



CINÉTICA QUÍMICA DAS REAÇÕES CATALÍTICAS

Código:	Pré-requisitos: Co-requisito:
Horas Aulas/Semana:	PRÁTICA: TEÓRICA: 04
Créditos: 4	Responsáveis: Prof. Ricardo Reis Soares
Objetivos: Compreender, analisar e aplicar os fundamentos da cinética das reações químicas catalíticas e da caracterização textural de catalisadores. Determinar a equação da taxa e o mecanismo de reação a partir de dados experimentais.	
Ementa: UNIDADE I – INTRODUÇÃO E CONCEITOS BÁSICOS I.1 – Estequiometria e taxas de reação I.2 – Elementos de Termodinâmica Química – Equilíbrio Químico I.3 – Determinação de taxas de reações múltiplas. Seletividade e Rendimento. I.4 – Aspectos mecanísticos: reações elementares, intermediários ativos e etapa controladora da reação. I.5 - Aspectos fundamentais das reações catalíticas: composição de um catalisador, sítios catlíticos, Número de Turnover (Frequência de Reação), Desativação Catalítica e Etapas da cinética intrínseca heterogênea (adsorção, reação superficial e dessorção). UNIDADE II – PROCESSOS DE ADSORÇÃO E DESSORÇÃO II.1 – Taxas de adsorção e dessorção II.2 – Equilíbrio – Adsorção em superfícies uniformes e não uniformes. II.3 – Caracterização (quantificação) dos sítios e da textura do catalisador mediante a adsorção e/ou dessorção – Área superficial total BET, Distribuição de Volume de Poros, Quimissorção, determinação de tamanho de cristalitos e Dispersão.	



UNIDADE III – TAXA DE REAÇÃO - CARACTERIZAÇÃO E DETERMINAÇÃO DOS PARÂMETROS DOS MODELOS CINÉTICOS DAS REAÇÕES CATALÍTICAS

III.1 – Teoria Cinética dos gases

III.2 – Teoria do Estado de Transição

III.3 – Calor de adsorção e ativação em superfícies metálicas

III.4 – Aproximação do Estado Estacionário (SSA), Etapa Controladora da Taxa (RDS) e Intermediário Reacional Mais Abundante (MARI).

UNIDADE IV – TAXA DE REAÇÃO - MODELOS CINÉTICO DAS REAÇÕES CATALÍTICAS.

IV.1 – Modelos de Langmuir- Hinshelwood

IV.2 – Modelos de Eley-Rideal

IV.3 – Outros Modelos

IV.4 – Modelos para Reações Enzimáticas

UNIDADE V – DETERMINAÇÃO EXPERIMENTAL DA TAXA DE REAÇÃO

V.1 – Tipos de Reatores – Batelada, Semi-batelada, CSTR e PFR.

V.2 – Limitações difusionais de massa e de calor

V.3 – Métodos de determinação de parâmetros – Integral, diferencial, reator diferencial, taxa inicial, etc..

Bibliografia:

- 1) Hill, Charles G. Jr.; “An Introduction to Chemical Engineering Kinetics and Reactor Design”, John Wiley & Sons, New York , 1977.
- 2) Levenspiel, O.: “ Engenharia das Reações Químicas”, Editora Edgard Blucher Ltda; 2000.
- 3) Vannice, M.A.; “Kinetics of Catalytic Reactions”, Springer, 2005
- 4) Thomas, J.M and Thomas, W.J.; “Principles and Practice of Heterogeneous Catalysis”, VCH, 1997.
- 5) Satterfield, C.N.; “Heterogeneous Catalysis in Industrial Practice”, 2nd Edition, Krieger, 1991