PEDRO HENRIQUE SILVA COSTA

PRODUÇÃO DE HIDROGÊNIO A PARTIR DE ÁCIDO FÓRMICO EMPREGANDO PALÁDIO REDUZIDO SUPORTADO EM KTiNbO₅

Monografia apresentada ao Departamento de Química da Universidade Federal de Viçosa, como parte das exigências para a conclusão do curso de Bacharelado em Química.

Orientadora: Profa. Dra. Renata Pereira Lopes Moreira.

RESUMO

COSTA, P. H. S. Projeto de conclusão do Curso de Bacharelado em Química. Universidade Federal de Viçosa, setembro, 2024. **Produção de hidrogênio a partir do ácido fórmico empregando paládio reduzido suportado em KTiNbO5.** Orientadora: Renata Pereira Lopes Moreira.

Neste trabalho produziu-se hidrogênio a partir de ácido fórmico utilizando partículas de paládio Pd reduzido decoradas em KTiNbO₅. As nanopartículas foram sintetizadas via redução química, utilizando-se borohidreto de sódio NaBH4. Após a preparação, o catalisador foi inserido em um sistema reacional onde a produção de hidrogênio foi quantificada através do deslocamento de água. Na otimização da reação, a quantidade de 10 mg,20mg, e 30mg de suporte (KTiNbO₅) sendo a de 10mg a que apresentou a maior taxa de conversão de hidrogênio. Além disso, a proporção de ácido fórmico/formiato de 1:3 de sódio, assim como concentração de ácido fórmico de 0,5mol/L, 0,8mol/L, 1,00 mol/L e 1,5mol/L foram testadas, sendo a 1,0mol/L a escolhida por não apresentar tantas diferenças da concentração de 1,5mol/L e tento em mente a ideia de se utilizar a menor quantidade de reagentes. A temperatura foi outro fator otimizado, variando-se dos valores de 30°C,40°C,50°C e 60°C, sendo a 60°C a temperatura escolhida, além da otimização a temperatura ajudou no cálculo da energia de ativação utilizando o método das velocidades iniciais com a linearização da equação de Arhenius, obtendo-se o valor de 50,915 kj/mol. Ensaios de captura de CO₂, um subproduto da reação, em solução de NaOH 20mol/L foi investigado, gerando a captura do CO2 por dissolução na solução, liberando o H2 para o dentro do reator. Uma inovação no projeto foi a ativação da reação utilizando um sistema de luz UV, o teste se mostrou promisso, tendo em vista a maior produção de H₂ utilizando a luz UV em um sistema com temperatura controlada de 60°C em relação a outro sistema sem na ausência da luz UV. Por fim, o reuso do catalisado foi investigado, contudo, houve uma queda expressiva no rendimento da reação no segundo e terceiro ciclo, sendo esse o único fator de ineficiência do KTiNbO₅ como suporte nessa reação.

Palavras-chaves: Produção de hidrogênio; ácido fórmico/formiato de sódio; catalisador de paládio.

ABSTRACT

COSTA, P. H. S. Final project for the Bachelor's Degree in Chemistry. Federal University of Viçosa, September, 2024. **Hydrogen production from formic acid using reduced palladium supported on KTiNbO**₅. Advisor: Renata Pereira Lopes Moreira.

In this work, hydrogen was produced from formic acid using reduced Pd palladium particles decorated in KTiNbO₅. The nanoparticles were synthesized via chemical reduction, using sodium borohydride NaBH₄. After preparation, the catalyst was inserted into a reaction system where hydrogen production was quantified through water displacement. In optimizing the reaction, the amount of 10 mg, 20 mg, and 30 mg of support (KTiNbO₅) was 10 mg, with the highest hydrogen conversion rate. Furthermore, the formic acid/sodium formate ratio of 1:3 as well as formic acid concentration of 0.5mol/L, 0.8mol/L, 1.00mol/L and 1.5mol/L were tested., with 1.0mol/L being chosen because it does not present so many differences from the concentration of 1.5mol/L and I keep in mind the idea of using the smallest amount of reagents. The temperature was another optimized factor, varying from values of 30°C, 40°C, 50°C and 60°C, with 60°C being the chosen temperature. In addition to the optimization, the temperature helped in calculating the activation energy using the initial speed method with the linearization of the Arhenius equation, obtaining a value of 50.915 kj/mol. CO₂ capture tests, a byproduct of the reaction, in a 20mol/L NaOH solution were investigated, generating the capture of CO₂ by dissolution in the solution, releasing H₂ into the reactor. An innovation in the project was the activation of the reaction using a UV light system, the test showed promise, considering the greater production of H₂ using UV light in a system with a controlled temperature of 60°C in relation to another system without of UV light. Finally, the reuse of the catalyst was investigated, however, there was a significant drop in the reaction yield in the second and third cycle, this being the only factor in the inefficiency of KTiNbO₅ as support in this reaction.

Keywords: Hydrogen production; formic acid/sodium formate; palladium catalyst.