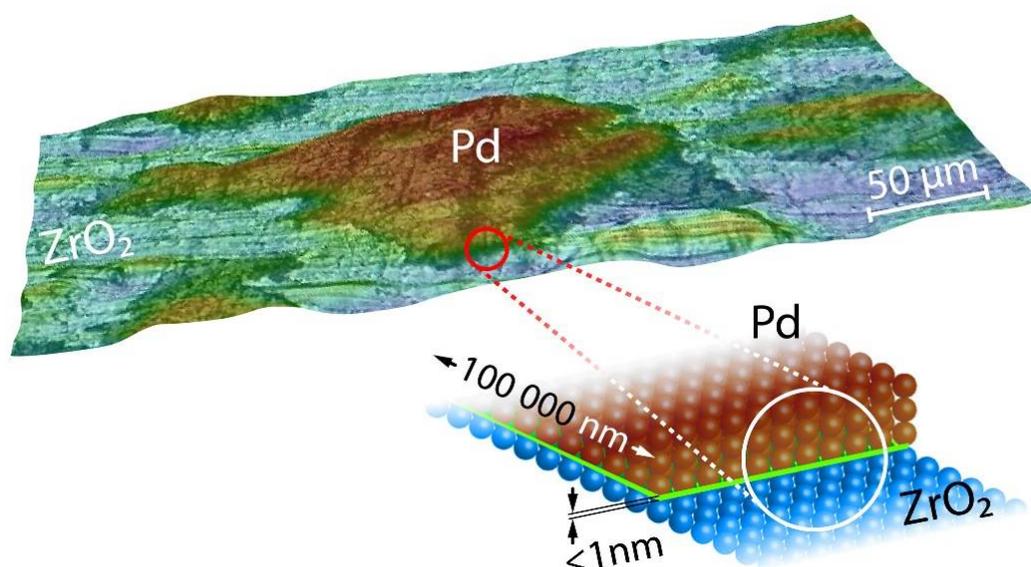


Cómo reducir el monóxido de carbono de los vehículos

Investigadores de las universidades de Barcelona y la Técnica de Viena han descubierto un efecto químico que aumenta la efectividad de los convertidores catalíticos de los automóviles. De esta forma se pueden reducir sus emisiones de monóxido de carbono.

SINC

30/5/2018 13:03 CEST



Los procesos químicos que tienen lugar en las partículas de paladio cambian de manera significativa cuando se ponen sobre soportes de óxido, aunque estos no sean activos en la reacción química. / UB

Un equipo de investigadores de la Universidad de Barcelona (UB) y de la Universidad Técnica de Viena (TU Wien, Austria) ha encontrado un efecto catalizador que puede hacer más efectivos los convertidores catalíticos de los vehículos y reducir así las emisiones de monóxido de carbono (CO).

Los resultados de la investigación, publicados recientemente en *Nature Materials*, se han obtenido a partir de los experimentos que ha llevado a cabo el grupo del profesor Günther Rupprechter de TU Wien, y que se han interpretado utilizando los modelos computacionales creados por el grupo que lidera el profesor Konstantin Neyman, investigador ICREA del Instituto de

Química Teórica y Computacional de la Universidad de Barcelona (IQTUB).

Se ha comprobado que el soporte modifica las propiedades de las partículas de metal que llevan los catalizadores

Para modificar los gases de escape, los catalizadores que se utilizan en los automóviles emplean partículas microcristalinas de paladio. En sus experimentos, el equipo ha constatado que los procesos químicos que tienen lugar en dichas partículas cambian de forma significativa cuando estas se colocan sobre soportes de óxido, aunque estos no sean activos en la reacción química. Estos resultados contradicen lo que hasta ahora se pensaba sobre el funcionamiento de este tipo de catálisis.

Del mismo modo que el sabor de la cobertura de un pastel de chocolate no debería depender de si se ha servido en un plato de porcelana o de plata, en las reacciones químicas en la superficie de grandes partículas de metal, el sustrato o soporte no debería tener un papel crucial. Las partículas catalíticas suelen tener un diámetro de miles de átomos, y hasta ahora se creía que el soporte sobre el que se encuentran no afectaba a las reacciones químicas situadas lejos de la superficie de contacto o interfaz.

Intoxicación por monóxido de carbono tóxico

En los vehículos con motor de combustión, el monóxido de carbono (CO) se convierte en dióxido de carbono (CO₂) gracias a los catalizadores que contienen paladio o platino. En este proceso, la superficie de las partículas del catalizador se cubre con átomos de oxígeno, por lo que las moléculas de CO reaccionan y se transforman en CO₂, dejando lugares vacíos en la capa de oxígeno. Estos lugares deben llenarse rápidamente con otros átomos de oxígeno para que la catálisis se mantenga.

Sin embargo, esto no ocurre cuando son las moléculas de CO (en lugar de las de oxígeno) las que llenan los vacíos. Si eso sucede a gran escala, la superficie del catalizador queda cubierta por una capa de CO y no por una capa de oxígeno, y por tanto, ya no se puede formar CO₂. "Podríamos decir

que el estado del catalizador se ha desactivado o que ha quedado 'intoxicado' por el monóxido de carbono", aclara el profesor Neyman.

Los experimentos se han realizado en Viena pero los modelos computacionales se han creado en Barcelona

Esta situación se da en función de la concentración de CO en el gas de escape suministrado al catalizador. Sin embargo, los experimentos muestran que el material donde se colocan las partículas de paladio es crucial. "Si las partículas de paladio se ponen en una superficie de óxido de circonio o de magnesio, esta intoxicación del catalizador se produce en concentraciones de carbono mucho más altas", señala el profesor Yuri Suchorski, primer autor del artículo.

La pregunta es por qué la naturaleza del soporte debería afectar a las reacciones químicas que tienen lugar en la superficie de toda la partícula de paladio y por qué la interfaz entre esta y el soporte influye en el comportamiento de las partículas, mil veces más grandes. Estas dudas se pudieron resolver con los experimentos y modelos computacionales del estudio.

Mediante un microscopio electrónico especial de fotoemisiones, los investigadores controlaron en tiempo real la propagación espacial de una reacción química. De este modo vieron que el envenenamiento con monóxido de carbono siempre comienza en el extremo de la partícula que está en contacto con el soporte. A partir de aquí, la intoxicación de monóxido de carbono se extiende como la onda de un tsunami por toda la partícula.

El monóxido de carbono actúa en el borde de la partícula

Esta intoxicación comienza en la punta precisamente por razones geométricas: los átomos de oxígeno en el borde de la partícula tienen menos átomos de oxígeno cerca que los que se sitúan en el interior del catalizador.

Un microscopio electrónico e fotoemisiones ha

permitido controlar la propagación espacial de la reacción química en tiempo real

Cuando se abren los vacíos, una molécula de CO puede llenarlos más fácilmente en el borde de la partícula que si lo hace en los huecos abiertos en el medio, donde el CO podría reaccionar fácilmente con otros átomos de oxígeno. Por otra parte, estos no pueden llenar los vacíos del borde fácilmente dado que van en pareja, como moléculas de O₂: para colocarse en los huecos, el O₂ necesita dos lugares libres, uno junto al otro.

Por tanto, la línea límite donde la partícula de paladio entra en contacto directo con el soporte es fundamental: el soporte modifica las propiedades de la partícula de metal. "Según nuestros cálculos, los enlaces entre los átomos de metal de la partícula y los de la capa de oxígeno que se ha absorbido se refuerzan en el borde del soporte", afirma el profesor Neyman, y concluye que los átomos de paladio en contacto con el soporte de óxido pueden unirse con más fuerza a los átomos de oxígeno.

Se podría pensar que esto es irrelevante para los lugares alejados del borde de la partícula, porque el soporte solo influye en los átomos de los extremos, que además son pocos comparados con el total de átomos de la partícula de paladio. Sin embargo, como el monóxido de carbono comienza la intoxicación en el borde, este efecto es crucial. El borde de óxido metálico es el punto débil de la partícula, y si se refuerza, la partícula del catalizador se protege de la intoxicación de CO.

Referencia bibliográfica:

Y. Suchorski, S. M. Kozlov, I. Beshpalov, M. Datler, D. Vogel, Z. Budinska, K. M. Neyman y G. Rupprechter. "The role of metal/oxide interfaces for long-range metal particle activation during CO oxidation", *Nature Materials* 17 (2018), Mayo de 2018. Doi: 10.1038/s41563-018-0080-y. <https://www.nature.com/articles/s41563-018-0080-y>

Derechos: **Creative Commons**

TAGS

MONÓXIDO DE CARBONO | COCHES | CATALIZADORES |

Creative Commons 4.0

Puedes copiar, difundir y transformar los contenidos de SINC. [Lee las condiciones de nuestra licencia](#)