

Para responder las siguientes preguntas es necesario leer el artículo asignado y consultar el texto para obtener más información.

Artículo asignado

<http://pubs.acs.org/cen>

Wilson, Elizabeth, "Bridging Chemistry and Engineering", *Chemical and Engineering News*, abril 26, 1999, pág. 24.

Concentrado sobre los modelos de Schneider para la combustión y oxidación catalítica al final del artículo.

1. Los componentes principales del sistema de Schneider ofrecen dos pasos en los cuales es atrapado el NO. ¿Cuáles son los productos y la catálisis en cada paso?
2. ¿Cuáles compuestos en el combustible ocasionan la ruptura del sistema mencionado y por qué?
3. Proponga una estructura para el estado de transición que involucra al SO₂ y la superficie del catalizador.
4. ¿El sistema de Schneider se basa en la catálisis homogénea o heterogénea?
5. ¿Cómo difiere la ΔE (diferencia entre las energías de activación para las reacciones directa e inversa) en la oxidación no catalizada de NO a NO₂ de la reacción catalizada?

William F. Schneider, un investigador del Ford Research Laboratory, en Dearborn, Michigan, diseña modelos sobre comportamiento catalítico. Ya ha tenido éxito en diseñar un modelo de las zeolitas de cobre para reducir las emisiones de óxido de nitrógeno (NO_x). Ahora él y sus colaboradores enfrentan otro difícil problema: intentan entender la química de materiales usados temporalmente para atrapar el NO_x para una posterior reducción.

Esas trampas de NO_x están hechas de dos componentes: un catalizador de metal noble que oxida el NO a NO₂, y un extractor de óxido de bario que reacciona con el NO₂ y el O₂ adicional para formar un nitrato de bario. La trampa se purga periódicamente al invertir la reacción y liberar el NO para reducirlo más tarde. Pero este sistema se rompe en presencia de azufre. Durante la combustión y oxidación catalítica, cualquier azufre en la gasolina o combustible diesel se convierte en SO₂ y SO₃. El óxido de bario tiene alta afinidad por esas especies de azufre y su formación finalmente atasca la trampa.

Ya que el óxido metálico es una estructura extendida, y no una molécula discreta, Schneider y sus colaboradores emplean dos criterios para simplificar la simulación de un gran trozo de materia.

Tomado con licencia de *Chemical & Engineering News*, abril 26, 1999, 77 (17),

págs. 24-32. © 1999 American Chemical Society.