

CURSO Pós-graduação em Engenharia Química		DEPARTAMENTO Engenharia Química		CENTRO Tecnologia	
DISCIPLINA Projeto de Catalisadores			CÓDIGO DEQ 4039	OBRIGATÓRIA <input type="checkbox"/>	OPTATIVA <input checked="" type="checkbox"/>
CARGA HORÁRIA 45 h/trimestre		CRÉDITOS 03	VIGÊNCIA desde o 1º trimestre de 2000		

Ementa

Teoria das Ligações Químicas. Cristalografia. Introdução à Mecânica Quântica. Metais de Transição. Mecanismo e Cinética de Reações Catalíticas, Física e Química de Superfície. Interação Metal-Suporte em Projeto de Catalisadores. Projeto de Catalisadores com Zeólitas. Projeto Global de Catalisadores e dos seus Constituintes.

Programa

1. Teoria das Ligações Químicas: Introdução; teoria de campo cristalino e campo ligante; teoria do orbital molecular; teoria de grupo. 2. Cristalografia: Aspecto estrutural; morfologia de cristal e de cristalito; parâmetro Lattice cristalino; índice de Miller; classificação de catalisadores heterogêneos; óxidos de metais de transição não estequiométricos; óxidos de elementos dos principais grupos. 3. Introdução à Mecânica Quântica: Introdução e princípios; mecânica clássica, suas falhas; movimento translacional; movimento vibracional; movimento rotacional. 4. Metais de Transição: Propriedades de metais de transição; o papel dos elétrons d na catálise; a cor dos sólidos; propriedades físico-química de óxidos. 5. Mecanismo e Cinética de Reações Catalíticas; conceitos e definições; cinética de etapas elementares; adsorção, dessorção e reação superficial; cinética da reação global; cinética de reações em duas etapas sobre superfícies não uniformes. 6. Física e química de superfície; introdução; a estrutura de superfícies; termodinâmica de superfícies; propriedades elétricas de superfícies; ligação química em superfícies; catálise em superfícies; propriedades mecânicas de superfícies. 7. Interação Metal-suporte em Projeto de Catalisadores; Introdução; classificação de interação metal-suporte; natureza e composição dos suportes; preparação de catalisadores metálicos dispersos; influência da interação metal-suporte nas propriedades adsorptivas; influência da interação metal-suporte nas propriedades catalíticas. 9. Projeto de catalisadores com zeólitas; introdução; classificação de zeólitas; propriedades de sorção e difusão; propriedades catalíticas intrínsecas em zeólitas; princípios gerais em projeto de catalisadores; projeto de catalisadores com seletividade de forma para processos comerciais; desenvolvimento de catalisadores de craqueamento catalítico baseado em zeólitas. 10. Projeto Global de Catalisadores e dos seus Constituintes: Introdução; desenvolvimento global de um catalisador industrial; projeto dos constituintes primários de um catalisador; projeto dos constituintes secundários de um catalisador; escolha do suporte.

Bibliografia

- Michel Boudart and G. Djéga Mariadassou. Kinetics of Heterogeneous Catalytic Reactions, Princeton University Press, 1984.
- Gabor A. Somorjai. Introduction to Surface Chemistry and Catalysis, John Wiley & Sons, Inc, 1994.
- Catalyst Design: Progress and Perspectives, Edited by L. Louis Hegedus, John Wiley & Sons, Inc, 1987.
- David L. Trimm. Design of Industrial Catalysts, Elsevier Scientific Publishing Company, 1980.
- P. W. Atkins. Physical Chemistry, W. H. Freeman and Company, 1978.
- Oleg V. Krilov. Catalysis by Nonmetals: Rules for Catalyst Selection, Academic Press, 1970.
- B. N. Figgis. Introduction to Ligand Fields, Robert E. Krieger Publishing Company, 1986.

Henry Wise and Jacques Oudar. Material Concepts in Surface Reactivity and Catalysis, Acad. Press, 1990.
Catalysis, Science and Technology, vol. 2, Edited by John R. Anderson and Michel Boudart, Springer-Verlag, 1981.