

Interacción metal-Ceria y su actividad catalítica. Una perspectiva teórica



Sala de conferencias.
Dpto. Física-UNS.



Jueves 09/11. 16hs.



Dra. M. Verónica Ganduglia-Pirovano

Instituto de Catálisis y Petroleoquímica-CSIC
Madrid, España

2017

09/11

Ceria (CeO_2) es uno de los más importantes óxidos de los elementos de tierras raras con usos en la catálisis industrial debido a sus condiciones de reducibilidad. La complejidad de los catalizadores en polvo reales dificulta en entendimiento básico de como es su comportamiento. Una forma de revelar este comportamiento es mediante la preparación de catalizadores modelo o modelos teóricos. En esta charla se presentaran resultados recientes de catalizadores modelo Ni, Co y Cu soportados sobre ceria como ejemplos de la catálisis del reformado en seco de metano (DRM: $\text{CH}_4 + \text{CO}_2 \rightarrow 2\text{H}_2 + 2\text{CO}$). Además, el sistema Ni/ceria se considerará para la producción de hidrógeno. El enfoque teórico se orienta a escribir a ceria como material soporte. La habilidad de ceria para estabilizar especies oxidadas (MO_x : Co^{2+} y Ni^{2+}) sobre superficies estequiométricas de CeO_2 mediante una relocalización de estados f y estados metálicos (MO : CoO , NiO) sobre el soporte reducido, CeO_{2-x} , resulta esencial para la actividad catalítica en la reacción DRM.

La disociación de metano ($\text{CH}_4 \rightarrow \text{CH}_3 \rightarrow \text{CH}_2 \rightarrow \text{CH} \rightarrow \text{C}$) ocurre a temperatura ambiente sobre MO_x/CeO_2 , mientras que la disociación de CO_2 ocurre sobre centros metálicos $\text{MO}/\text{CeO}_{2-x}$ en vacancias de oxígeno formadas a altas temperaturas ($\text{C} + \text{O}_{\text{surf}} \rightarrow \text{CO}^{\text{gas}} + \text{Vac}$). El sistema Co/ceria es el más activo con una barrera para la disociación de metano que se torna despreciable en la medida que la transformación $\text{MO}_x/\text{CeO}_2 \rightarrow \text{MO}/\text{CeO}_{2-x}$ se desarrolla con el incremento de la temperatura.

