

Modelagem Computacional da Redução de NOx em Catalisador de Fe₂O₃/ZrO₂

*Vanessa Castro de Souza¹ (IC), Polena do Nascimento Peixoto¹ (IC), Sidney Ramos de Santana¹ (PQ), Regiane de C. M. U. de Araújo¹ (PQ)

¹Departamento de Química, CCEN, Universidade Federal da Paraíba, João Pessoa-PB.

*leessa Castro @hotmail.com

Palavras Chave: PM6, Catálise Heterogênea, Fe₂O₃, ZrO₂.

Introdução

O NO_x é uma mistura gasosa contendo 95% de NO e 5% de NO₂, liberada pela combustão nos automóveis, que reage na atmosfera, sendo um dos precursores da chuva ácida, da formação de neblinas, do aquecimento global e do enfraquecimento da camada de ozônio.

Temos como objetivo o estudo de um material cerâmico, baseado num óxido metálico, utilizado em um dispositivo chamado conversor catalítico que é acoplado no cano de escape dos automóveis. Esse conversor tem como função reduzir o NO_x para N₂ visando solucionar problemas ambientais. Essa reação é realizada por meio de catálise heterogênea, onde teremos a representação de um sólido e um gás, utilizando cálculos teóricos.

Resultados e Discussão

Os modelos em estudo foram criados baseando-se em superfícies geradas a partir da estrutura cristalográfica do Fe₂O₃ e do ZrO₂ obtidas no banco de dados de estruturas inorgânicas ICSD[2].

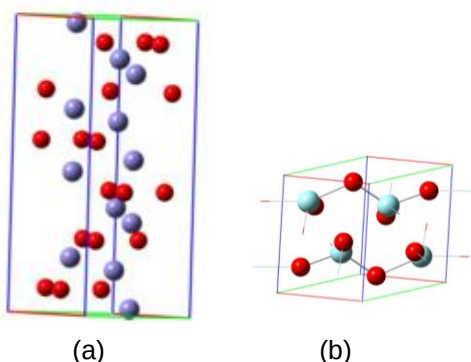
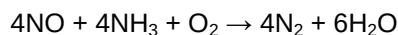


Figura 1: Célula unitária (a) da estrutura do ICSD No 88148 do Fe₂O₃ e (b) No 157617 do ZrO₂.

Iniciamos o mecanismo proposto para reação de redução do NO_x para N₂ como mostrado no artigo de Jug e colaboradores[5] que emprega o agregado V₂O₇H₄Ti₃₃O₆₆(H₂O)₁₇ segundo a reação abaixo:



Foram realizados cálculos de otimização das geometrias para a reação de adsorção do NH₃ sobre a superfície Fe₂O₃ no plano (001) e ZrO₂ no plano (100).

Na Tabela 1, vemos os valores de energia de adsorção do NH₃ para os sistemas estudados em comparação com o agregado V₂O₇H₄Ti₃₃O₆₆(H₂O)₁₇.

Estruturas	Energias de adsorção
Fe ₂ O ₃	- 121 KJ/mol
ZrO ₂	-217,2 KJ/mol
V ₂ O ₇ H ₄ Ti ₃₃ O ₆₆ (H ₂ O) ₁₇	-128,65 KJ/mol

Tabela 1. Comparação entre a energia de adsorção do NH₃ na superfície 3x3x1 Fe₂O₃, 1x4x3 ZrO₂ e no agregado V₂O₇H₄Ti₃₃O₆₆(H₂O)₁₇

Podemos observar que o nosso resultado para superfície Fe₂O₃ é consistente por ser muito próximo do resultado da literatura científica, além de possuir a mesma ordem de grandeza. Para a superfície ZrO₂ temos um resultado menor de energia de adsorção, que nos mostra que a superfície é mais estável do que a do modelo proposto por Jug e colaboradores[5], assim, esta superfície apresenta-se como um bom candidato para o estudo da reação.

Conclusões

A superfície de Fe₂O₃ estudada apresenta resultados comparáveis com outros modelos da literatura para a adsorção de NH₃. Já a superfície ZrO₂ fornece uma energia menor, mostrando-se mais estável e com isso é considerada um bom candidato para o estudo da reação proposta.

Isto nos indica que as superfícies são favoráveis para prosseguirmos com as próximas etapas da reação de redução de NO_x com N₂.

Agradecimentos

CNPQ, CAPES, FAPESQ/PB, UFPB

¹<http://www.epa.gov/acidrain/what/index.html> (acessado em 10/05/09)

² http://icsdweb.fiz_karlsruhe.de. (acessado em 10/05/09).

³Stewart, J. J. P., J. Mol. Model. 14 (2008) 499-535.

⁴ <http://www.openmopac.net> (acesso em 10/05/09)

⁵K. Jug, T. Homann, and T. Bredow, J. Phys. Chem. A 108 (2004) 2966-2971.

⁶ Orita et al., Appl Cat.A: General 258 (2004) 115-120.