

|                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                |                                                   |                                                                                                                |                    |                                                        |
|------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|---------------------------------------------------|----------------------------------------------------------------------------------------------------------------|--------------------|--------------------------------------------------------|
|                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                               | <b>UNIVERSIDADE FEDERAL DE UBERLÂNDIA</b>         |                                                                                                                |                    |                                                        |
|                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                | <b>FICHA DE DISCIPLINA</b>                        |                                                                                                                |                    |                                                        |
| <b>DISCIPLINA: CINÉTICA QUÍMICA E CATÁLISE HETEROGÊNEA</b>                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                     |                                                   |                                                                                                                |                    |                                                        |
| <b>PERÍODO:</b>                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                | <b>CURSO:</b> Pós-Graduação em Engenharia Química | <b>FACULDADE DE ENGENHARIA QUÍMICA</b>                                                                         |                    |                                                        |
| <b>Código:</b><br>PEQ008                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                       | <b>Carga Horária</b><br>60                        | <b>Créditos</b><br>04                                                                                          | <b>Obrigatória</b> | <b>Optativa</b><br><input checked="" type="checkbox"/> |
| <b>REQUISITOS (Disciplinas pré ou có-requisitos, n. de créditos, outros):</b>                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                  |                                                   |                                                                                                                |                    |                                                        |
| <b>OBJETIVOS DA DISCIPLINA (Ao final do curso o aluno será capaz de:)</b><br>Determinar uma equação de taxa e mecanismo de reação a partir de dados experimentais. Compreender, analisar e aplicar os fundamentos de catálise; conhecer os fundamentos dos principais métodos de caracterização e preparação de catalisadores                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                  |                                                   |                                                                                                                |                    |                                                        |
| <b>EMENTA DO PROGRAMA:</b> <ul style="list-style-type: none"> <li>- Introdução à cinética química, revisão dos aspectos matemáticos</li> <li>- Determinação das equações da taxa para reações homogêneas</li> <li>- Mecanismos de reação</li> <li>- Introdução a catálise homogênea e heterogênea</li> <li>- Adsorção</li> <li>- Taxa de reação e modelos Cinéticos para reações Catalíticas</li> <li>- Manufatura e preparação de catalisadores</li> <li>- Teste e caracterização física de catalisadores</li> <li>- Processos de Transporte com reação catalisadas por sólidos</li> </ul>                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                    |                                                   |                                                                                                                |                    |                                                        |
| <b>BIBLIOGRAFIA</b><br>HILL Jr. C. G. , And Introduction to Chemical Engineering Kinetics and Reactor Design. John Wiley , New York, 1977.<br>SMITH , J.M., Chemical Engineering Kinetics. 3 ed., McGraw Hill, New York, 1981.<br>LEVENSPIEL, O. (1974) "Engenharia das Reações Químicas", Edgard Blücher Ltda<br>SCHMAL, M. (1982): "Cinética Homogênea Aplicada e Cálculo de Reatores"<br>Guanabara Dois.<br>BAMFORD, C.H..e TIPPER, C.F.H. (1969) "Comprehensive Chemical Kinetics" Elsevier Pub. Comp, NY, vol. 1 ao 7.<br>MACEDO, H. (1988) "Físico-Químico"Guanabara Dois.<br>DENARO, A. R. (1974) "Fundamentos de Eletroquímica", Edgard Blöcher.<br>DAMASKIN, B. e PETRI, O. (1985) "Fundamentos de Eletroquímica Teórica", Mir.<br>GUERASIMOV, et al. (1977) "Físico- Química", Vol. 2, Mir.<br>FROMENT, G. F. and BISCHOFF, K. B. Chemical Reactor Analysis and Design. John Wiley & Sons, New York, Second edition, 1990.<br>SATTERFIELD, C.N.- Heterogeneous Catalysis in Practice, 2ª edição, McGraw Hill,1977.<br>FOGLER, H.S.- Elements of Chemical Reaction Engineering, Prentice-Hall, 1999<br>CHEN, N.H.- Process Reactor Design, 1ª edição, Inc. Massachusetts, Allyn an Bacon, 1983.<br>CARBERRY, J.J. -Chemical and Catalytic Reaction Engineering 1ª edição, McGraw Hill, 1976.<br>GREGG & SING -Adsorption, Surface, Area and Porosity,3ª edição, Academic Press, 1978. |                                                   |                                                                                                                |                    |                                                        |
| DATA 24 / 09 /2009<br><br><br>Universidade Federal de Uberlândia<br>Profª Drª Carla Eponina Hori<br>Coordenadora do PPGEQ/UFU                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                               |                                                   | DATA 24 / 09 /2009<br><br> |                    |                                                        |

## **DESCRIÇÃO DO PROGRAMA:**

### **1 – Introdução à Cinética Química**

- Introdução
- Conceitos básicos

### **2 – Determinação das equações da taxa para reações homogêneas**

- Introdução
- Classificação das reações
- Definição de taxa de reação
- Ordem e molecularidade
- Modelos cinéticos de reação homogênea
- Determinação da taxa de reação: Medidas experimentais
- Interpretação de dados cinéticos
  - Método diferencial
  - Método integral
- Simulação computacional de modelos cinéticos
- Métodos numéricos aplicados ao tratamento de dados cinéticos

### **3 – Mecanismos de reação**

- Introdução
- Hipóteses para construção de mecanismos de reação
- Interpretação molecular do fenômeno de reação

### **4 – Determinação de taxas para reações múltiplas**

- Reações reversíveis
- Reações paralelas e em série
- Reações em cadeia
- Reações de polimerização

### **5 – Introdução a Catálise**

- Introdução e conceitos básicos
- Catalisadores heterogêneos industriais
- Definições: Catalisador, Atividade catalítica, Seletividade catalítica, Catalisador negativo, Catálise hetero-homogênea, Sítios, Número de turnover, Funcionabilidade, Desativação catalítica
- Aspectos termodinâmicos e energéticos
- Classificação e seleção de catalisadores
- Catalisadores homogêneos

### **6 – Adsorção**

- Caracterização do tipo de sorção
  - Efeitos térmicos
  - Taxa de adsorção
  - Efeito da temperatura na quantidade adsorvida
  - Extensão da adsorção
  - Reversibilidade
  - Especificidade
- Isotermas de adsorção física
- Calor de adsorção

- Modelos para isotermas de adsorção
  - Isoterma de Langmuir
  - Isoterma de Freundlich
  - Isoterma de Temkin
- Quimissorção

## 7 – Taxa de Reação e Modelos Cinéticos para Reações Catalíticas

- Introdução
- Correlações empíricas
- Modelos cinéticos formais
  - Modelo de Langmuir-Hinshelwood
  - Energia de ativação aparente
  - Taxa máxima de reação como aumento de temperatura
  - Modelo de Rideal
  - Controle de adsorção
  - Modelo cinético de dois passos
- Alguns usos e limitações de modelos cinéticos
- Misturas de reagentes
- Períodos de indução e envenenamento
- Compensação
  - Falsa compensação

## 8 – Manufatura e Preparação de Catalisadores

- Métodos gerais de manufatura
- Método de precipitação
  - Precipitação
  - Operações de forma
  - Calcinação
  - Redução para o metal
- Impregnação
  - Distribuição através do pellet
- Suporte de catalisadores
  - Alumina
  - Sílica
  - Carbono ativado
  - Outros suportes
- Promotores
  - Promotores texturais
  - Promotores estruturais

## 9 – Teste e Caracterização Física de Catalisadores

- Medida de área superficial
  - Isotermas de adsorção física
  - Método de BET (Brunauer-Emmett-Teller)
  - Área superficial por quimissorção seletiva
- Volume de poros
- Distribuição tamanho de poros
  - Adsorção de nitrogênio
  - Penetração de mercúrio
  - Exemplos de distribuição de tamanhos de poros
- Propriedades mecânicas
  - Teste de esmagamento
  - Distribuição tamanho de partícula

## 10 – Processos de Transporte com Reações Catalisadas por Sólidos

### 10.1– *Processos de Transporte Interno*

- Reação de um componente do fluido na superfície sólida
- Resistência à transferência de calor e massa
  - Coeficiente de transferência de massa
  - Coeficientes de transferência de calor
  - Difusão multicomponente em um fluido
- Diferenças de temperatura, concentração ou pressão parcial entre a fase *bulk* e a superfície da partícula catalítica

### 10.2– *Processos de Transporte Externo*

- Estrutura interna do catalisador
- Difusão no poro
  - Definições e observações experimentais
  - Descrição geral e quantitativa da difusão nos poros do catalisador
  - Modelo de poros aleatórios
  - Modelo de conexão cruzada-paralela de poros
  - Modelo de redes de poros de Beeckman e Froment
  - Determinação experimental da difusividade efetiva de um componente dentro da partícula ou da tortuosidade
  - Difusão nos poros com adsorção; difusão de superfície e difusão configuracional
- Difusão e reação dentro da partícula de catalisador
  - O conceito de fator de efetividade
  - Critério para importância da limitação difusional
  - Combinação da resistência à difusão interna e externa
  - Critério experimental para o diagnóstico da ausência das limitações à transferência de massa
  - Multiplicidade de estados estacionários em partículas de catalisador
- Reações complexas na presença de limitações difusionais
- Partículas não isotérmicas
- Gradiente térmico dentro do catalisador
- Gradiente térmico interno e externo