

Estudo comparativo da formação de ozônio pela combustão de álcool e gasolina: Simulação dos mecanismos de reação

Ricardo Ramos Wanderley¹(IC), Graciela Arvilla de Klachquin^{2*}(PQ)

*gracielaiq@gmail.com

¹Escola de Química, UFRJ, Avenida Athos da Silveira Ramos, 149, Bloco A, 408, 4ª andar, CEP 21941-909, Cidade Universitária, Rio de Janeiro, RJ, Brasil

²Instituto de Química, UFRJ, Avenida Athos da Silveira Ramos, 149, Bloco A, 408, 4ª andar, CEP 21941-909, Cidade Universitária, Rio de Janeiro, RJ, Brasil

Palavras Chave: combustão, formação de ozônio, gasolina, etanol, mecanismos

Introdução

Os compostos orgânicos emitidos nos processos de combustão dos motores podem reagir na atmosfera com radicais OH, na presença de luz, oxigênio e óxidos de nitrogênio, formando ozônio, compostos carbonílicos e outros compostos orgânicos.

O objetivo deste trabalho é construir um modelo químico para reproduzir e explicar os dados experimentais de literatura para a combustão de etanol e gasool¹. Nesse trabalho, os autores encontraram que o gasool reage mais rapidamente que o álcool, mas que após um determinado tempo a velocidade de produção de ozônio pelo etanol é muito maior. Esses resultados permanecem ainda sem uma explicação mecanística. O trabalho experimental foi realizado em Salvador, BA, numa câmara de reação.

A formação de produtos e a evolução das concentrações na câmara de reação foi simulada teoricamente utilizando um modelo fotoquímico de reação baseado no modelo SAPRAC desenvolvido por Carter². Às equações diferenciais resultantes do mecanismo, foram resolvidas usando o programa de integração numérica de reações atmosféricas OZIPR, desenvolvido por Gery e Crouse³.

Para a simulação das reações do álcool puro foi considerado apenas uma mistura de ar puro, óxidos de nitrogênio e etanol. No caso do gasool foram consideradas diversas formulações de gasolina, conforme informações do CENPES (Petrobras).

Resultados e Discussão

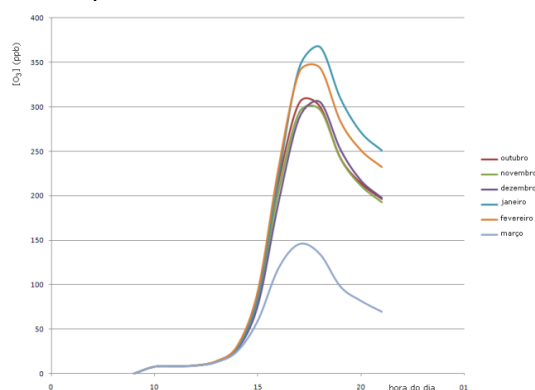
As simulações foram realizadas usando diversas condições iniciais e de contorno compatíveis com as condições atmosféricas e dos experimentos: concentrações de óxidos de nitrogênio (NOx) no intervalo 300-700 ppb, radiação solar correspondente aos meses outubro a março em Salvador (BA), e diferentes horários de início e realização do experimento ao longo do dia.

No caso do etanol, a concentração máxima de ozônio foi obtida no mês de janeiro (Figura 1) para concentrações iniciais de NOx de 300 ppb.

Para o mês de novembro, com 300 ppb de NOx iniciais, a máxima concentração de ozônio foi de 700 ppb, aproximadamente sete horas após o início

do experimento. Usando essas condições foram simuladas diversas misturas gasolina-etanol (entre 0 e 100% de etanol) e onze formulações de gasolinas, com diferentes teores de compostos aromáticos e alquenos. Para todas as gasolinas o máximo de ozônio foi obtido entre duas e três horas após o início do experimento, com valores entre 900 e 1000 ppb aproximadamente.

Figura 1. Simulação da formação de ozônio para uma mistura etanol-ar-300 ppb de NOx em diferentes épocas do ano.



Conclusões

Os resultados deste trabalho mostram que efetivamente a gasolina reage mais rapidamente na atmosfera que o etanol, levando a formação de ozônio. Contudo, nas condições destas simulações os máximos para a gasolina são maiores que para o etanol, resultado que não concorda com os dados experimentais. Outras simulações deverão ser realizadas mudando as condições iniciais e detalhes do mecanismo.

Agradecimentos

FAPERJ, CNPq, PGQu

¹ Pereira, P. A. de P., Santos, L. M. B., Sousa, E. T., de Andrade, J. B. J. *Braz. Chem. Soc.*, **2004**, *15*, 646-651.

² Carter, W. P. L. 1990. *Atmospheric Environment*, **1990**, *24A*, 481-518. Atualizações disponíveis em: <http://www.cert.ucr.edu/~carter/SAPRC/> (última atualização 15-01-2010).

³ Gery, M. W., Crouse, R. R. User's guide for executing OZIPR, US Environmental Protection Agency, Research Triangle Park, NC. **1990**. Disponível em: <http://www.epa.gov/scram001/userg/other/ozipr.pdf>.