

## LSRE | Laboratório de Processos de Separação e Reacção

Faculdade de Engenharia da Universidade do Porto

Rua Dr. Roberto Frias

4200-465 Porto

PORTUGAL

Tel.: (351) 22 508 1669

Fax: (351) 22 508 1674

URL: <http://lsre.fe.up.pt/LA/>

**Director:** Alírio Egídio Rodrigues

### Linhas temáticas:

- Novas tecnologias de separações cíclicas e de reacção para as indústrias química e farmacêutica
- Síntese e formulação de produtos de alto valor acrescentado

### Parcerias:

LCM | Laboratório de Catálise e Materiais – coordenador: José Luís Figueiredo

### Missão:

Contribuir para o desenvolvimento do conhecimento científico e tecnológico nacional e europeu na área de Processos de Separação e Reacção em Engenharia Química.

N.º Investigadores (31/12/2009): **134** | N.º doutorados (31/12/2009): **56** | Classificação na avaliação internacional da FCT: **Excelente**

---

As duas linhas temáticas de acção a seguir descritas envolvem conhecimentos existentes no conjunto das áreas de actividade do LSRE e do LCM. Para além de uma pequena descrição de cada linha temática de acção são dados exemplos concretos de actividades de grande importância actual e de interesse para a indústria química e afins.

### ***Novas tecnologias de separações cíclicas e de reacção para as indústrias química e farmacêutica***

A grande experiência do LSRE nas áreas de processos de separação e reacção é o motor de vários projectos nesta área, para os quais o LSRE está equipado de uma forma única em Portugal. De forma complementar o LCM tem competência no campo da preparação e desenvolvimento de catalisadores e adsorventes para aplicações em processos químicos diversificados.

- Processos cíclicos de separação e reacção como são o Leito Móvel Simulado (Simulated Moving Bed - SMB) e o Reactor/Adsorvedor de Leito Móvel Simulado (Simulated Moving Bed Reactor - SMBR) e as tecnologias de Adsorção com Modulação de Pressão (Pressure/Vacuum Swing Adsorption - PSA/VSA) ou

o Reactor/Adsorvedor com Modulação de Pressão (Pressure Swing Adsorptive Reactor - PSAR) estão actualmente na vanguarda dos processos que utilizam tecnologias limpas.

Exemplos de aplicações industriais de SMB incluem as separações quirais (indústria farmacêutica e de química fina), a separação e inversão de açúcares (indústria agro-alimentar) e a separação de xilenos (indústria química). O LSRE está equipado com HPLC laboratorial, cromatografia preparativa e SMB piloto para ajuda ao desenvolvimento experimental de separações quirais.

Exemplos de aplicações industriais de PSA/VSA relevantes são a separação de n/iso parafinas com vista ao aumento do índice de octano da gasolina, a separação propano/propileno, e o steam-reforming de metano com adsorção de dióxido de carbono em PSAR com vista à produção de hidrogénio. O LSRE pode contribuir para o desenvolvimento de processos cíclicos adsorptivos possuindo o equipamento que permite adquirir dados de equilíbrio de adsorção (técnicas gravimétricas com microbalança e balança de suspensão magnética) e difusividades. O LCM tem competência no desenvolvimento de peneiros moleculares de carbono para separação de gases por PSA.

- Mistura em reactores químicos inclui a caracterização cinética e o desenvolvimento de processos que envolvam reacções complexas rápidas; estudos cinéticos usando Stopped-Flow Analysis (SFA); o estudo hidrodinâmico e caracterização experimental da micromistura usando Laser Doppler Velocimetry (LDV); a simulação de reactores químicos usando Computational Fluid Dynamics (CFD).

Exemplos de processos industriais de grande importância económica incluem a produção de poliuretano pela técnica de Reaction Injection Molding (RIM), uma tecnologia na indústria dos moldes para grandes peças, nomeadamente no fabrico de painéis e acessórios para a indústria automóvel.

- Reactores multifásicos e reactores de leito fixo são o objecto de estudo experimental usando técnicas avançadas de LDV e Particle Image Velocimetry (PIV) e de modelização e simulação usando técnicas inovadoras de CFD e de Modelos de Rede para desenvolvimento de parâmetros óptimos geométricos de enchimentos estruturados. A obtenção de dados cinéticos para reacções catalíticas heterogéneas líquido/sólido é feita numa instalação automatizada com medição on-line de concentrações.

Como aplicações incluem-se os reactores de borbulhamento, com ou sem enchimento, para processos que vão desde destilação reactiva, síntese orgânica Fischer-Tropsch até à desulfuração, hydro-cracking, hidrogenação e oxidação de compostos orgânicos. Exemplos de aplicações industriais na área de reactores catalíticos incluem a produção de aditivos oxigenados para gasolinas (MTBE, ETBE, TAME). O LCM tem vasta experiência na preparação e caracterização de catalisadores, bem como no estudo dos eventuais processos de desactivação a que estarão sujeitos durante o período de operação.

- Medição e previsão de propriedades termodinâmicas e de transporte incluindo solubilidade e equilíbrio de fases de electrólitos e não-electrólitos (biomoléculas) em solventes puros e misturas, propriedades para a separação com fluidos supercríticos (SFE) nomeadamente coeficientes de difusão de componentes de produtos naturais, viscosidades de componentes de petróleo bruto a altas pressões e temperaturas.

- Engenharia do ambiente orientada para a aplicação de princípios físicos, químicos e biológicos e da ciência da engenharia à avaliação e controlo da qualidade da água, águas residuais industriais e lamas, tratamento de efluentes industriais, prevenção e controlo da poluição industrial, apoio à implementação de tecnologias menos poluentes e reciclagem/reutilização de produtos residuais. Como aplicações incluem-se os processos de oxidação catalítica por via húmida, processos de oxidação catalítica fotoquímica, desenvolvidos para aplicações a efluentes industriais com cargas orgânicas específicas

como sejam as águas ruças e as águas residuais fortemente coradas da indústria têxtil. No campo da qualidade do ar e desenvolvimento sustentado, salientam-se os projectos do LCM no aperfeiçoamento de tecnologias avançadas para a redução de emissões de NO<sub>x</sub> e N<sub>2</sub>O das unidades geradoras de energia por combustão. Ainda na área da protecção ambiental e preservação do meio ambiente, refira-se a contribuição do LCM na concepção e produção de novos catalisadores para eliminação de compostos orgânicos voláteis.

- A modelização e simulação numérica de processos constitui uma área de conhecimento do LSRE que conduziu ao desenvolvimento de pacotes computacionais para vários processos (SMB, SMBR, SAXS para PSA/VSA/TSA, Parametric Pumping) e é uma ferramenta fundamental no projecto de equipamento de separação e reactores químicos; em particular foram desenvolvidas técnicas de Moving Finite Element Method (MFEM) que permitiram o desenvolvimento de software para a simulação e previsão de condições de operação de processos complexos como o SMB e o SMBR.

### ***Síntese e formulação de produtos de alto valor acrescentado***

As experiências combinadas do LSRE e do LCM nesta área incluem diversos projectos de concepção e produção de catalisadores de elevada eficiência, desenvolvimento de processos e formulação de produtos de alto valor acrescentado.

- Síntese de produtos de alto valor acrescentado com vários objectivos como por exemplo: a valorização de resíduos agro-industriais para produção de dextrano e frutose; a produção de vanilina a partir da lenhina extraída do licor negro da indústria de pasta de papel; a síntese de acetais usados na indústria de perfumes. Neste contexto, o LCM tem desenhado e desenvolvido catalisadores metálicos suportados em carvão para processos de hidrogenação assimétrica e selectiva
- Engenharia de perfumes e aromas envolve várias etapas como são a extracção de óleos essenciais de plantas aromáticas portuguesas por extracção supercrítica, a separação dos diversos componentes por cromatografia preparativa, e o design do produto final. Em todas estas etapas são usadas técnicas de cromatografia gasosa/espectrometria de massa (GC-MS) para a caracterização dos produtos.
- Engenharia das reacções poliméricas inclui a produção de resinas alquídicas de base aquosa, e a produção contínua de dispersões aquosas de polímeros poliuretano-ureia. Exemplos de aplicação destes produtos são a formulação de tintas sem solventes orgânicos e de adesivos para as indústrias do calçado e da cortiça.
- Desenvolvimento de materiais nano-estruturados incluindo a produção de nanotubos, nanoesferas e nanofilamentos de carbono, bem como a produção de catalisadores metálicos de elevada dispersão por CVD e a síntese “ship in the bottle” de catalisadores organometálicos. As potenciais aplicações destes materiais estendem-se a vários domínios como o dos materiais avançados; o da electrónica, para a elaboração de microprocessadores ou dispositivos de imagem como os ecrãs planos de TV; o do ambiente, para o fabrico de materiais filtrantes microporosos; o da energia, para as baterias de hidrogénio da indústria automotiva; e finalmente o da química de superfícies e adsorção. O LCM tem actualmente uma larga e comprovada experiência no domínio da preparação em fase gasosa e consequente caracterização de fibras e nanofibras de carbono, e mantém relações de cooperação

internacionais que o colocam numa posição única a nível nacional neste domínio de vanguarda da ciência.