Caracterização espectroscópica de [M]-CAL-2: uso de NO como molécula-sonda.

Gesley, A. V. Martins (PG)[1] Mathias Strauss (PG)[2], Gloria Berlier (PQ)[1], Salvatore Coluccia (PQ)[1], Leonardo Marchese (PQ)[3] e Heloise O. Pastore (PQ)[2]

[1]Dipartimento di Chimica Inorganica, Fisica e dei Materiali, Università di Torino, Via P. Giuria 7, 10125 Turin, Italy.
[2]Instituto de Química, Universidade Estadual de Campinas, Campinas-SP Brasil, CP 6154, CEP 13084-971, e-mail: gpmmm@iqm.unicamp.br
[3]Dista e Centro Interdisciplinare Nanoscienze e Sviluppo Tecnologico di Materiali Innovativi (Nano-Sistemi,) Universitá del Piemonte Orientate "Amedeo Avogadro" (UPO), via Bellini, 25/G – CEP 15100, Alessandria, Italy.

Palavras Chave: Espectroscopia no infravermelho, CAL-2, NO, MeAPSO-34.

Introdução

Materiais microporosos contendo metais de transição em sua estrutura possuem uma grande importância no âmbito da catálise heterogênea.[1]

Uma das mais importantes ferramentas na caracterização de materiais microporosos é a espectroscopia na região do infravermelho. Neste trabalho discutiremos os resultados espectroscópicos da interação de NO com sítios ativos de metais de transição (Mn, Co e Fe), na [M]-CAL-2, que são materiais microporosos do tipo MeAPSO-34.[2]

Resultados e Discussão

A Figura 1 mostra os espectros obtidos na região ν(NO) de uma amostra calcinada e sucessivamente reduzida sob H_2. Nos primeiros minutos após a adição de NO, se observa preferencialmente a formação de N_2O (produto de redução do NO), uma banda larga devido ao NO^+ com baixa intensidade[1] e um pico estreito devido à formação Mn^{2+} mononitrosílico. Com o tempo, o sinal devido à formação de N_2O se mantém estável, a banda larga devido ao NO^+ se intensifica e o pico relativo à espécie mononitrosílica diminui de intensidade. Além de indicar a acessibilidade e dispersão dos íons de Mn^{2+}, estes resultados também a indicam reatividade catalítica na redução de NO à N_2O.

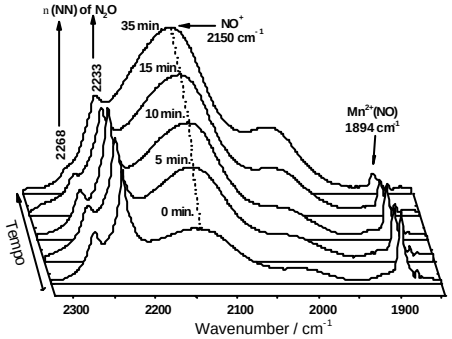

Figura 1. Espectro IR ν(NO): 20 torr de NO na [Mn]-CAL-2 reduzida; efeito do tempo.

A Figura 2 mostra o espectro à temperatura ambiente (em vermelho) da [Co]-CAL-2 sob 20 torr de NO. Ele apresenta picos estreitos que são atribuídos à dinitrosilas de Co^{2+} estrutural e em defeitos. Com o resfriamento da amostra, outros sinais aparecem. Em baixa temperatura (em azul) se observa a presença de dímeros, produtos de oxidação (NO_3^- e NO_2^-) e redução (N_2) do gás NO.

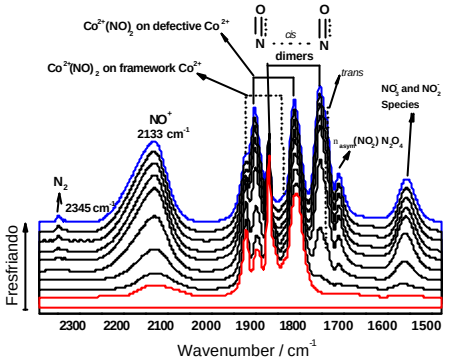

Figura 2. Espectro IR ν(NO): 20 torr de NO na [Co]-CAL-2 reduzida; efeito do temperatura.

Estes resultados também sugerem a alta reatividade da [Co]-CAL-2. Foram realizados outros experimentos com a [Fe]-CAL-2 e da mesma maneira foi verificado que os sítios catalíticos são acessíveis, dispersos e reativos.

Conclusões

Conclui-se que as [M]-CAL-2 apresentam sítios catalíticos acessíveis, dispersos e reativos no disproporcionamento do NO. A amostra de [Co]-CAL-2 resultados relativos a formação de N_2 na presença de NO e portanto interessante na redução catalítica de NO a N_2.

Agradecimentos

Os autores agradecem à Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior (CAPES) e à Associação para o Desenvolvimento Científico de Piemonte-Itália (ASP) pelas bolsas concedidas (MS e GAVM respectivamente).

[1] Hadjiivanov, K.; Penkova, A.; Daturi, M.; Saussey, J. e Lavalleyurtis, J-C. *Chem. Phys. Lett.* **2003,** *377*, 642.

[2] Strauss, M.; Martins, G.A.V.; Collucia, S.; Marchese, L.; Scarpa, A.; Pirone, R.; Pastore, H.O.; *CD de Anais do 14° CBCat*, **2007**.