UNIVERSIDADE ESTADUAL DE SANTA CRUZ - UESC
PRÓ-REITORIA DE PÓS-GRADUAÇÃO E PESQUISA – PROPP
Departamento de Engenharias e Computação - DEC
Mestrado em Ciência, Inovação, e Modelagem em Materiais - PROCIMM

PROGRAMA DE DISCIPLINA

CÓDIGO	SEMESTRE	DISCIPLINA
DEX100296	2026.2	CATÁLISE HETEROGÊNEA

C/HORÁRIA	CRÉDITOS	PERÍODO	PROFESSOR
T - 60	4	Diurno	Rosenira Serpa da Cruz Bruna Ezequielle Bernardes Costa
P - -	-		
TOTAL 60	4	**Ass.**	

EMENTA	Histórico e fundamentos da catálise heterogênea. Natureza e características dos catalisadores heterogêneos (mássicos e suportados). Fundamentos de adsorção física e química e sua relação com os sítios ativos. Propriedades fundamentais, classificação e critérios de seleção de catalisadores. Projeto, desenvolvimento e conformação de catalisadores. Métodos de caracterização textural, estrutural, química e superficial de catalisadores sólidos. Cinética das reações catalíticas heterogêneas: mecanismos, parâmetros cinéticos e efeitos de transporte de massa e calor. Correlação entre acidez, atividade e seletividade em reações-modelo. Desativação, regeneração e vida útil de catalisadores. Fundamentos, aplicações tecnológicas e ambientais e tendências atuais da catálise heterogênea.

OBJETIVOS: Apresentar os fundamentos da ciência da catálise, com ênfase na catálise heterogênea, partindo dos conceitos básicos de seleção, preparação, caracterização e cinética de reações catalíticas. Estudar os aspectos de síntese, estrutura e propriedades físico-químicas dos diferentes tipos de catalisadores heterogêneos, correlacionando-os com sua adequação aos respectivos processos catalíticos. Introduzir os métodos fundamentais de caracterização de catalisadores sólidos e correlacionar parâmetros como atividade e seletividade com a acidez dos catalisadores em reações-modelo. Por fim, enquadrar os processos catalíticos na tecnologia moderna, com apresentação de casos de estudo e aplicações em catálise heterogênea.

METODOLOGIA: Aulas expositivas, discussão de artigos científicos e revisões, resolução de exercícios e seminários

AVALIAÇÃO:

Crédito 1. Seminários: Conceitos fundamentais/estudo de caso baseado em artigos recentes; Crédito 2. Avaliação escrita; Crédito 3. Seminários: Síntese e caracterização de catalisadores/estudo de caso baseado em artigos recentes. Crédito 4. Avaliação escrita

CONTEÚDO PROGRAMÁTICO

Unidade 1 — Introdução à Catálise

- Importância e tendências na área; aplicações industriais e mercado mundial; aspectos históricos; principais periódicos; definições e terminologia; catálise homogênea, heterogênea e enzimática; exemplo integrador: síntese da amônia.

Unidade 2 — Fundamentos de Adsorção e Sítios Ativos

- Fisissorção × quimissorção; termodinâmica da adsorção; isotermas de Langmuir, Freundlich e Temkin; adsorção associativa e dissociativa; tipos de isotermas (I–V); ligação entre adsorção, sítios ativos e mecanismo da reação catalítica.

Unidade 3 — Síntese e Estrutura de Catalisadores

- Aspectos gerais de preparação: precipitação, coprecipitação, impregnação, troca iônica, sol-gel e deposição química; catalisadores mássicos × suportados; componentes do catalisador (fase ativa, suporte e promotores); natureza dos sítios ativos (ácido, básico e redox); influência da composição química na acidez; estudo de sílica, alumina e zeólitas.

Unidade 4 — Seleção e Desenvolvimento de Catalisadores

- Critérios de seleção: atividade, seletividade, estabilidade e custo; interação catalisador–suporte–reator; metodologia de desenvolvimento (da necessidade de processo à planta); conformação e formulação (pellets, extrusados, granulação, monolitos); adequação do catalisador ao processo catalítico.

Unidade 5 — Métodos de Caracterização de Catalisadores

- Métodos térmicos: TGA/DTG, DTA e DSC
- Espectroscópicos: FT-IR e adsorção de piridina (acidez)
- Estruturais: difração de raios X (DRX)
- Texturais: isotermas de adsorção de N_2, BET e BJH
- Quimiossorção para dispersão metálica, técnicas com temperatura programada (TPD/TPR/TPO), microscopia (SEM/TEM) e XPS

Unidade 6 — Cinética de Reações Catalíticas

- Lei de velocidade e parâmetros cinéticos; energia de ativação aparente; mecanismos de Langmuir-Hinshelwood, Eley-Rideal e Mars-van Krevelen; atividade específica e frequência de rotação (TOF); noções de efeitos de transporte de massa e calor, difusão intrapartícula e fator de efetividade; tipos de reatores catalíticos (leito fixo, fluidizado, contínuo).

Unidade 7 — Atividade, Seletividade e Acidez em Reações-Modelo

- Reações-modelo ácidas: desidratação de 2-propanol, craqueamento de cumeno, isomerização de n-hexano; correlação entre acidez (medida por piridina/TPD) e atividade/seletividade; seletividade de forma em zeólitas.

Unidade 8 — Desativação, Regeneração e Casos de Estudo Industriais

- Mecanismos de desativação: coqueamento, envenenamento, sinterização e desgaste mecânico; regeneração e vida útil do catalisador
- Casos de estudo: síntese da amônia, reforma a vapor e WGS, síntese de metanol, Fischer-Tropsch, craqueamento catalítico (FCC) e hidrotratamento
- Catálise ambiental: catalisador de três vias, redução seletiva de NOx (SCR) e controle de VOCs
- Tendências atuais (Temas para seminários): materiais porosos avançados, aproveitamento de CO_2 e hidrogênio verde.

REFERÊNCIA BIBLIOGRÁFICA

BOND, G. C. Heterogeneous catalysis: principles and applications. 2. ed. Oxford: Clarendon Press, 1987. ISBN 978-0-19-855273-9.

CHORKENDORFF, I.; NIEMANTSVERDRIET, J. W. Concepts of modern catalysis and kinetics. 3. ed. Weinheim: Wiley-VCH, 2017. ISBN 978-3-527-33268-9.

ERTL, G.; KNÖZINGER, H.; SCHÜTH, F.; WEITKAMP, J. (ed.). Handbook of heterogeneous catalysis. 2. ed. Weinheim: Wiley-VCH, 2008. 8 v. ISBN 978-3-527-31241-3.

FOGLER, H. S. Elements of chemical reaction engineering. 6. ed. Boston: Pearson, 2020. ISBN 978-0-13-548622-2.

GRÜNERT, Wolfgang; KLEIST, Wolfgang; MUHLER, Martin. Catalysis at surfaces. Berlin: De Gruyter, 2023. ISBN 978-3-11-063247-7.

RICHARDSON, J. T. Principles of catalyst development. New York: Plenum Press, 1989. ISBN 978-0-306-43050-2.

SCHMAL, Martin. Heterogeneous catalysis and its industrial applications. Cham: Springer, 2016. ISBN 978-3-319-09250-8.

SHAIKH, Abdullah A. Heterogeneous catalysis: solid catalysts, kinetics, transport effects, catalytic reactors. 2. ed. Berlin: De Gruyter, 2023. ISBN 978-3-11-103248-1.

THOMAS, J. M.; THOMAS, W. J. Principles and practice of heterogeneous catalysis. 2. ed. Weinheim: Wiley-VCH, 2015. ISBN 978-3-527-33307-5.

VEDRINE, Jacques C. (ed.). Characterization of solid materials and heterogeneous catalysts: from structure to surface reactivity. Weinheim: Wiley-VCH, 2012. 2 v. ISBN 978-3527330751.

ALZA, Esther; DIÉGUEZ, Montserrat; PERICÀS, Miquel A. (ed.). Catalytic heterogeneous and homogeneous methods in flow chemistry: part A. Amsterdam: Elsevier, 2025. (Advances in Catalysis, v. 76) [

HU, Jianli; REDDY, Benjaram M. (ed.). Advances in microwave-assisted heterogeneous catalysis. Cambridge: Royal Society of Chemistry, 2023. (Catalysis Series).

KAMER, Paul C. J.; VOGT, Dieter; THYBAUT, Joris W. (ed.). Contemporary catalysis: science, technology, and applications. Cambridge: Royal Society of Chemistry, 2017.

SPIVEY, James; HAN, Yi-Fan; SHEKHAWAT, Dushyant (ed.). Catalysis: volume 35. Cambridge: Royal Society of Chemistry, 2024. (Specialist Periodical Reports).

Periódicos em catálise para estudos de caso:

- Journal of Catalysis. Amsterdam: Elsevier.

- ACS Catalysis. Washington, DC: American Chemical Society.
- Nature Catalysis. London: Springer Nature.
- Applied Catalysis A: General. Amsterdam: Elsevier.
- Applied Catalysis B: Environmental. Amsterdam: Elsevier.
- Catalysis Science & Technology. Cambridge: Royal Society of Chemistry.
- Catalysis Today. Amsterdam: Elsevier.
- ChemCatChem. Weinheim: Wiley-VCH, dentre outros.