

# INTERACCION A LARGA DISTANCIA ENTRE UNA MOLECULA POLAR Y UN CATALIZADOR

DEL GUZMAN M.

Subdirección de Investigación  
Básica de Procesos  
del IMP

RUBEN BARRERA

Instituto de Física,  
UNAM

*A partir de un modelo sencillo y con base al método de imágenes, así como en la expresión para la energía de interacción entre dos dipolos, se calculó la energía de interacción electrostática a larga distancia para una molécula de un reactante polar en presencia de un catalizador, ambos sumergidos en un medio homogéneo. A través de la expresión que obtuvimos para esta energía estudiamos algunos casos como ejemplos del uso de ella, y asimismo, determinamos la influencia del soporte en la interacción.*

## I INTRODUCCION

En un proceso catalítico normalmente están presentes los reactantes, el componente activo y el soporte. Llegar a entender por qué y cómo es que estos tres elementos se combinan para obtener de ellos los productos, tendría como consecuencia inmediata una mayor efectividad y variedad desde los puntos de vista industrial y académico.

En forma general un proceso catalítico puede visualizarse a través de las siguientes etapas<sup>1</sup>:

1. La difusión de los reactantes hacia la superficie externa del catalizador.
2. La difusión de éstos en los poros.
3. La adsorción de las moléculas en la superficie de los catalizadores.
4. La reacción en sí de las moléculas de los reactantes para la generación de los productos.
5. La desorción de éstos últimos.
6. La difusión de los productos; y
7. La difusión externa de los productos hacia el fluido de los alrededores.

Como puede observarse de esta descripción general encontrar la respuesta al problema no es fácil, debido a que están involucradas muchas variables, sin tomar en cuenta que todavía queda la total caracterización del catalizador mismo.

Con base a esto, lo usual es tratar de estudiar los procesos catalíticos usando una de las etapas en que se ha dividido esta transformación, ya que se ha encontrado que para fines prácticos puede tomarse como la que controla el proceso. En nuestro caso, pensamos que es más conveniente estudiar cada una de las partes por separado.

Cuando una molécula, o un ion, de los reactantes está en presencia de un catalizador<sup>1</sup> y emigra hacia él, lo hace porque existen fuerzas que lo atraen, y la intensidad con que se siente atraída la molécula o ion, puede cuantificarse a través de las energías de interacción, dentro de la etapa de adsorción. Si la interacción es a larga distancia, con respecto a las dimensiones microscópicas de los componentes de los reactantes, las fuerzas que están presentes son de carácter físico y definen a la fisisorción (adsorción física). Cuando las fuerzas son de índole

química, definen a la quimisorción.

En la adsorción física, las fuerzas que están presentes son: las de corto alcance, son repulsivas, las fuerzas de dispersión de naturaleza atractiva y las fuerzas electrostáticas. Estas últimas aparecen si las moléculas de los reactantes poseen un dipolo permanente, o si el componente activo es iónico o metálico; en el caso en que el dipolo de la molécula sea grande, las fuerzas electrostáticas serán las más importantes<sup>2</sup>.

En este artículo se presenta un estudio que queda comprendido dentro del terreno de la adsorción física: se calcula la parte electrostática de la energía de interacción para una molécula con dipolo permanente en presencia de un catalizador. En el caso del ion, esta parte de la energía se calcula a través del potencial imagen<sup>3</sup>. Cuando se trata de una molécula polar que está presente ante un catalizador, podemos pensar como si estuviera sumergida en un medio tridieléctrico local con interfaces planas, y a partir de esta simplificación en la sección II realizamos el cálculo de la magnitud y posición de las imágenes dipolares que genera el dipolo real, utilizando el método de imágenes. En la sección III encontramos la expresión para la energía de interacción electrostática de la molécula polar, a partir del cálculo de la energía de interacción entre dos dipolos y tomando dichas energías como aditivas. En la sección IV exponemos algunos ejemplos de aplicaciones de la fórmula para la energía de interacción que obtuvimos en la tercera sección; elegimos sistemas en donde están involucrados como soporte la alúmina, como componente activo un metal y un óxido metálico, y como el medio que rodea al catalizador, el vacío y un líquido. En la sección V presentamos conclusiones de nuestro estudio.

## II DETERMINACION DE LAS MAGNITUDES Y POSICIONES DE LOS DIPOLOS IMAGENES

Cuando los reactantes se encuentran delante del catalizador, las fuerzas de interacción que están presentes son de diversas clases y provienen de diferentes partes. Realizar cualquier cálculo afín bajo estas condiciones es más que imposible. De esta limitante surge la necesidad de tratar de encontrar simplificaciones que permitan llevar a cabo la evaluación buscada.

El modelo que introduciremos para llevar a cabo nuestros cálculos es el siguiente:

Consideraremos que el componente activo está depositado en la superficie del soporte formando una capa que la cubre completamente; también estimaremos que las dimensiones del catalizador son grandes comparadas con el tamaño de la molécula del reactante; además, el medio en el cual está el catalizador y la molécula lo dividiremos en tres regiones, donde cada una de ellas posee su propia constante dieléctrica local. Con esto, estamos simulando el sistema formado por el catalizador y el medio donde está colocada la molécula polar.

Para clarificar el modelo vamos a suponer que las interfaces entre las regiones son planas y suficientemente grandes, para no tener problemas de bordes. La molécula posee un dipolo eléctrico permanente  $\vec{P}$  y de magnitud igual a  $p$ . El grueso de la región de enmedio es igual a  $L$ . Lo anterior se esquematiza en la figura 1, donde además se muestra geometría de nuestro problema y la localización del sistema de referencia utilizado; asimismo, hemos colocado la molécula sobre el eje  $Z$ , sin perder la generalidad del tratamiento, además se simplifican nuestros cálculos, debido a que en estas circunstancias el sistema presenta una simetría azimutal.

Por último, el medio está dividido en tres regiones, las que tomándolas de izquierda a derecha están descritas por  $\epsilon_1$ ,  $\epsilon_2$  y  $\epsilon_3$ , que son las constantes dieléctricas locales respectivas; la molécula está situada en la región  $\epsilon_3$ . A partir de la definición de dipolo eléctrico podemos calcular, a través del método de imágenes<sup>4</sup>, los dipolos imágenes, definidos por sus magnitudes y sus posiciones.

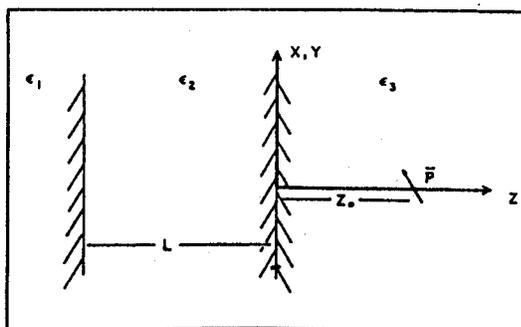


Fig. 1.— Se muestra un corte transversal del modelo utilizado y la localización del sistema de referencia.

Para el caso en que la molécula esté colocada en cualquiera de las dos regiones restantes, los pasos a seguir en la obtención de la solución, son similares a los llevados a cabo en el procedimiento que aquí presentamos.

Haciendo uso de las condiciones de continuidad sobre el potencial y sobre el campo eléctrico, denotados por  $\phi$  y  $\vec{E}$  respectivamente, calculamos los dipolos imágenes a partir de las cargas imágenes. Las condiciones de continuidad establecen que:

$$\begin{aligned} \phi_1(z = -L) &= \phi_2(z = -L), \quad \epsilon_1 \vec{E}_1 \cdot \hat{K} |_{z = -L} = \\ \epsilon_2 \vec{E}_2 \cdot \hat{K} |_{z = -L} \\ \phi_2(z = 0) &= \phi_3(z = 0), \\ \epsilon_2 \vec{E}_2 \cdot \hat{K} |_{z=0} &= \epsilon_3 \vec{E}_3 \cdot \hat{K} |_{z=0} \end{aligned} \quad (1)$$

donde  $\phi_i, \vec{E}_i$  son el potencial y el campo eléctrico respectivamente, en la región  $i$ . Con base en estas ecuaciones encontramos las cargas imágenes que producen cada una de las dos cargas que forman el dipolo real. Los resultados que se obtienen al aplicar este criterio al dipolo son los siguientes:

- i) En la región de  $\epsilon_1$  se forma una infinidad de dipolos imágenes, los cuales están dados por:

$$\vec{P}_1^n = L_{21}^n L_{23}^{n-1} \frac{\epsilon_2 \epsilon_3}{(\epsilon_2 + \epsilon_3)^2} [\vec{P} - 2(\vec{P} \cdot \hat{K})\hat{K}] \quad (2)$$

con  $n = 1, 2, 3, \dots$  y

$$L_{ij} = \frac{\epsilon_i - \epsilon_j}{\epsilon_i + \epsilon_j}$$

y correspondientemente, estas imágenes están localizadas a una distancia de:

$$Z_n = -[2L(n+1) + Z_0] \quad (3)$$

con  $n = 1, 2, 3, \dots$

donde  $Z_0$  es la distancia a la cual se encuentra la molécula polar de la superficie del catalizador.

- ii) En la región de  $\epsilon_2$  una sola imagen del dipolo se forma y es igual a:

$$\vec{P}_2 = L_{32} [\vec{P} - 2(\vec{P} \cdot \hat{K})\hat{K}], \quad (4)$$

y está localizada en  $Z^0 = -Z_0$ .

En la figura 2, se muestra la colocación del dipolo eléctrico real con las imágenes que se producen en las otras dos regiones. Para el caso límite en que las regiones  $\epsilon_1$  y  $\epsilon_2$  son iguales a un metal, y si además la molécula está embebida en una región vacía, ( $\epsilon_3 = 1$ ), entonces por el inciso i) encontramos que las imágenes de la región  $\epsilon_1$  desaparecen y la única que persiste es la imagen de la región  $\epsilon_2$ , ya que:

como  $\epsilon_1 = \epsilon_2 \rightarrow \infty$  y  $\epsilon_3 = 1$  entonces  $L_{21} = 0$  y  $L_{32} = -1 = -L_{23}$ , por lo que:

$$\vec{P}_1^n = 0 \text{ y } \vec{P}_2 = -[\vec{P} - 2(\vec{P} \cdot \hat{K})\hat{K}], \quad (5)$$

lo que quiere decir que la imagen de un dipolo colocado frente a una placa metálica y en vacío está dada por el  $\vec{P}_2$  de la ecuación 5.

Una vez que conocemos la magnitud y posición de las imágenes del dipolo, podemos evaluar la energía de interacción electrostática del dipolo sumergido en un medio heterogéneo.

### III ENERGIA DE INTERACCION

Cuando una molécula con dipolo eléctrico permanente está en un medio no-homogéneo, la interacción electrostática que obra sobre la molécula en ese medio puede calcularse si consideramos una interacción dipolo-dipolo. La situación está descrita en la figura 2.

La energía de interacción entre dos dipolos colocados en un medio de constante dieléctrico  $\epsilon$  se expresa<sup>5</sup> como:

$$W_{12} = \frac{1}{4\pi\epsilon} \frac{\vec{P}_1 \cdot \vec{P}_2 - 3(\hat{n} \cdot \vec{P}_1)(\hat{n} \cdot \vec{P}_2)}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|^3} \quad (6)$$

donde  $\hat{n}$  es el vector unitario a lo largo de  $\vec{r}_1 - \vec{r}_2$  y  $\vec{r}_1, \vec{r}_2$  son los vectores de posición para el dipolo 1 y 2, respectivamente. Para nuestro caso la interacción sería entre el dipolo real de la molécula y la serie infinita de dipolos imágenes. Haciendo la consideración de la validez de un principio de aditividad en las energías, calculamos la energía de interacción electrostática total.

La energía de interacción entre un dipolo real y su imagen está dada<sup>6</sup> por la mitad de la energía calculada entre el dipolo real y su dipolo imagen, como si este último fuera real. Con esto presente, la energía de interacción electrostática total de la molécula,  $W_d$ , está dada por :

$$W_d = 1/2 \text{ [la energía de interacción del dipolo real con todos los dipolos imágenes de la zonas de } \epsilon_1 \text{]} + 1/2 \text{ [de la energía de interacción entre la imagen dipolar en } \epsilon_2 \text{ y el dipolo real]}$$

o sea que:

$$W_d = \frac{1}{64\pi\epsilon_3} \frac{4\epsilon_2\epsilon_3}{(\epsilon_2 + \epsilon_3)^2} \sum_{n=0}^{\infty} [p^2 + p_z^2] \left[ \frac{L_{21}^{n+1} L_{23}^n}{[(n+1)L + Z_0]^3} + \frac{1}{64\pi\epsilon_3} L_{32} \frac{p^2 + p_z^2}{Z_0^3} \right] \quad (7)$$

Para el caso límite en que  $\epsilon_1 = \epsilon_2 \rightarrow \infty$  y  $\epsilon_3$  es vacío, que corresponde a un dipolo en el vacío frente a una región metálica, la energía de interacción dada por la ecuación 7 se reduce a:

$$W_d = - \frac{1}{64\pi} \frac{p^2 + p_z^2}{Z_0^3} \quad (8)$$

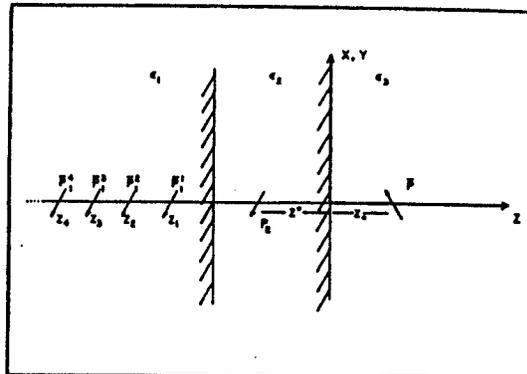


Fig. 2.- Se esquematiza la posición de los dipolos imágenes y la del dipolo real.

si además consideramos que  $\vec{P} = \hat{i} P_x + \hat{k} P_z$ , entonces la energía de interacción para el dipolo queda como:

$$W_d = - \frac{1}{64\pi} \frac{2P_z^2 + P_x^2}{Z_0^3} \quad (9)$$

y esta expresión para la  $W_d$ , es idéntica a la conocida para el caso<sup>7</sup> límite que tratamos.

La expresión para la energía de interacción descrita por la ecuación 7 no es explícita con respecto a la inclinación del dipolo. Para hacer patente este efecto se supone que el dipolo está colocado en la posición que muestra la figura 3. Entonces, si  $\theta$  es el ángulo entre el dipolo y el eje Z, tenemos que  $P_z$  en términos de P y  $\theta$  quedará como:

$$P_z = P \cos \theta, \quad (10)$$

y al sustituir este valor de  $P_z$  en la ecuación 7, ésta cambia a:

$$W_d = \frac{1}{64\pi\epsilon_3} \frac{4\epsilon_2\epsilon_3}{(\epsilon_2 + \epsilon_3)^2} \sum_{n=0}^{\infty} [p^2 + p^2 \cos^2 \theta] \left[ \frac{L_{21}^{n+1} L_{23}^n}{[(n+1)L + Z_0]^3} + \frac{L_{23}}{64\pi\epsilon_3} \frac{p^2 + p^2 \cos^2 \theta}{Z_0^3} \right] \quad (11)$$

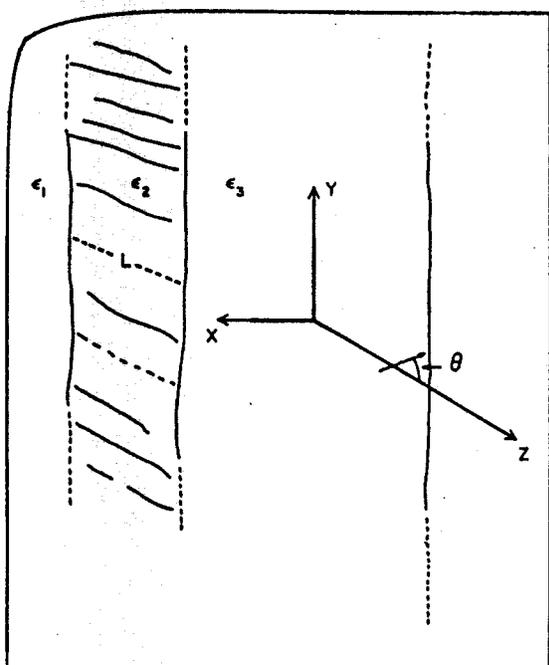


Fig. 3.— Descripción de la inclinación del dipolo real.

) y llamando a  $\delta = Zo/L$ , la ecuación anterior se transforma en:

$$\frac{64\pi L^3}{(1 + \cos^2 \theta) P^2} W_d = \frac{L_{32}}{\epsilon_3 \delta^3} + \frac{4\epsilon_2}{(\epsilon_2 + \epsilon_3)^2} \cdot \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(L_{21})^n + 1 (L_{23})^n}{[1 + n + \delta]^3} \quad (12)$$

Esta última ecuación expresa la energía de interacción a larga distancia para una molécula sumergida en un medio heterogéneo en términos de la magnitud del dipolo,  $P$ , del ángulo de inclinación,  $\theta$ , y de la distancia relativa,  $\delta$ .

La dependencia de la energía de interacción  $W_d$ , con respecto al ángulo de inclinación  $\theta$ , nos permite encontrar que la menor energía electrostática se obtiene para cuando  $\theta$  es igual a  $\pi/2$  (o bien  $(3/2)\pi$ ), pero cuando  $\theta$  es igual a cero (o también  $\pi$ ) la energía es máxima. Gráficamente esto correspondería a los siguientes casos: si  $\theta$  es igual a  $\pi/2$  el

dipolo real estaría colocado paralelo a las interfaces planas, mientras que cuando el ángulo vale cero el dipolo se encuentra situado perpendicularmente a las interfaces planas que dividen al medio.

#### IV EJEMPLOS

El modelo que hemos utilizado para obtener la energía de interacción a larga distancia para una molécula sumergida en un medio heterogéneo, permite tratar algunos casos que pueden ser de interés dentro de la gran diversidad de estudios que se realizan en los procesos catalíticos. Los ejemplos que presentamos son los siguientes:

a) El primero de ellos es el sistema formado por un soporte, un metal y un medio caracterizado por una constante dieléctrica  $\epsilon^1$ . Con base en esto, si  $\epsilon_1$  la tomamos igual a  $\epsilon$ ,  $\epsilon_2 \rightarrow \infty$  y  $\epsilon_3$  igual a  $\epsilon'$ , entonces estamos simulando el sistema de un metal soportado y rodeado por el vacío. Al sustituir los valores de las constantes dieléctricas, tenemos que:

$$L_{32} = -1, \quad L_{21} = 1 \quad (13)$$

$$y \quad \frac{\epsilon_2 \epsilon_3}{(\epsilon_2 + \epsilon_3)^2} \rightarrow 0$$

con los cuales la ecuación 12 nos da lo siguiente para la energía de interacción:

$$W_d = - \frac{1}{64\pi L^3} \frac{1 + \cos^2 \theta}{\epsilon'} \frac{P^2}{\delta^3}, \quad (14)$$

de esta ecuación podemos observar que la interacción es de tal manera que el metal atrae a la molécula sin importar el soporte. Otra característica, es que la energía de interacción varía como el inverso de la distancia de separación al cubo. También puede decirse que la fórmula para la  $W_d$  es general, en el sentido de que es válida para todos los metales y no hace distinción de si se trata de Cu, Pd, Pt, Au, Ni, ..., esto quiere decir que a larga distancia todos los metales interaccionan electros-

táticamente de la misma forma con la molécula. Sin embargo, la diferencia en el comportamiento de cada uno de los metales se manifiesta cuando la interacción se calcula a cortas distancias<sup>8</sup>.

En la figura 4, se muestra la gráfica de  $W_d$  en unidades de  $p^2 (1 + \cos^2 \theta) / 64\pi L^3$  contra la distancia relativa,  $\delta$ .

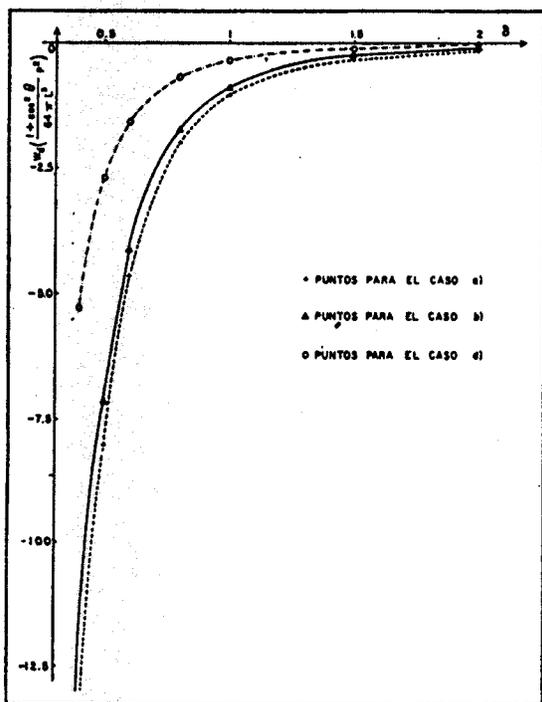


Fig. 4.— Gráficas de la energía de interacción electrostática en función de la distancia relativa, para diferentes sistemas.

b) Tomemos el siguiente sistema: un óxido soportado y rodeado por un medio vacío. Como soporte podemos elegir la alúmina, cuya constante dieléctrica<sup>9</sup> en promedio es igual a 6.4, y como óxido elegimos el óxido cúprico, de constante dieléctrica igual a 18.1. En estas circunstancias podemos pensar que el problema es el encontrar la energía de interacción para una molécula polar colocada en el vacío en presencia del óxido cúprico soportado en alúmina. Entonces, los valores para las constantes dieléctricas<sup>9</sup>, de acuerdo a nuestro modelo serán:

$$\epsilon_1 = 6.4 \quad \epsilon_2 = 18.1 \quad \text{y} \quad \epsilon_3 = 1$$

y a partir de esto, tenemos que:

$$L_{21} = 0.47755, \quad L_{23} = 0.89529$$

$$\text{y} \quad \frac{4 \epsilon_2 \epsilon_3}{(\epsilon_2 + \epsilon_3)^2} = 0.19845 \quad (15)$$

que al sustituirlos en la ecuación 12, la energía de interacción a larga distancia viene dada por:

$$\frac{64\pi L^3}{(1 + \cos^2 \theta) p^2} W_d = \frac{0.89529}{\delta^3} + 0.09477$$

$$\sum_{n=0} \frac{(0.42754)^n}{[1 + n + \delta]^3} \quad (16)$$

la suma que aparece en la ecuación anterior es convergente<sup>10</sup>. En la figura 4 se muestra la gráfica de la energía de interacción,  $W_d$ , contra la distancia relativa  $\delta$ , generada con la ecuación 16 y tomando únicamente los cinco primeros términos de la suma. La curva que obtuvimos en este caso puede ser utilizada para cualquier molécula que presente un dipolo permanente, ya que de ella puede ser elegido un punto y para un ángulo dado, sustituir el valor de  $P$  y de  $\theta$  y nos da la  $W_d$ . Para ilustrar la utilización de la curva vamos a considerar dos moléculas que se encuentran en las mismas condiciones; esto es, si el ángulo de inclinación es igual para las dos y están en un medio vacío en presencia de un catalizador de óxido cúprico soportado en alúmina: sea una de las moléculas de CO y la otra de agua. El CO presenta un momento dipolar permanente<sup>9</sup> de 0.112 D, mientras que la molécula de agua tiene un momento dipolar de 1.87D; podemos elegir cualquier punto de la curva que obtuvimos para este caso y concluir que la molécula de agua es fuertemente atraída por

el sistema alúmina-óxido cúprico que la molécula de CO.

c) En este ejemplo nos dedicaremos en la obtención de la influencia del soporte. En primera instancia tomaremos un caso particular y después derivaremos la fórmula en general. Para realizar el cálculo vamos a comparar dos situaciones: cuando el componente activo está soportado y cuando no lo está.

Para cada caso calcularemos la energía de interacción a larga distancia. Así, cuando el óxido cúprico está soportado en alúmina y rodeado por el vacío, la energía para la molécula polar está dada por la ecuación 16. Si el óxido no está soportado, lo cual se puede simular si tomamos  $\epsilon_1$  igual a uno, la energía de interacción para la misma molécula viene dada a partir de la ecuación<sup>12</sup> por:

$$\frac{64\pi L^3}{(1 + \cos^2 \theta) P^2} W_d = \frac{L_{32}}{\epsilon_3 \delta^3} + \frac{4 \epsilon_2}{(\epsilon_2 + \epsilon_3)^2} \cdot \sum_{n=0}^{\infty} \left( \frac{\epsilon_2 - 1}{\epsilon_2 + 1} \right)^{n+1} \frac{L_{23}^n}{(1 + n + \delta)^3} \quad (17)$$

la cual, al sustituir el valor de las constantes dieléctricas, toma la siguiente forma:

$$\frac{64\pi L^3}{(1 + \cos^2 \theta) P^2} W_d = -\frac{0.89528}{\delta^3} + 0.17768 \cdot \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(0.80154)^n}{(1 + n + \delta)^3} \quad (18)$$

Al restar numéricamente los valores de la ecuación 18 a los que se obtienen con la ecuación 12, se encuentra que si la delta está comprendida entre 0.3 y 1, la diferencia promedio entre estas dos energías es igual a -0.03. De aquí, podemos obtener la contribución a la energía de interacción electrostática por parte del soporte,  $W_{ds}$ .

$$W_{ds} = -0.03 \frac{(1 + \cos^2 \theta) P^2}{64\pi L^3} \quad (19)$$

$$\text{si } 0.3 < \delta < 1$$

Tomando una molécula de agua y otra de CO, encontramos que por la ecuación 19 y para un ángulo dado, la contribución del soporte es mayor para la molécula de agua que para la de CO.

Considerando nuestro modelo como lo hemos venido manejando, a saber: en la región uno colocamos el soporte con su constante dieléctrica local  $\epsilon_1$ , en la región dos está situado el componente activo con su respectiva constante dieléctrica local  $\epsilon_2$  y en la región tres simulamos el medio que rodea al catalizador y que está caracterizado por su constante dieléctrica local  $\epsilon_3$ , en la región tres también está localizada la molécula polar.

La energía de interacción electrostática para la molécula del reactante cuando está frente a un componente activo soportado, está dada por la ecuación 12; y para cuando está frente a un componente activo sin soporte, la energía de interacción viene dada por la ecuación 17.

Al hacer la operación de resta entre la ecuación 12 y la ecuación 17, obtenemos directamente la contribución a la energía de interacción  $W_{ds}$  por parte del soporte:

$$W_{ds} = W_{dc \cdot \text{soporte}} - W_{ds \cdot \text{soporte}} \quad (20)$$

o bien:

$$W_{ds} = \frac{(1 + \cos^2 \theta) P^2}{64\pi L^3} \frac{4 \epsilon_2}{(\epsilon_2 + \epsilon_3)^2} \sum_{n=0}^{\infty} \left[ \frac{(L_{21})^{n+1}}{(1 + n + \delta)^3} - \frac{\left( \frac{\epsilon_2 - 1}{\epsilon_2 + 1} \right)^{n+1}}{(1 + n + \delta)^3} \right] L_{23}^n \quad (21)$$

esta última ecuación nos da la influencia del soporte en la interacción electrostática para

una molécula polar. Casos límites de la ecuación 21 son: si  $\epsilon_1$  vale uno, o bien que  $\epsilon_2$  tienda a infinito. Cuando  $\epsilon_1$  vale uno, físicamente significa que el componente activo no está soportado; mientras que cuando  $\epsilon_2$  tiende a infinito, significa que el catalizador es un metal. Para estos dos casos la influencia del soporte es nula.

- d) En este cuarto ejemplo cambiamos una condición sobre el sistema estudiado en el inciso b), consideramos que la región tres sí está ocupada, y además lo está por un líquido; dicho líquido sirve únicamente como medio de transporte. Tomemos al benceno como el ocupante de la región tres, entonces, el sistema estará formado de la siguiente forma: el óxido cúprico soportado en alúmina y rodeado por benceno con la molécula polar en este líquido. Bajo estas condiciones tenemos<sup>9</sup> que:

$$\epsilon_1 = 6.4 \quad \epsilon_2 = 18.1 \quad \text{y} \quad \epsilon_3 = 2.284 \quad (22)$$

y a partir de estos valores para las constantes dieléctricas podemos calcular las constantes siguientes:

$$L_{21} = 0.47755, \quad L_{32} = 0.77590$$

$$\text{y} \quad \frac{4 \epsilon_2 \epsilon_3}{(\epsilon_2 + \epsilon_3)^2} = 0.39797 \quad (23)$$

y al sustituirlos en la ecuación 12, la expresión para la energía de interacción queda como:

$$\frac{64 \pi L^3}{(1 + \cos^2 \theta) p^2} W_d = - \frac{0.33971}{\delta^3} + 0.08321$$

$$\sum_{n=0}^{\infty} \frac{(0.37053)^n}{(1+n+\delta)^3} \quad (24)$$

Tomando en la suma los primeros cinco términos, esta ecuación está representada en la figura 4. Como podemos ver en ella, la diferencia que se nota al colocar un material más denso en el medio  $\epsilon_3$ ,

ecuación 24, es que la energía de interacción cambia. Si se compara la gráfica generada con la ecuación 24 con aquella en donde el medio tres es vacío, observamos que la energía de interacción se ve disminuida y esta diferencia es más notable cuando la molécula está cerca de la superficie del medio  $\epsilon_2$ , ya que a medida que ésta empieza a alejarse las curvas comienzan a confundirse.

Si persistimos en seguir haciendo comparaciones entre las curvas que aparecen en la figura 4, encontraremos que:

De las curvas para los casos b) y d) se observa que si el medio tres se vuelve más denso, entonces la interacción comienza a disminuir y hasta podríamos pensar que por la tendencia que siguen estas curvas podría darse el caso en el que la interacción sea nula, o bien repulsiva. Estas posibilidades pueden presentarse porque el modelo empleado depende de las constantes dieléctricas y el resultado que obtenemos para la energía de interacción está en función de estas constantes, las cuales se pueden combinar de manera que en lugar de una interacción atractiva tengamos una repulsiva.

Cuando comparamos las curvas b) y d) con la curva del inciso a), se observa que la curva de a) es la que nos proporciona la máxima atracción.

## V CONCLUSIONES

En este trabajo a partir de un modelo simplificado para una molécula polar que está en presencia de un catalizador, hemos encontrado una expresión para la energía de interacción electrostática a larga distancia. Encontramos también, que cuando el componente activo es un metal, la energía de interacción electrostática es inversamente proporcional al cubo de la distancia de separación, ecuación 14; además, si el componente activo es un metal, el soporte no influye en la interacción. Cuando se colocan otros tipos de catalizadores (un óxido metálico, por ejemplo) encontramos que el soporte empieza a intervenir en la interacción. Esta influencia la obtuvimos explícitamente y en forma general (ecuación 21).

En el sistema estudiado del óxido cúprico soportado en alúmina y rodeado por el vacío, encontramos, para una molécula polar, la energía de interacción electrostática (ecuación 16) y hallamos como un ejemplo de la curva generada que la molécula

de agua es atraída más fuertemente que la molécula de CO. La fórmula para la energía de interacción puede ser utilizada para otros sistemas.

Para cuando la región tres está ocupada por una sustancia líquida, encontramos que la energía de interacción electrostática (ecuación 24), entre la molécula polar y el catalizador soportado decrece con respecto a cuando dicha región está vacía. Puede ocurrir que si colocamos en el medio tres una sustancia de constante dieléctrica local adecuada a la interacción entre la molécula polar y el catalizador sea nula o repulsiva, en vez de ser atractiva.

## REFERENCIA

1. Hightower, J.W. and Richardson, J.T.; "The Uses of Heterogeneous Catalysts"; Instituto Mexicano del Petróleo, México.
2. Gregg, S.J. and Sing, K.S.W.; "Adsorption, Surface Area and Porosity", Academic Press, London-New York 1967.
3. Barrera, R.G.; Guzmán, O. and Balaguer, B.; Am J. Phys. 46 (11), 1172 (1978).
4. Jackson, J.D.; "Classical Electrodynamics"; John Wiley and Sons (New York, 1970).
5. Tralli, N.; "Classical Electromagnetic Theory"; McGraw-Hill (Tokyo, 1963).
6. Clemmow, P.C.; "An Introduction to Electromagnetic Theory", Cambridge University Press 1973.
7. Landau, L.D. and Lifshitz, E.M.; "Electrodynamics of Continuous Media", Addison-Wesley, Reading, Mass. 1960.
8. Clark, A.; "The Theory of Adsorption and Catalysis, Academic Press 1970.
9. Robert C. Weast (ed.); CRC Handbook of Chemistry and Physics, CRC Press 1978.
10. Churchill, R.V.; "Complex Variables and Applications", McGraw-Hill 1960.