



DECN

DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA
E CIÊNCIAS NUCLEARES

TÉCNICO LISBOA

Relatório de Actividades

21 de Março de 2014 / 20 de Março de 2017

Relatório elaborado nos termos dos artigos 39º e 41º do
Decreto-Lei no 124/99, de 20 de Abril

Nuno Rombert Pinhão
Investigador Auxiliar

Índice

Resumo.....	4
Actividades de Investigação.....	6
Temas de trabalho.....	6
Conversão de metano por plasma.....	6
Ajuste de secções eficazes de colisão electrónica.....	6
Interacção de plasmas com líquidos.....	7
Outros.....	7
Coordenação ou participação em projectos de I&D.....	7
Trabalhos publicados.....	8
Actividades docentes e de formação.....	10
Docência.....	10
Orientação de teses.....	10
Participação em júris académicos.....	10
Outras actividades C&T.....	11
Arbitragem de publicações.....	11
Organização de Conferências.....	11
Actividades de Gestão.....	12

Resumo

O presente relatório reporta-se à actividade desenvolvida entre 21 de Março de 2014 e de de Março de 2017, no quadro do grupo de Electrónica e Descargas em Gases do IPFN e do Departamento de Ciências e Engenharia Nuclear do IST e cobre as seguintes áreas de intervenção:

- Investigação aplicada em física e química das descargas eléctricas em gases;
- Actividades docentes e de formação;
- Actividades de gestão no âmbito de órgãos do IST.

O trabalho de investigação desenvolveu-se no domínio dos chamados plasmas não-térmicos e durante o triénio três temas concentraram a minha atenção:

- o estudo de misturas de metano e um oxidante (dióxido de carbono) através de uma descarga de barreira dieléctrica, à pressão atmosférica, com vista à produção de gás de síntese e outros hidrocarbonetos. Este problema – a utilização de metano e/ou dióxido de carbono para a produção de hidrogénio ou hidrocarbonetos líquidos – enquadra-se na busca de fontes alternativas de combustíveis, de preferência líquidos, que possam vir a substituir os obtidos a partir do petróleo;
- a medida de propriedades de transporte electrónicas e ajuste de secções eficazes de colisão, sendo dada particular atenção ao dióxido de carbono face à sua relevância ambiental e à necessidade de dados de base mais fidedignos para busca de vias para a sua conversão com recurso a plasmas;
- a aplicação de plasmas ao tratamento de líquidos, com o estudo da degradação de produtos farmacêuticos em efluentes. Esta é uma nova área de aplicação de plasmas que surgiu na comunidade científica recentemente e que assim, se procura acompanhar.

Quanto às actividades de ensino continuei a colaborar com o Departamento de Física do IST na docência de uma cadeira do 1º ciclo, além de colaborações pontuais numa unidade curricular do programa Doutoral em Física e Engenharia dos Plasmas, APPLAuSE, e de um outro num curso do programa ATHENS (Advanced Technology Higher Education Network). Estive também envolvido na preparação da proposta de Mestrado em Protecção e Segurança Radiológica onde sou responsável por uma disciplina que terá início em Setembro próximo. Estou ainda envolvido na orientação de um aluno de Mestrado e dois de Doutoramento.

No campo das actividades de gestão, integro a Comissão Executiva do Departamento de Engenharia e Ciências Nucleares e fui membro da Assembleia de Escola no mandato anterior.

Actividades de Investigação

Temas de trabalho

Conversão de metano por plasma

A utilização do gás natural como fonte – directa ou indirecta – de hidrocarbonetos mais complexos tem sido uma das áreas de intensa investigação nos últimos anos. Uma das vias que tem sido estudada é a utilização de plasmas não-térmicos, isolados ou em associação com catalisadores, para a produção de gás de síntese.

Também a conversão de CO₂ noutros hidrocarbonetos é uma área de investigação activa sendo vista como uma possível solução para o problema do armazenamento de energia produzida por via solar ou eólica, minorando os problemas de intermitência, sazonalidade e transporte da energia produzido por estas vias. Face à actualidade e importância deste temática tenho vindo a desenvolver investigação nesta área, centrada no estudo de misturas de metano com um oxidante (oxigénio ou dióxido de carbono) com vista à compreensão dos processos de cinética envolvidos e à optimização das condições experimentais. Os estudos têm-se concentrado no estudo de misturas CH₄/CO₂ com um gás raro, na influência da temperatura do gás, no tipo de excitação do plasma e na determinação da temperatura do gás por espectrometria óptica e envolvem quer trabalho experimental quer de modelação.

Ajuste de secções eficazes de colisão electrónica

Continuei a desenvolver trabalho no campo da medida de parâmetros de transporte electrónicos e ajuste de secções eficazes de colisão dos electrões em gases, em colaboração com colegas do Institute for Solid State Physics and Optics de Budapeste e do INP de Greifswald. Face ao presente interesse científico em torno do dióxido de carbono, procedeu-se à revisão das secções eficazes neste gás tendo como base novas medidas experimentais da velocidade de deriva, componente longitudinal do tensor de difusão e da frequência de ionização efectiva em CO₂, obtidas em Budapeste numa gama muito larga do campo eléctrico reduzido ($15 \text{ Td} \leq E/N \leq 2260 \text{ Td}$). O estudo revelou que nenhum dos conjuntos de secções eficazes publicados se mostra completamente satisfatório sendo necessário a sua revisão tendo em conta os novos resultados experimentais. Nesta análise comparativa deu-se particular atenção ao jogo de secções eficazes recentemente proposto pelo grupo do IPFN onde me integro.

Este trabalho de colaboração deverá prosseguir ao longo do próximo ano.

Interacção de plasmas com líquidos

Prosseguiu o trabalho iniciado em 2014 no âmbito da acção COST TD-1208 “Electrical Discharges with Liquids for Future Applications”. Em colaboração com o *Dipartimento de Scienze Chimiche* da Universidade de Pádua realizou-se um estudo comparativo da degradação de um composto farmacêutico (ácido clofíbrico) em solução aquosa, por radiólise gamma e por um plasma em contacto com o líquido. No seguimento deste trabalho desenvolveu-se um modelo cinético genérico desta degradação, válido quer esta tenha lugar por radiólise quer por plasma que será publicado em breve.

Outros

Continuou o desenvolvimento de software para estudo de plasmas, quer dos códigos já existentes (PlasmaKin e Swarm) quer através da participação num projecto em curso. Ainda neste âmbito participo num exercício internacional (“Round Robin”) de comparação de códigos para a simulação de plasmas, em curso.

No que respeita ao desenvolvimento de meios experimentais, no âmbito do projecto de conversão de metano foi desenvolvido um sistema de controlo das condições experimentais, aquisição e tratamento de dados e, em colaboração com colegas do ISEL, um modulador de alta tensão que permite produzir impulsos rápidos rectangulares até 7 kV. Está em curso a recuperação e adaptação do corpo de um espectrómetro UV-Vis Jobin-Yvon 600, estando concluído o sistema de movimentação do monocromador e praticamente concluído o projecto e construção das slits de entrada e saída do feixe (em falta).

Coordenação ou participação em projectos de I&D

Durante o triénio fui responsável por um projecto nacional:

Título: Aumento da Eficiência Energética na Conversão de Metano por Plasmas (AEECMP)

Entidade financiadora: FCT

Referência: PTDC/FIS-PLA/2135/2012

Período de execução: 2013 – Novembro/2015

O projecto explorou diferentes vias para melhorar a eficiência energética na produção de Syngas em reactores que produzem plasma não-térmicos, usando uma configuração de descarga de barreira dieléctrica (DBD) à pressão atmosférica e misturas de metano com outros gases (um oxidante e um gás raro) em diferentes proporções. Foi estudado o efeito de diluição num gás raro e a utilização de fontes pulsadas rápidas.

Particpei ainda nos seguintes projectos:

Título: Plataforma de ensaios para aplicações ambientais e biológicas de base plasma (KIT-PLASMEBA)

Responsável: Doutor Luís Lemos Alves (IST)

Referência: PTDC/FIS-PLA/1243/2014 (em curso)

Título: Plasmas de CO₂: um meio favorável para energias renováveis

Responsável: Doutor Vasco A. Guerra (IST)

Referência: PTDC/FIS-PLA/1420/2014 (em curso)

Trabalhos publicados

Durante o período abrangido por este relatório foram publicados trabalhos, dos quais 3 artigos em revistas internacionais, 5 comunicações orais das quais duas convidadas, 2 em “extended proceedings” de conferências internacionais, 6 apresentações em poster em conferências internacionais e 1 numa conferência nacional.

- J1. André Janeco, Nuno R. Pinhão, and Vasco Guerra. Electron Kinetics in He/CH₄/CO₂ Mixtures Used for Methane Conversion. *The Journal of Physical Chemistry C*, **119**(1):109–120, 2015, doi: 10.1021/jp509843e
- J2. N. Pinhão, A. Moura, J.B. Branco, and J. Neves. Influence of gas expansion process parameters in non-thermal plasma plug-flow reactors: A study applied to dry reforming of methane. *International Journal of Hydrogen Energy*, 41(22):92459255, 2016, doi: 10.1016/j.ijhydene.2016.04.148
- J3. M. Vass, I. Korolov, D. Loffhagen, N. Pinhão, and Z. Donkó. Electron transport parameters in CO₂: Scanning drift tube measurements and kinetic computations. *Plasma Sources Science and Technology*, in press, 2017.
- O1. Nuno R. Pinhão, André Janeco, Branco J.B., and V. Guerra. *Plasma-assisted conversion of methane and carbon dioxide: Improving the energy efficiency. Workshop: CO₂ Dissociation - Reactive Plasmas for Building Molecules*, Tatihou, France. Oral communication, 2014.
- O2. Nuno R. Pinhão, André Janeco, Branco J.B., and V. Guerra. *Study of the electron kinetics and modeling of discharges used for methane conversion*. Solvay Workshop: Plasma for Environmental Application, invited communication, 2014.
- O3. André Janeco, V. Guerra, and Nuno R. Pinhão. *A Global Model for DBD Conversion of CH₄/CO₂*. International Conference of Plasma Physics 2014, oral communication (A. Janeco), 2014.
- O4. Nuno R. Pinhão, Branco J.B., Guerra V., Janeco A., Neves J., Redondo L., and Canacsinh H. *Understanding Non-thermal Plasma Methane-CO₂ conversion: principles, processes and energy efficiency*. 6th International Conference on Advanced Plasma Technologies, invited communication, 2016.

- O5. Nuno R. Pinhão and J. Madureira. *The degradation kinetics of organic compounds in aqueous solutions treated by plasma or gamma radiation*. International Conference on Plasmas with Liquids (ICPL 2017), oral communication, 2017
- P1. M. Grofulović, D. Loffhagen, N.R. Pinhão, L.L. Alves, V. Guerra, I. Korolov, M. Vass, and Z. Donkó. *Intercomparison of calculation techniques of the electron Boltzmann equation for the analysis of swarm parameters in CO₂*. In Proceedings - 23rd Europhysics Conference on Atomic and Molecular Physics of Ionized Gases, Bratislava, Slovakia, 2016
- P2. J. Madureira, R. Melo, E. Ceriani, S. Cabo Verde, E. Marotta, N. Pinhão, C. Paradisi, and F.M.A. Margaça. *Oxidation of clofibric acid in water by electrical discharge and gamma radiation*. In Proceedings - 23rd Europhysics Conference on Atomic and Molecular Physics of Ionized Gases, Bratislava, Slovakia, 2016
- P3. A Moura, J. Neves, Branco J., Ramses Snoeckx, and Nuno R. Pinhão. *Conversão de CH₄ e CO₂ por plasma: Influência da temperatura do gás*. In Proceedings – Física 2014, Lisboa
- P4. N.R. Pinhão, Moura A., J. Neves, Branco J., Redondo L., and Canacsinh H. *Measurement of the gas temperature in DBD discharges in CH₄/CO₂/He mixtures: influence of power supply and helium concentration*. In Proceedings - 23rd Europhysics Conference on Atomic and Molecular Physics of Ionized Gases, Bratislava, Slovakia, 2016
- P5. Nuno R. Pinhão *Effect of the vibrational population of polyatomic molecules on the electron kinetics: the cases of CH₄ and CO₂*. In Proceedings - XXII ESCAMPIG, Greifswald, 2014.
- P6. Nuno R. Pinhão. *Dry reforming in He/CH₄/CO₂ mixtures: the role of the rare gas*. In Proceedings - ICPIG 2015, Iasi, Romania, 2015
- P7. Nuno R. Pinhão, Moura A., Branco J.B., and J. Neves. *Conversion, selectivity, yield and specific energy in DBD reactors: are they well measured?* In Proceedings - ISPC 2015 Symposium, Antwerp, Belgium, 2015
- P8. Ramses Snoeckx and Nuno R. Pinhão. *Paschen curves and analytical expressions for the electron collision rate coefficients in CH₄/CO₂ and CH₄/O₂ mixtures*. In Proceedings - International Symposium on Non-Thermal/Thermal Plasma Pollution Control Technology & Sustainable Energy, Dalian, China, 2014.
- P9. M. Vass, I. Korolov, D. Loffhagen, N. Pinhão, and Z. Donkó. *Measurement and kinetic computations of electron transport parameters in CO₂*. In Proceedings - SAPP XXI, Strbské Pleso, Slovakia, 2017.

Actividades docentes e de formação

Docência

Ao longo do triénio prossegui a minha colaboração com o departamento de Física do IST, como equiparado a professor convidado, nas equipas da disciplina de Mecânica e Ondas para cursos do 1º ciclo:

- Mecânica e Ondas (MO63645) 2º semestre de 2014 - MEEC
- Mecânica e Ondas (MO65179) 1º semestre de 2017 - LEIC-A

De referir que, o objectivo da participação em 2017 foi o de implementar questionários e séries de problemas online, de correcção automática, no sistema Fenix.

Ao nível de acções do 3º ciclo, colaborei em aulas de duas edições do programa de Doutoramento em física de plasmas, **APPLAuSE**, na disciplina de *Fundamentals of Plasma Physics* tendo-me ocupado do módulo *Single particle motion in E and B fields*.

Uma versão reduzida desse mesmo módulo tem sido integrada ao curso do programa **ATHENS** para intercâmbio internacional de estudantes, oferecido pelo IST na área de plasmas, tendo já decorrido três edições deste curso.

Estive também envolvido na preparação da proposta de Mestrado em Protecção e Segurança Radiológica onde sou responsável pela disciplina de Sistemas e Técnicas de Detecção da Radiação que terá início em Setembro próximo.

Orientação de teses

Durante o triénio fui co-orientador de dois alunos de Doutoramento e um de Mestrado:

- André R. Janeco, Doutoramento em Física, *Study and optimization of a dielectrical barrier discharge system at atmospheric pressure for methane oxidation* (em co-orientação com V. Guerra) Nota: o aluno solicitou a interrupção temporária dos estudos no início de 2016;
- Loann Terraz, Doutoramento em Física, *N₂ and H₂O influence on CO₂ dissociation in non-equilibrium plasmas*, início em 1/2/2017 (em co-orientação com V. Guerra);
- Rita Fonseca Faustino, Mestrado (MEMat) *Characterization of WC-Cu cermet materials as thermal barriers*, início em 1/3/2017 (em co-orientação com Marta S. Dias).

Participação em júris académicos

Particpei como arguente e membro do júri, respectivamente nas seguintes provas de Doutoramento:

- Robby Aerts, *Experimental and computational study of dielectric barrier discharges for environmental applications*, 2014, University of Antwerp;

- Margarida I.C. Caldeira, *Design, Construction, Characterization and Bilateral Comparison of an Air-Kerma Cavity Standard*, 2016, IST

Integrei ainda os júris das seguintes teses de Mestrado:

- Pedro Arsénio Nunes Aleixo Viegas, *Ionization in atmospheric-pressure helium plasma jets*, 2015, IST
- Duarte Rogado Nina, *Modelling Chlorine Plasmas*, 2016, IST (arguente)

Outras actividades C&T

Arbitragem de publicações

Durante o período em análise executei tarefas de arbitragem científica para as seguintes revistas:

- Plasma Processes and Polymers;
- The European Physical Journal Applied Physics;
- British Journal of Applied Science & Technology;
- ACS Catalysis;
- Greenhouse Gases: Science and Technology;
- Energy Conversion and Management;
- Central European Journal of Chemistry.

Organização de Conferências

Desde 2016 faço parte do comité local de organização da ICPIG 2017 – International Conference on Phenomena in Ionized Gases que se realizará em Lisboa.

Actividades de Gestão

No campo das actividades de gestão, integro a Comissão Executiva do Departamento de Engenharia e Ciências Nucleares e fui membro da Assembleia de Escola no mandato anterior.