

Modelagem Computacional da Redução de NO em Catalisadores de Ga₂O₃-In₂O₃

*Vanessa Castro de Souza¹ (IC), Polena do Nascimento Peixoto¹ (IC), Maria José Gomes de Araújo¹(IC), Kelson Carvalho Lope¹ (PQ), Sidney Ramos de Santana¹ (PQ), Regiane de C. M. U. de Araújo¹ (PQ)

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

*lelessa Castro @hotmail.com

Palavras chaves: Adsorção, In₂O₃, PM6

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, utilizando cálculos teóricos.

Resultados e Discussão

Os modelos em estudo foram criados baseando-se em superfícies geradas a partir da estrutura cristalográfica do In₂O₃ e do In₂O₃ dopada com Gálio, obtidas no banco de dados de estruturas inorgânicas ICSD[2].

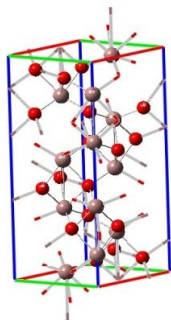


Figura 1: Célula unitária de In₂O₃.

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 propeno sobre a superfície do In₂O₃, bem como para a estrutura de In₂O₃ dopada com Gálio, visando analisar o efeito do dopante na estrutura.

Estruturas	Energias de adsorção
In ₂ O ₃	-30.28589 KJ/mol
In ₂ O ₃ dopada com Gálio	-7.22384 KJ/mol

Tabela 1. Comparação entre a energia de adsorção do propeno na superfície 3x4x1 In₂O₃, 3x4x1 In₂O₃ dopada com Gálio.

Verificamos que a energia de adsorção do propeno na superfície dopada com Gálio foi maior que na superfície sem dopante. Dessa forma temos que o gálio não é um bom dopante, já que a função do dopante é minimizar a energia de adsorção.

Daremos continuidade aos cálculos para a adsorção do propeno na superfície de In₂O₃, porém variando as condições de trabalho (temperatura) de modo a melhorar a energia de adsorção, pois a superfície mostrou-se um candidato favorável para a reação de redução do NO_x em N₂.

Conclusões

Ao adicionarmos o propeno, conseguimos um resultado aceitável para a energia de adsorção, quando baseado com os valores do artigo de Jug e colaboradores, porém, daremos continuidade para os cálculos variando alguns parâmetros, com o intuito de melhorar a energia de adsorção.

Ainda não podemos falar sobre a eficiência da reação na superfície, pois, não foi possível concluir a reação.

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).

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

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

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