

Unidade Curricular (português):

Reatores Heterogéneos e Catálise

Curricular unit (inglês):

Heterogeneous Reactors and Catalysis

Docente responsável

Nome completo: Angela Maria Pereira Martins Nunes

Número de horas de contacto na unidade curricular: 60

Outros docentes:

Jaime Filipe Borges Puna

Objetivos de aprendizagem (conhecimentos, aptidões e competências a desenvolver pelos estudantes):

1. Identificar questões de carácter teórico-prático relativas ao funcionamento de catalisadores sólidos, com fundamento nas suas propriedades estruturais, texturais, carácter ácido-básico e desativação.
2. Interpretar o comportamento dos catalisadores heterogéneos em reações catalíticas modelo bem como a sua desativação. Quantificação dos aspetos cinéticos.
3. Compreender o papel dos catalisadores heterogéneos em processos industriais.
4. Dimensionar e compreender o modo de operação de reatores catalíticos heterogéneos com duas fases (líquido-sólido catalíticos e gás-sólido catalítico) e com três fases (gás-líquido-sólido catalítico)

Learning outcomes of the curricular unit:

1. Identify theoretical and experimental topics concerning the working conditions of solid catalysts, based on their structure, textural and acid-basic character.
2. Interpret the behaviour of heterogeneous catalysts in model catalytic reactions along with its deactivation. Quantification of kinetic aspects.
3. Understand the role of heterogeneous catalysts in industrial processes.
4. Dimensioning and understanding the operational conditions of heterogeneous catalytic reactions with two phases (liquid-catalytic solid and gas-catalytic solid) and with three phases (gas-liquid-solid catalyst).

Conteúdos programáticos:

1. Introdução à catálise heterogénea. Importância industrial. Propriedades dos catalisadores. Preparação dos catalisadores mássicos e suportados.
2. Síntese, modificação e caracterização fisico-química de catalisadores heterogéneos.
3. Zeólitos. Propriedade e estruturas dos zeólitos. Zeólitos hierárquicos. Reações catalíticas industriais e modelo. Desativação. Heterogeneização de catalisadores homogéneos.
4. Cinética das reações catalíticas heterogéneas.
5. Introdução à catálise ambiental. Fontes estacionárias. Fontes móveis.
6. Características gerais dos reatores catalíticos heterogéneos. Competição entre fenómenos de transporte e reação química ao nível duma partícula de catalisador.
7. Reatores heterogéneos bifásicos e trifásicos. Dimensionamento, balanços mássicos e energéticos. Construção e aplicações Industriais.

Syllabus:

1. Introduction to heterogeneous catalysis. Importance in industry. Preparations and properties of massic and supported catalysts.
2. Synthesis, modification and characterization of heterogeneous catalysts.
3. Zeolites. Properties and main structures. Hierarchical zeolites. Industrial and model catalytic reactions. Deactivation. Heterogeneization of homogeneous catalysts.
4. Kinetic laws of heterogeneous catalysis.
5. Introduction to environmental catalysis. Stationary and mobile sources.
6. General characteristics of heterogeneous reactors. Competition between transport phenomena and chemical reaction occurring at the catalysts particles.
7. Heterogeneous reactors: two phases and three phases. Dimensioning, Massic and energetic balances. Construction and Industrial applications.

Demonstração da coerência dos conteúdos programáticos com os objetivos da unidade curricular:

Os conteúdos programáticos da unidade curricular têm por objetivo dar a conhecer aos estudantes o modo de funcionamento de reatores heterogéneos com duas ou três fases. Numa primeira fase os alunos tomam conhecimento com a fase sólida ativa, isto é, o catalisador. Pretende-se que os alunos fiquem familiarizados com a síntese, caracterização, propriedades e aplicações de catalisadores heterogéneos com especial ênfase aos zeólitos. Numa segunda fase pretende-se dar o papel do catalisador numa reação química, sendo deduzidas as leis cinéticas respetivas. Numa terceira fase pretende-se que os alunos fiquem familiarizados com os modos

de operação dos reatores catalíticos heterogéneos, vantagens e desvantagens e principais aplicações para cada situação. Finalmente após integração de todos os conhecimentos os alunos estão preparados dimensionar reatores heterogéneos, através da análise de casos de estudo, fazendo a avaliação do impacto de gradientes difusionais e de temperatura.

Demonstration of the syllabus coherence with the curricular unit's objectives:

The syllabus of the course is intended to acquaint students with the mode of operation of heterogeneous reactors with two or three phases. In a first phase the students noted with the active solid phase, i.e. the catalyst. It is intended that students become familiar with the synthesis, characterization, properties and applications of heterogeneous catalysts with particular emphasis on zeolites. In the second phase the purpose is to understand the role of a catalyst in a chemical reaction, including the deduction of kinetics laws. In a third phase it is intended that the students become familiar with the operation modes of heterogeneous catalytic reactors, advantages and disadvantages and main applications for each situation.

Finally, after integrating all the previous knowledge, students are prepared to design heterogeneous reactors, through the analysis of case studies, making the evaluation of the impact of diffusional and temperature gradients.

Metodologias de Ensino (avaliação incluída):

As aulas são lecionadas por exposição de slides em powerpoint elaborados pelo docente e disponibilizados através do moodle. A exposição da matéria é acompanhada com exemplos ligados à investigação e aplicações industriais. São realizados problemas numéricos relacionados com os conteúdos programáticos. Os alunos formam grupos de trabalho, pesquisam a bibliografia, elaboram e apresentam dois pequenos seminários. São ainda convidados especialistas do meio académico e industrial para apresentarem seminários.

Avaliação contínua:

Dois testes escritos (T1 e T2) com duração de 2,5 horas cada. Dois seminários (S).

Dois testes parciais (T1 e T2): $T1 \geq 8.0$, $T2 \geq 8.0$

$NT = (T1 + T2) / 2$: $NT \geq 9.5$

Nota média dos dois seminários (S)

Classificação final: $NF = (NT) \times 0,8 + S \times 0,2$

Avaliação por exame:

Prova escrita com duração de 3 h.

Exame Final (EF): $EF \geq 9.5$

Classificação final: $NF = EF$

Arredondamento às unidades. Por defeito antes das cinco décimas, por excesso a partir de cinco décimas

Teaching methodologies (including evaluation):

Exposition of the contents by the lecturer, using powerpoint slides previously available to the students by moodle platform, accompanied by examples and case studies from academic research and industry.

Resolution of numerical problems. The students are guided through bibliographic research in order to elaborate two short seminars that are presented and discussed in class. Specialists from academia and industry are invited to lecture seminars from their area of expertise.

Continuous evaluation:

Two partial written tests (T1 and T2) with 2,5 hours duration. Two seminars (S)

Two partial tests (T1 e T2): $T1 \geq 8.0$, $T2 \geq 8.0$

$NT = (T1 + T2) / 2$: $NF \geq 9.5$

Average classification of seminars (S)

Final Classification: $NF = (NT) \times 0,8 + S \times 0,2$

Final exam evaluation:

Written exam with 3 h duration.

Formula for the calculation of Final Grade (NF):

Final exam (EF): $EF \geq 9.5$

Final Classification: $NF = EF$

Rounded to units. By defect, beneath five tenths, per excess, from five tenths

Demonstração da coerência das metodologias de ensino com os objetivos de aprendizagem da unidade curricular:

Os conteúdos programáticos da unidade curricular de Reatores Heterogéneos e Catálise são lecionados através da exposição de slides, elaborados pelo docente responsável pela UC. São utilizadas diversas fontes bibliográficas, nomeadamente livros que se encontram acessíveis na biblioteca do ISEL, podendo ser requisitados pelos alunos e artigos científicos que se encontram acessíveis via web of science ou b-on. Os slides são disponibilizados antecipadamente na página moodle podendo assim os alunos acompanhar a aulas com os slides impressos ou através do seu computador ou tablet, tirando as suas anotações de estudo. Os conceitos teóricos subjacentes aos objetivos de aprendizagem são ilustrados com diversos exemplos e casos de estudo, pretendendo-se envolver os alunos na discussão dos tópicos e tornar as aulas interativas.

A realização de problemas numéricos, em especial no que diz respeito ao dimensionamento de reatores heterogéneos é feita com base em análise de casos de estudo, sendo dada ênfase não

só aos resultados numéricos como também à discussão interpretação do resultado e consequências para as condições de operação do reator.

Aos alunos é atribuída a realização de dois seminários, em grupo, cujos temas fazem parte dos conteúdos programáticos da unidade curricular. Pretende-se que um dos seminários aborde uma temática mais científica no domínio da síntese e modificação de catalisadores heterogéneos e o segundo insere-se no âmbito mais tecnológico, relacionado com o modo de funcionamento de reatores heterogéneos. A realização destes seminários é acompanhada tutorialmente pelo docente que disponibiliza uma fração do tempo das aulas para permitir que os alunos se reúnam em grupo, façam a pesquisa bibliográfica e preparem as suas apresentações. Após a correção do docente os seminários são apresentados em ambiente de aula, seguido de discussão e conclusões finais por parte do docente.

O convite para apresentação de seminários por especialistas do meio académico e industrial tem vindo a ser prática corrente nesta unidade curricular, tendo por objetivo alargar os horizontes dos alunos quer no campo da investigação científica (síntese, caracterização e modificação de catalisadores heterogéneos) quer no domínio das aplicações industriais, nomeadamente na refinação de petróleo e petroquímica.

Demonstration of the coherence between the teaching methodologies and the learning outcomes:

The curricular unit of Heterogeneous Reactors and Catalysis is lectured through the exposition of

powerpoint slides that are elaborated by the responsible professor of the curricular unit. Several bibliographic sources are used, such as reference books that are available at ISEL library and can be consulted or requested by the students. Also, scientific papers are that are available via web of science or b-on. The slides are available in advance in moodle page allowing students to bring the printed slides to class display them at the computer or tablet in order to take their personal notes during class. The theoretical concepts are also illustrated with several examples and case studies aiming to gather the students in the discussion, making lessons interactive

The resolution of numerical problems, especially in what concerns the dimensioning of heterogeneous reactors is made through the analysis of case studies. The numerical resolution is accompanied by the discussion and interpretation of the results e possible consequences for the operational conditions of the reactor.

The students also have to work in groups of about three elements and perform two short seminars that cover specific topics of the programme contents of the curricular unit. One of the seminars concerns more scientific issues, like the synthesis and modification of heterogeneous catalysts. The second one regards the technological applications of the catalysts in heterogeneous reactors and its operational conditions.

The execution of the seminars is accompanied by the lecturer that spares some during classes to allow the students interaction for the bibliographic research and layout of the slides

presentation. After corrections, the seminars are presented to the class, followed by discussion among all students and lecturer.

The invitation for seminars by experts from academia and industry has been a common practice in this curricular unit., with the aim of broadening the horizons of students either in the field of scientific research or in the industrial applications area, particularly in the petroleum refining and petrochemical industries

Bibliografia principal:

1. Hertl, G., Knozinger, H., Weitkamp, J., (Ed) "Handbook of heterogeneous catalysis" Vol 1 a 5, VCH, 1999.
2. Figueiredo, J.L., Ramôa Ribeiro, F., "Catálise heterogénea", Fundação Calouste Gulbenkian, 2 Edição, 2007.
3. Masel, R.I., "Chemical Kinetics and Catalysis" John Wiley & Sons, 2001.
4. Heck, R.M., Farrauto, R.J., Gulati, S.T., "Catalytic air pollution and control", John Wiley & Sons, 3ª Edição, 2002.
5. Trambouze, P. Euzen, J.-P., "Chemical reactors from design to operation" Technip Editora, 2004.
6. Fogler, H. S., "Elements of chemical reaction engineering", Prentice Hall, 4ª Edição, 2006.
7. Meyers, R.,A. "Handbook of Petroleum Refining Processes", McGraw Hil Educations, 4a Edição, 2016.

