

## Programa da Unidade Curricular

Ano Lectivo: 2011-2012

**REACTORES HETEROGÉNEOS E CATÁLISE**

Mestrado em Tecnologia Química

1.º ano

1.º sem

6 ECTS

Carga Horária	Horas Totais de Contacto				Docente
	T	TP	P	PL	
30		14		16	<b>José Manuel Quelhas Antunes</b> Professor Adjunto

**Objectivos**

O objectivo primordial da disciplina é o desenvolvimento de competências complementares no domínio da Engenharia da Reacção Química, através de: - análise dos desvios do comportamento dos reactores químicos relativamente à idealidade com recurso à teoria da distribuição de tempos de residência; - estudos no âmbito da catálise heterogénea; - definição dos regimes de operação e eficiência de catalisadores sólidos; - análise e projecto de reactores catalíticos de leito fixo.

**Conteúdos Programáticos**

1. Introdução. Revisão breve sobre cinética química e reactores químicos homogéneos ideais.
2. Teoria da distribuição de tempos de residência.
  - 2.1. Introdução.
    - 2.1.1. Pressupostos e conceitos fundamentais
    - 2.1.2. Distribuição de tempos de residência, de idades internas, de idades residuais e função intensidade
    - 2.1.3. Metodologia empregue na medição de DTR
    - 2.1.4. Diagnóstico de anomalias com recurso à DTR.
  - 2.2. Modelos de escoamento não-ideal
    - 2.2.1. Modelos combinados
    - 2.2.2. Modelo pistão dispersivo
  - 2.3. DTR, mistura e reacção química
3. Processos Catalíticos.
  - 3.1. Características gerais da catálise. Catálise homogénea. Catálise heterogénea.
  - 3.2. Reacções catalíticas heterogéneas. Velocidade das reacções catalíticas heterogéneas.
  - 3.3. Desactivação de catalisadores sólidos. - Mecanismos de desactivação. - Técnicas de prevenção de desactivação de catalisadores. - Regeneração de catalisadores
4. Comportamento das Partículas de Catalisador
  - 4.1. Introdução. Geometrias características das partículas de catalisador. - Placa plana. Cilindro infinitamente longo. Esfera
  - 4.2. Catalisadores não isotérmicos: competição entre difusão interna, difusão externa e reacção química. - Equações de balanço: Partícula de catalisador. Interface fluido/sólido- Equações adimensionais. Parâmetros do modelo.- Factores de eficiência
  - 4.3. Catalisadores isotérmicos: competição entre difusão interna, difusão externa e reacção química. - Equações de balanço. Equações adimensionais.
5. Reactores Catalíticos de Leito Fixo.
  - 5.1. Modelos Heterogéneos Bidimensionais (HT2D) com e sem dispersão axial. Regime transiente e regime estacionário. - Equações de balanço. Balanço mássico. Balanço energético. - Condições fronteira de Danckwerts. - Equações adimensionais. Parâmetros do modelo.
  - 5.2. Modelos Pseudo-Homogéneos Bidimensionais (PH2D) com e sem dispersão axial. Regime transiente e regime estacionário. - Equações de balanço. - Equações adimensionais. Parâmetros do modelo.



- 5.3. Modelos Heterogéneos Unidimensionais (HT1D) com e sem dispersão axial. Regime transiente e regime estacionário. - Equações de balanço. - Equações adimensionais. Parâmetros do modelo.
- 5.4. Modelos Pseudo-Homogéneos Unidimensionais (PH1D) com e sem dispersão axial. Regime transiente e regime estacionário. - Equações de balanço. - Equações adimensionais. Parâmetros do modelo.
- 5.5. Equação de Ergun. Modelos matemáticos. Métodos numéricos.

Nas aulas práticas laboratoriais serão realizados trabalhos experimentais relacionados com a operação de reactores reais recorrendo a reactores à escala laboratorial, para aplicação da teoria da distribuição de tempos de residência.

### Método de Avaliação

#### *Avaliação contínua*

Os alunos que pretenderem submeter-se a avaliação contínua terão que realizar os trabalhos experimentais e computacionais previstos, elaborando os relatórios respectivos. A classificação obtida no relatório dos trabalhos laboratoriais terá o peso de 35% na classificação final e a classificação do relatório do trabalho computacional terá o peso de 35%. Os restantes 30% são atribuídos à classificação obtida numa prova escrita de índole teórica.

#### *Avaliação final*

A avaliação final consiste numa prova escrita com o peso de 100% e dividida em duas partes: teórica (30%) e prática (70%). Os alunos que se submeteram à avaliação contínua poderão, caso estes o solicitem, realizar apenas a parte teórica da prova escrita, sendo nesse caso a classificação final determinada nos moldes do ponto anterior.

### Bibliografia

- [1] Fogler, H.S., *Elements of Chemical Reaction Engineering*, Prentice-Hall, New Jersey, 1986.
- [2] Levenspiel, O., *Chemical Reaction Engineering*, Third Edition, John Wiley, New York, 1999.
- [3] Lemos, F., Lopes, J. M., Ribeiro, F. R., *Reactores Químicos*, IST Press, Lisboa, 2002.
- [4] Froment, G. F., Bischoff, K. B., *Chemical Reactor Analysis and Design*, Second Edition, John Wiley & Sons, New York, 1990.
- [5] Simões, P. N. N. L., *Introdução à teoria da distribuição de tempos de residência*, Imprensa da Universidade de Coimbra, Coimbra, 2006.
- [6] Smith, J. M., *Chemical Engineering Kinetics*, Third Edition, McGraw Hill, New York, 1981.
- [7] Coulson, J. M., Richardson, J. F., *Tecnologia Química*, Volume III, Terceira Edição, Fundação Calouste Gulbenkian, Lisboa, 1982.
- [8] Nunes dos Santos, A. M., *Reactores Químicos*, Fundação Calouste Gulbenkian, Lisboa, 1990.
- [9] Levenspiel, O., *Engenharia das Reações Químicas*, tradução da 3ª Edição, Editora Edgard Blücher, São Paulo, 2000.

José Manuel Anselmos Antunes, Professor Adjunto