstram que a potência acústica (PA) e a intensidade ultrassônica (IUS) têm um impacto significativo no rendimento, independente da matriz catódica ou do eletrólito utilizado. É importante destacar que a PA se refere à quantidade total de energia acústica transmitida por um transdutor ultrassônico para o meio reacional por unidade de tempo. Embora a PA indique a energia total disponível no processo, ela não considera a distribuição espacial dessa energia no meio. Por outro lado, a IUS é definida como a quantidade de PA por unidade de área perpendicular à direção de propagação da onda ultrassônica, representando a concentração de energia acústica em uma área específica.

A medida que a PA e a IUS aumentam, observa-se um incremento consistente nos rendimentos reacionais (Tabela 3, entradas 1-8). Por exemplo, ao utilizar água do mar e cátodo de grafite, o rendimento aumentou de $15,5 \pm 0,49$ (Tabela 3, entrada 1) para $32,5 \pm 0,59$ (Tabela 3, entrada 7). Um comportamento similar é observado para matriz catódica de níquel em solução de NaCl 0,2M, onde o rendimento aumentou de $15,3 \pm 2,69$ (Tabela 3, entrada 2) para $39,5 \pm 0,02$ (Tabela 3, entrada 8) com os aumentos dessas variáveis.

De fato, IUS desempenha um papel crucial no processo de HSEC, pois está diretamente relacionada à força da cavitação ultrassônica, que envolve a formação e colapso de bolhas em pontos específicos do meio. Regiões com maior intensidade ultrassônica têm maior probabilidade de gerar cavitação, o que aumenta a reatividade química.

Tabela 3. Resultados da HSEC do OE (*in natura*). Condições reacionais: 0,5 mmol de OE, corrente de 33 mA e densidade de corrente de 3,5 mA/cm², US contínuo por 48 minutos

Entrada	Potência elétrica (W)	Potência Acústica (W)	Intensidade ultrasônica (W/m ²)	Cátodo	Eletrólito de suporte	Rendimento de (2) (%) ^a
1	7	2,83	0,86	Grafite*	Água do mar	15,5±0,49
2	7	2,83	0,86	Níquel	NaCl 0,2M	15,3±2,69
3	14	4,13	1,25	Grafite*	Água do mar	22±0,05
4	14	4,13	1,25	Níquel	NaCl 0,2M	22±0,14
5	21	4,98	1,51	Grafite*	Água do mar	26±0,14
6	21	4,98	1,51	Níquel	NaCl 0,2M	27,5±0,59
7	28	6,14	1,86	Grafite*	Água do mar	32,5±0,59
8	28	6,14	1,86	Níquel	NaCl 0,2M	39,5±0,02
9	-----	-----	-----	Pt/C ^b	HClO ₄	0,00

^a rendimento cromatográfico. ^b temperatura de 60°C, *i* = 100mA * Condições reacionais: 0,5 mmol de OE comercial, *i* = 27,3 mA e *j* = 3,5 mA/cm², US contínuo por 60 minutos.

Os resultados indicam que a matriz catódica de níquel apresenta rendimentos superiores em relação à matriz de grafite, especialmente em condições de maior PA e IUS. A maior eficiência do níquel pode ser atribuída à sua maior condutividade elétrica e propriedades eletrocatalíticas, que facilitam a reação eletroquímica na presença de US [11]. Por exemplo, com uma PA de 6,14 W e IUS de 1,86 W/m², o rendimento com níquel atingiu 39,5±0,02% (Tabela 3, entrada 8), enquanto para grafite, nas mesmas condições o rendimento foi de 32,5±0,59 (Tabela 3, entrada 7).

Além disso, o eletrólito de suporte desempenha um papel crucial na eficiência do processo. Comparando os rendimentos obtidos com água do mar e solução de NaCl 0,2M, ambos os eletrólitos mostraram tendências semelhantes de aumento de rendimento com a PA e a IUS (Tabela 3, entradas 1-6). No entanto, a solução de NaCl 0,2M, quando usada em conjunto com níquel, apresentou rendimentos superiores em condições de alta IUS, atingindo quase 40% de conversão (Tabela 3, entrada 8).

O efeito sinérgico entre PA, IUS, matriz catódica e eletrólito de suporte é evidente. À medida que a PA aumenta, a IUS também se eleva, resultando em maiores rendimentos, especialmente para o cátodo de níquel em NaCl 0,2M. Esse comportamento sugere que a eficiência dos processos sonoeletroquímicos é dependente da otimização desses parâmetros, com o níquel, aliado a uma solução de NaCl 0,2M, sob condições de alta IUS, sendo a combinação mais eficiente. Isso provavelmente se deve ao maior transporte de massa e à redução da resistência de polarização em condições otimizadas de cavitação, tornando essa configuração ideal para processos de hidrogenação mais eficientes e sustentáveis.

Por fim, em decorrência do ineditismo do processo de HSEC aqui proposto, não é encontrado na literatura metodologias semelhantes e que trabalhem com derivados de óleos essenciais. Entretanto, destacamos que Dening *et al.* (2024) realizaram a HEC do (1), na presença de eletrodo de Pt/C em meio de HClO₄. Os autores obtiveram rendimentos de hidrogenação de 83,56%, levando a produtos como o 2-metoxi-4-propilfenol, 4-propilciclohexanol, 4-isopropilciclohexanol e 2-metoxi-4-propilciclohexanol. Neste sentido, a reação não se mostrou seletiva para a hidrogenação da ligação C=C do (1) gerando (2) como produto (Tabela 3, entrada 9). Desta forma, o processo de HSEC do OE de cravo-da-índia mostra-se mais seletiva, ambientalmente amigável e de menor custo em relação a outros processos equivalentes descritos na literatura pois utiliza água do mar (ou solução de NaCl) como eletrólito e eletrodos de grafite ou Ni.

Conclusões

O estudo integrado revelou que a hidrogenação do **(1)** pode ser significativamente aprimorada utilizando técnicas sonoelectrocatalíticas, especialmente quando combinadas com uma compreensão teórica detalhada dos mecanismos de reação. A aplicação de US não só aumenta os rendimentos, mas também demonstra um potencial para reduzir os custos energéticos e tornar o processo mais ecológico. Os resultados evidenciam que a escolha da matriz catódica e do eletrólito, juntamente com a otimização da potência acústica e da intensidade ultrassônica, são determinantes para maximizar os rendimentos em processos sonoelectroquímicos. A matriz de níquel, em combinação com o eletrólito de NaCl 0,2M, se mostra a mais eficiente nas condições estudadas, especialmente em altas potências e intensidades. Este trabalho estabelece uma base sólida para futuras aplicações industriais na modificação de compostos orgânicos e destaca a importância de integrar estudos teóricos e experimentais para otimizar processos químicos complexos.

Agradecimentos

Ao Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia de Pernambuco pelo auxílio financeiro ao projeto e pela bolsa de iniciação científica concedida.

Referências

- [1] BIZZO, Humberto R.; HOVELL, Ana Maria C.; REZENDE, Claudia M.. Óleos essenciais no Brasil: aspectos gerais, desenvolvimento e perspectivas. *Química Nova*, [S.L.], v. 32, n. 3, p. 588-594, 2009. FapUNIFESP (SciELO). <http://dx.doi.org/10.1590/s0100-40422009000300005>.
- [2] ARAÚJO, L. X. et al. Synergism of thymol, carvacrol and eugenol in larvae of the cattle tick *Rhipicephalus microplus* and brown dog tick *Rhipicephalus sanguineus*. *Medical & Veterinary Entomology*, v. 30, n. 4, p. 377-382, 2016.
- [3] [20] ZACCHERIA, Federica; RAVASIO, Nicoletta; PSARO, Rinaldo; FUSI, Achille. Heterogeneous selective catalytic hydrogenation of aryl ketones to alcohols without additives. *Tetrahedron Letters*, [S.L.], v. 46, n. 21, p. 3695-3697, maio 2005. Elsevier BV. <http://dx.doi.org/10.1016/j.tetlet.2005.03.159> [21] B.E. Conway, B.V. Tilak, *Electrochim Acta*, 47 (2002) 3571-3594.
- [4] KING, J. W. et al. Hydrogenation of vegetable oils using mixtures of supercritical carbon dioxide and hydrogen. *Journal Of The American Oil Chemists' Society*, v. 78, n. 2, p. 107-113, 2001.
- [5] LESSARD, J. Electrocatalytic Hydrogenation. In: *Encyclopedia of Applied Electrochemistry*. New York: Springer Netherlands, 2014.
- [6] CHATEL, Gregory. Sonochemistry in nanocatalysis: the use of ultrasound from the catalyst synthesis to the catalytic reaction. **Current Opinion In Green And Sustainable Chemistry**, [S.L.], v. 15, p. 1-6, fev. 2019. Elsevier BV. <http://dx.doi.org/10.1016/j.cogsc.2018.07.004>.
- [7] Mason TJ: Sonochemistry and sonoprocessing: the link, the trends and (probably) the future. *Ultrason. Sonochem.* 2003, 10: 175–179
- [8] 29a) PAZ, Josinete Angela da; SALES, Ayrilane; SILVA, Larissa Dias da; SILVA, Émerson Felipe Mendonça da; COSTA, José Angelo Peixoto da; NAVARRO, Marcelo; MENEZES, Frederico Duarte de; VILAR, Márcio. Ultrasound-assisted electrocatalytic hydrogenation in water. *Applied Catalysis A: General*, [S.L.], v. 550, p. 245-255, jan. 2018. Elsevier BV. <http://dx.doi.org/10.1016/j.apcata.2017.11.013>
- [9] SILVA, J. L.; FERREIRA, J. V.; PAVÃO, A. C. ESTUDO TEÓRICO COMPUTACIONAL DO HEXAFLUORETO DE ENXOFRE: UM GÁS DE EFEITO ESTUFA. *HOLOS*, Ano 36, v. 2, e5910, 2020.
- [10] FERREIRA, J. V.; ABREU, F. C.; PAVÃO, A. C. Theoretical Study and the Mechanism for the Berenil Reduction Reaction. *Research & Reviews: Journal of Chemistry*, v. 6, n. 2, p. 10-20, 2017.
- [11] MELO, Sarah Calado Galvão de et al. Ultrasound as a tool for reducing energy consumption in electrocatalytic hydrogenation of aromatic ketones using graphite as catalyst support. *International Journal Of Hydrogen Energy*, [S.L.], v. 45, n. 43, p. 22855-22872, set. 2020. Elsevier BV. <http://dx.doi.org/10.1016/j.ijhydene.2020.06.157>.



- [12] SAADALLAH, Hamza A.; AL-TARJUMAN, Janan K.; SULTAN, Fatimah I. Isolation and identification of phenolic compounds from *Eugenia caryophyllus* and study on its biological effect against *Macrophomina phaseolina*. **Journal of Applied And Natural Science**, [S.L.], v. 15, n. 4, p. 1608-1618, 20 dez. 2023. ANSF Publications. <http://dx.doi.org/10.31018/jans.v15i4.4880>.
- [13] MATOS, Luana Ferreira; BARBOSA, Douglas Rafael e Silva; LIMA, Emanuel da Cruz; DUTRA, Kamilla de Andrade; NAVARRO, Daniela Maria do Amaral Ferraz; ALVES, Jéssica Lafaiete Ribeiro; SILVA, Gutierrez Nelson. Chemical composition and insecticidal effect of essential oils from *Illicium verum* and *Eugenia caryophyllus* on *Callosobruchus maculatus* in cowpea. **Industrial Crops And Products**, [S.L.], v. 145, p. 112088, mar. 2020. Elsevier BV. <http://dx.doi.org/10.1016/j.indcrop.2020.112088>.
- [14] DENING, Wei; HONGBIAO, Tang; GAIXIU, Yang; JUNTAO, Yang; NING, Li; GUANYI, Chen; CHUNXIANG, Chen; ZHIJIE, Feng. Electrocatalyst hydrogenation of lignol-derived compounds: conversion regularity and product selectivity. **Journal Of Fuel Chemistry And Technology**, [S.L.], v. 52, n. 5, p. 677-686, maio 2024. Elsevier BV. [http://dx.doi.org/10.1016/s1872-5813\(23\)60405-0](http://dx.doi.org/10.1016/s1872-5813(23)60405-0).