

Introdução

A sociedade contemporânea vive um cenário de crise ambiental, muito devido aos colaterais dos combustíveis fósseis e poluentes na geração de energia, evidenciando a necessidade de uma transição energética.

Processos eletroquímicos podem ser usados na geração de combustíveis limpos e renováveis como a eletrólise de H_2O para a produção de hidrogênio verde e a redução de CO_2 .

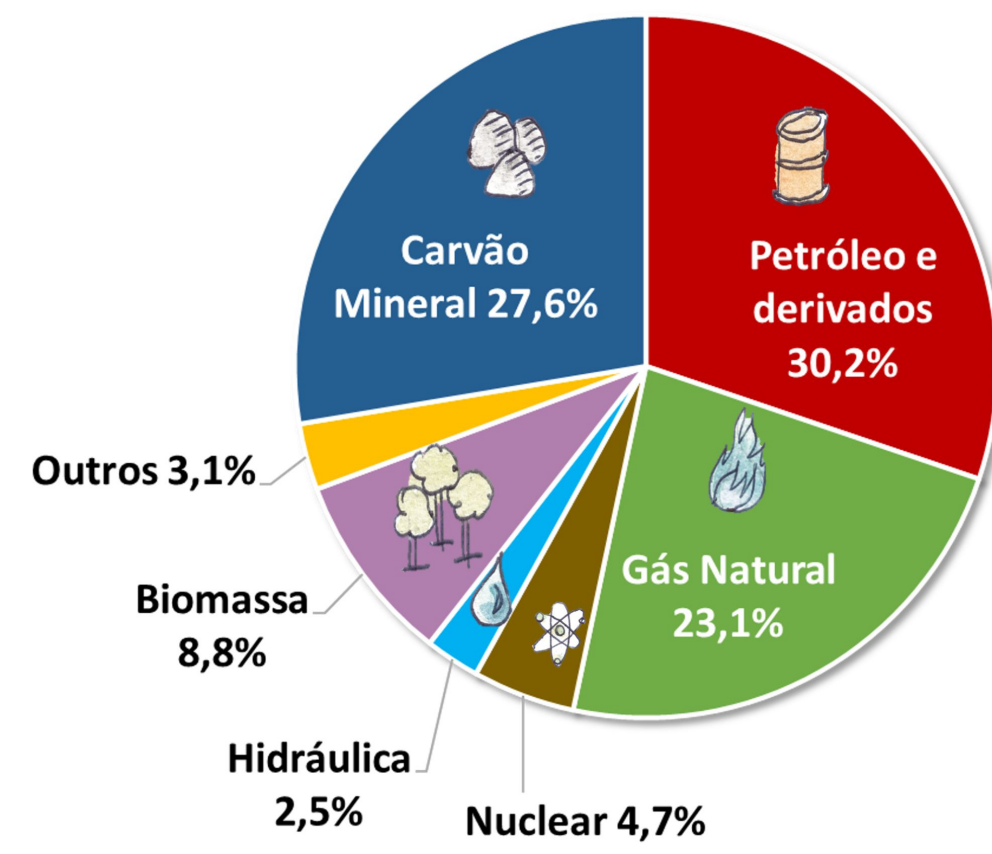
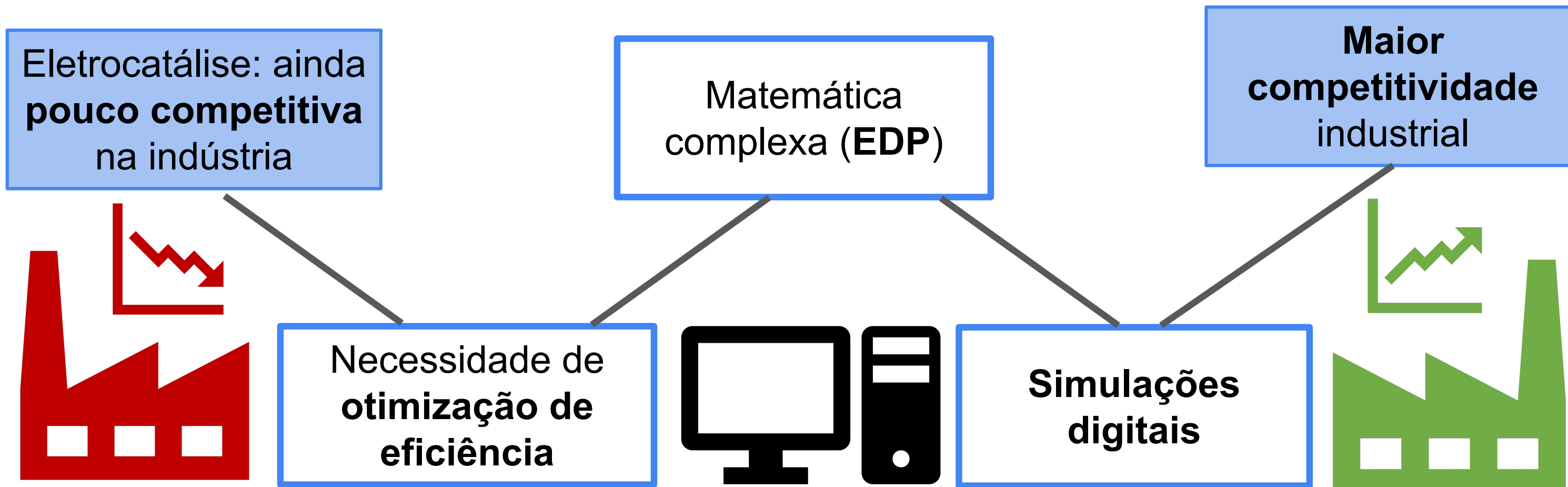


Figura 1. Matriz energética global em 2022. Fonte: Agência Internacional de Energia



Problema

Como projetar reatores eletrocatalíticos de maneira a torná-los mais eficientes energeticamente e economicamente viáveis, reduzindo o uso de catalisadores e preservando o desempenho do sistema?

Objetivo

Este estudo busca desenvolver e avaliar, por meio de simulações computacionais fundamentadas no método de elementos finitos, designs racionais para reatores eletrocatalíticos com enfoque em uma produção mais eficiente de combustíveis limpos e renováveis, com redução do uso de catalisadores e otimização do transporte de massa.

Metodologia

Simulações computacionais Tratamento de dados

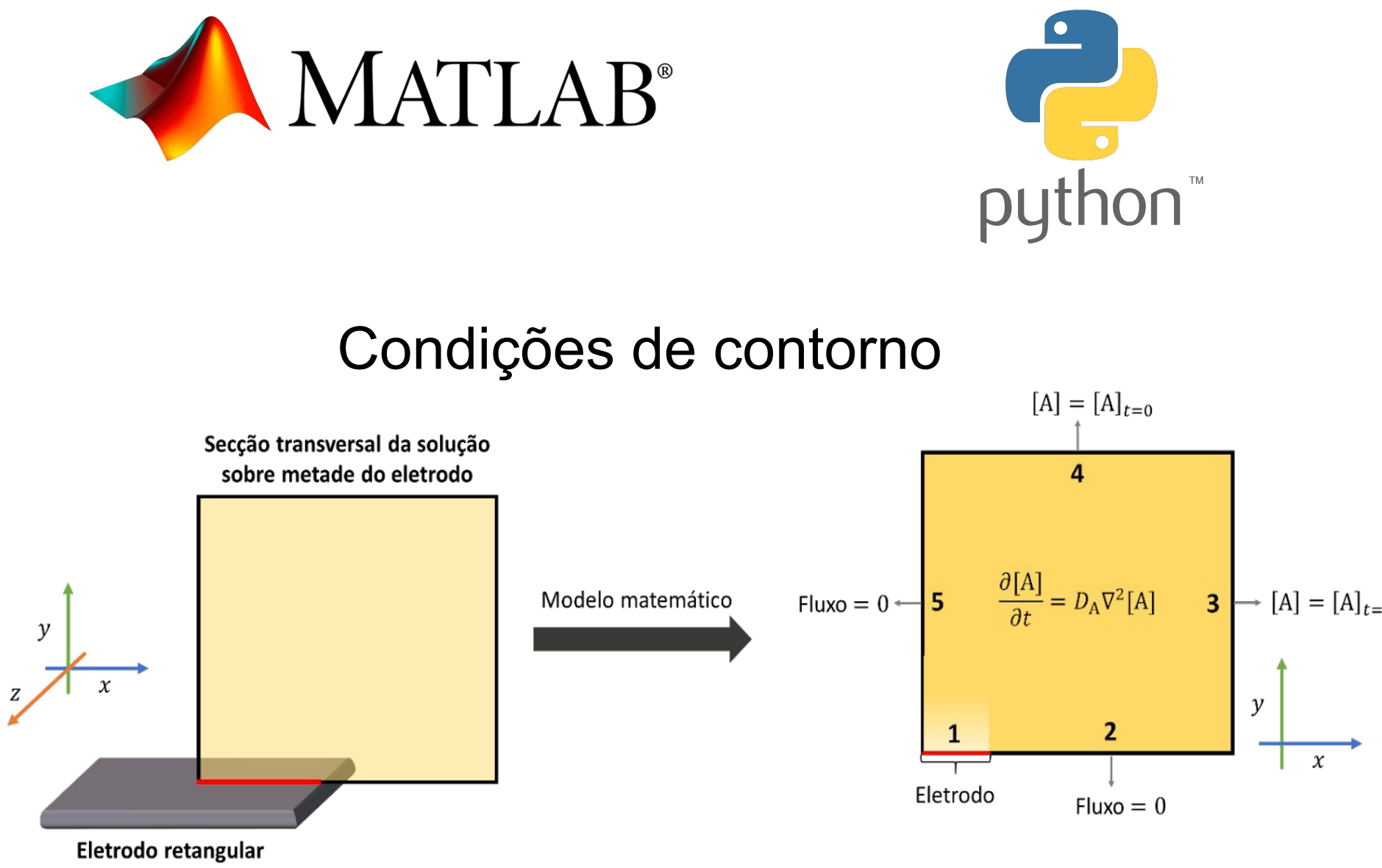


Figura 2. Modelo matemático assumido nas simulações. Fonte: autores.

Reação Simulada

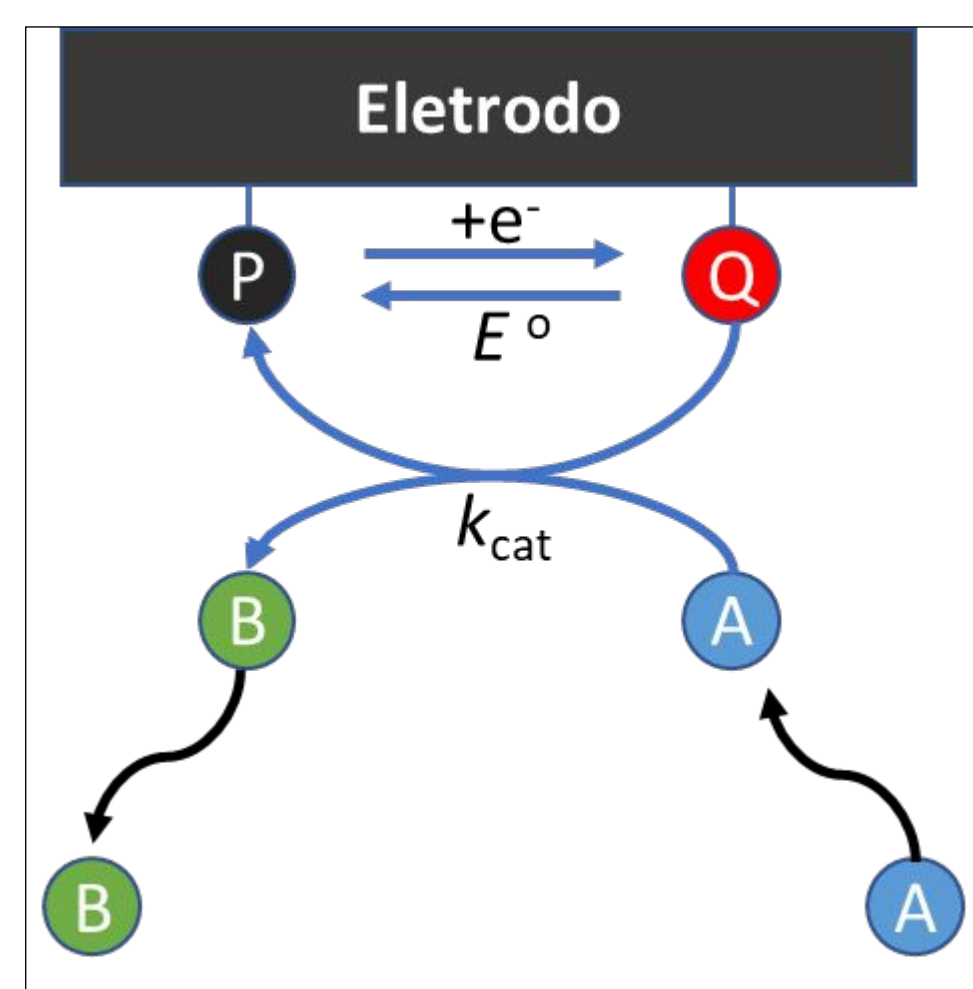


Figura 3: Esquema representando a reação eletrocatalítica simulada. Fonte: autores.

Superfície do eletrodo simulado

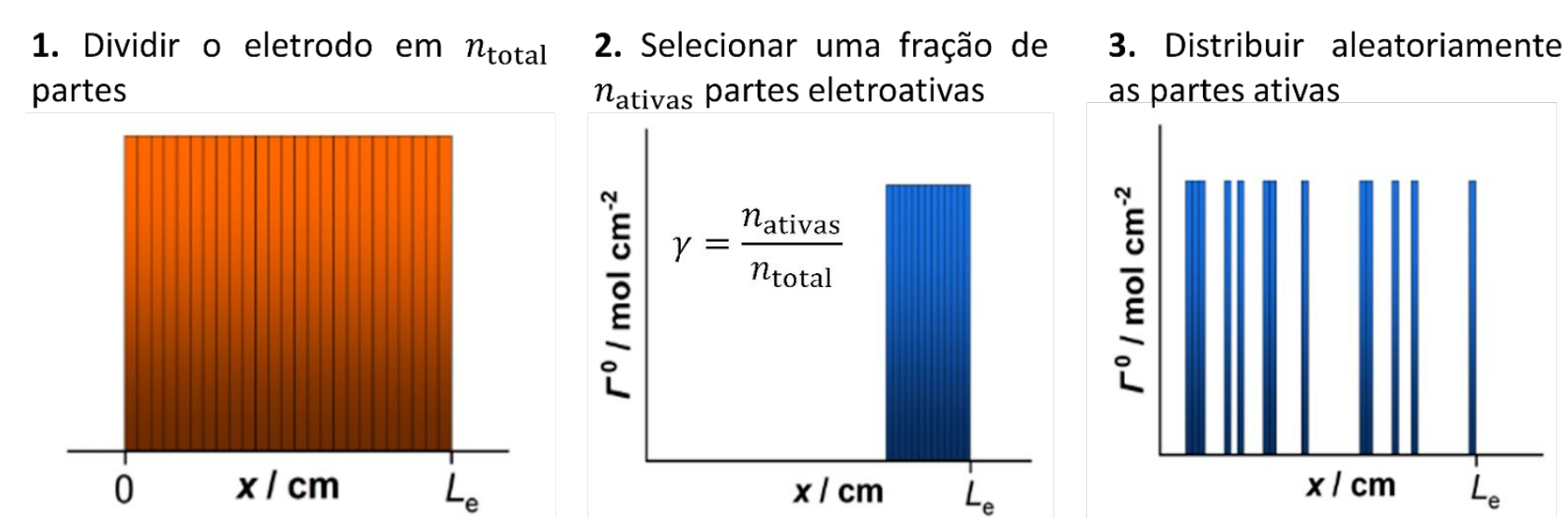


Figura 4: Passo-a-passo da distribuição de regiões eletroativas na borda correspondente ao eletrodo. Fonte: autores.

Malha de elementos finitos

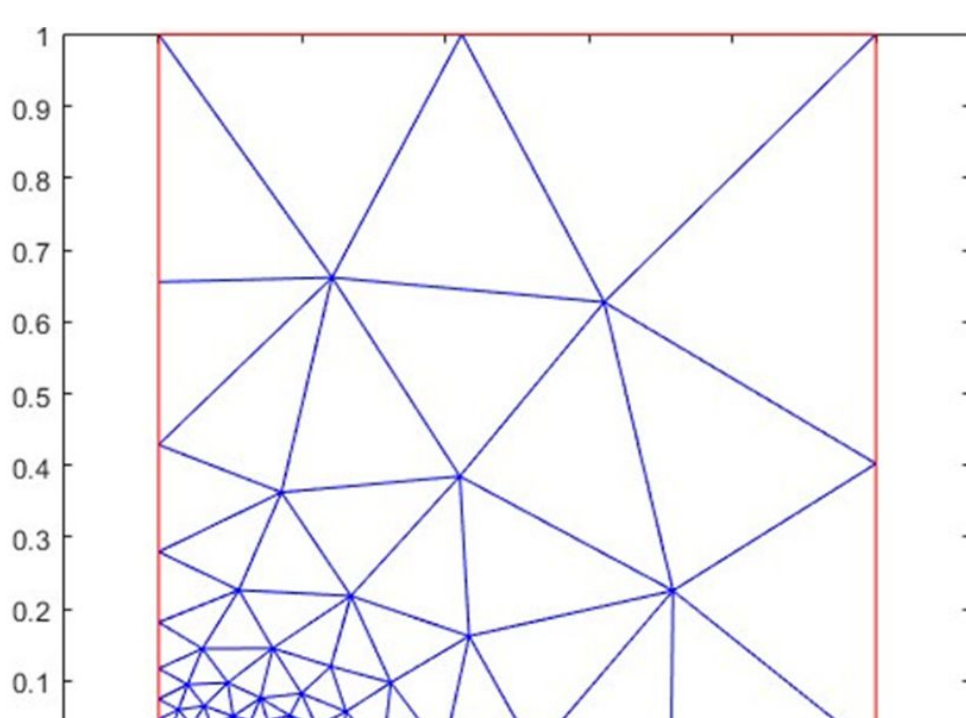


Figura 5: Malha de elementos finitos utilizada nas simulações. Fonte: autores.

Voltametria Cíclica

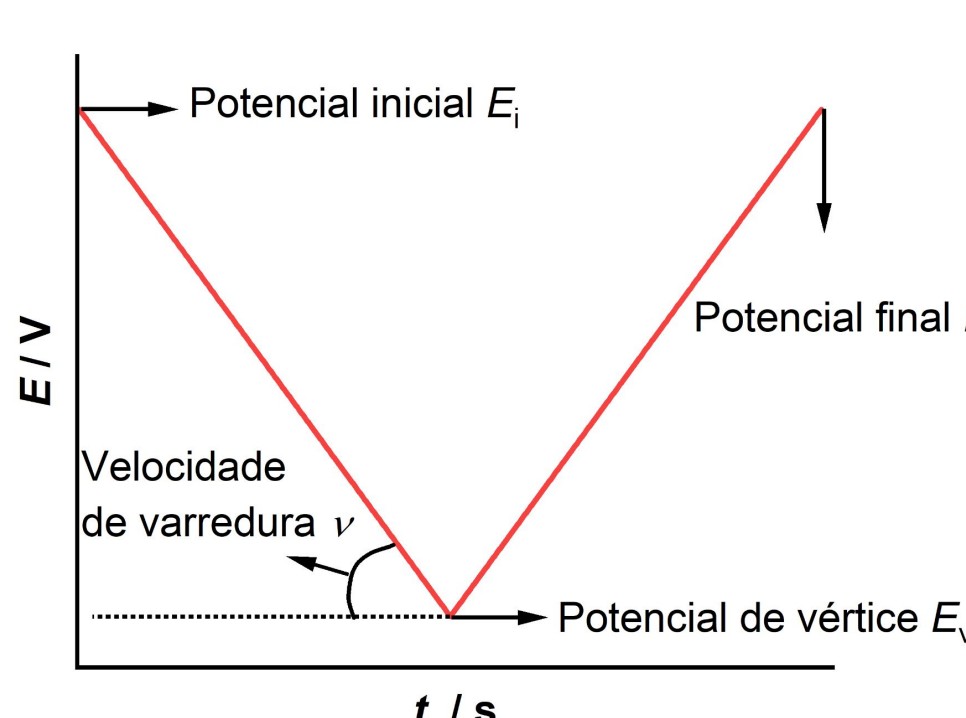


Figura 6: Aplicação de potencial na voltametria cíclica. Fonte: autores

Resultados

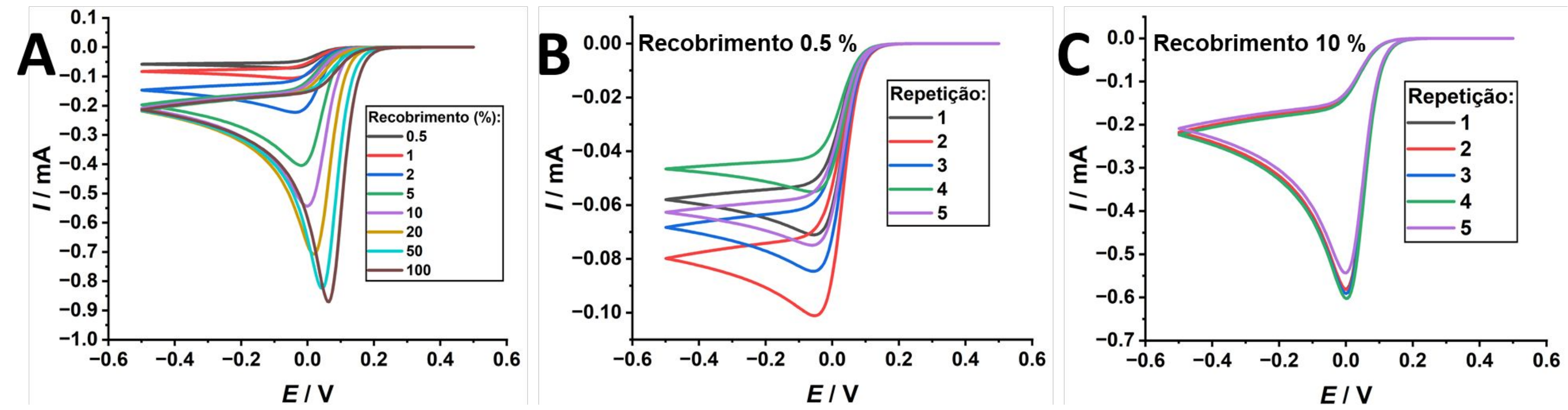


Figura 7. (A) Voltamogramas simulados para diferentes porcentagens do eletrodo recoberto por catalisador. (B) Repetições a 0,5% de recobrimento em diferentes distribuições espaciais de catalisador. (C) Repetições a 10% de recobrimento. Fonte: autores.

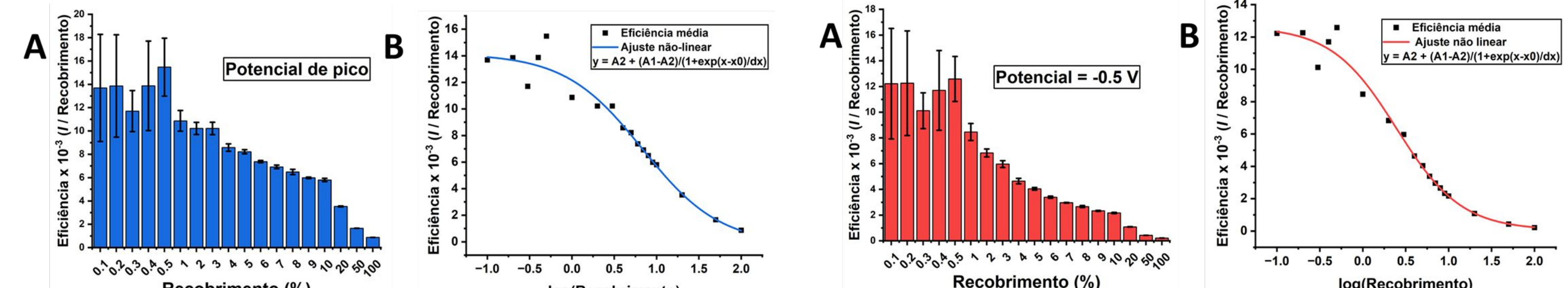


Figura 8. Média da eficiência e seu desvio padrão para diferentes recobrimentos considerando $E = E_p$ (A) e $E = 0,5$ V (C) e ajustes não-lineares dos gráficos eficiência vs $\log(\text{Recobrimento})$ com base em uma função sigmoideal do tipo exponencial (B) e (D).

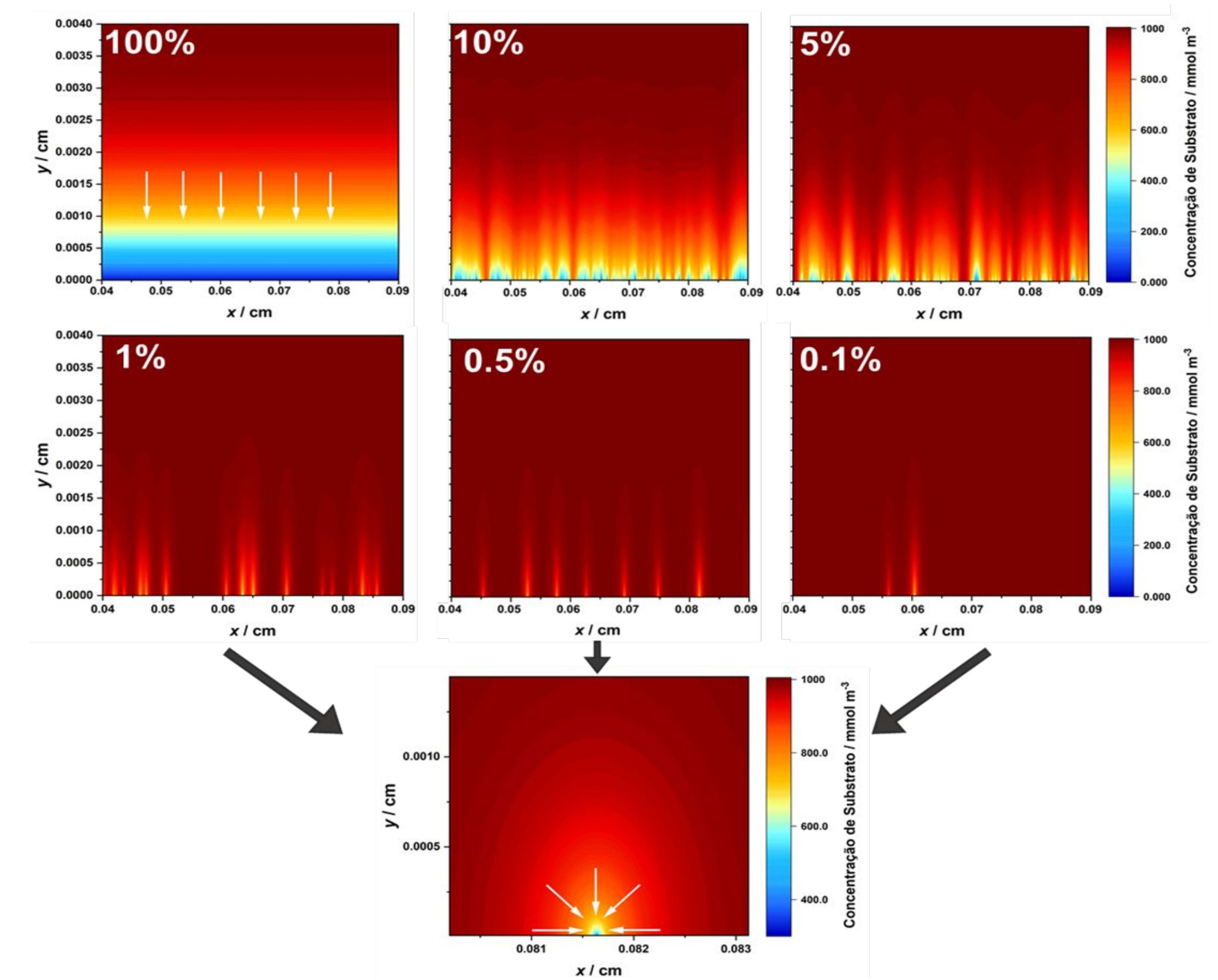


Figura 9. Mapas de concentração de substrato para diferentes recobrimentos obtidos nas simulações para $E = -0,5$ V. Fonte: autores.

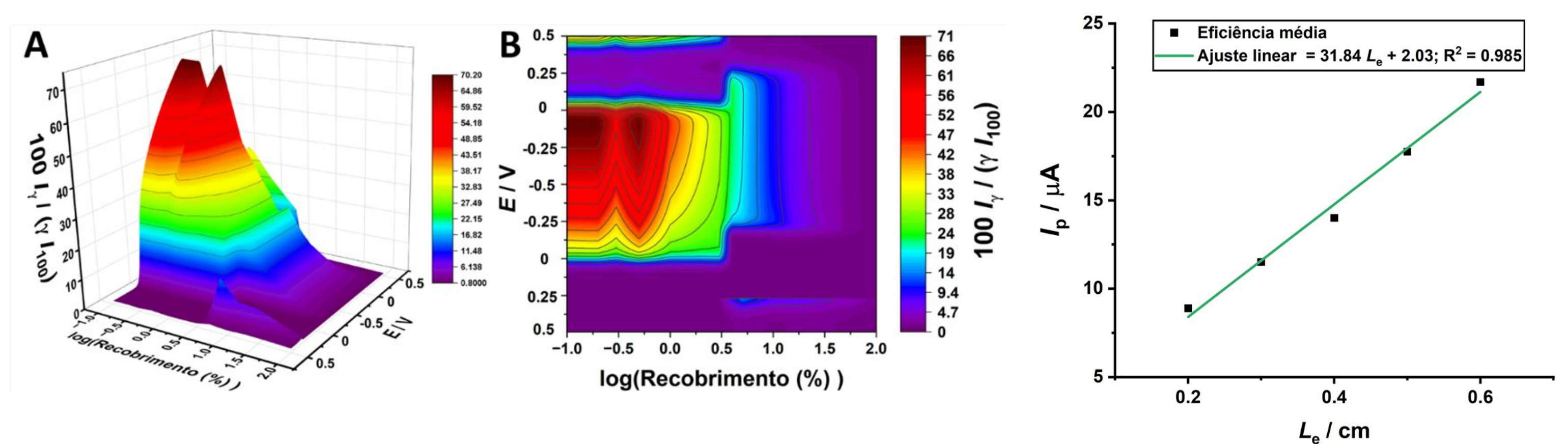


Figura 10. Eficiência relativa àquela de um eletrodo 100% recoberto com catalisador como função de $\log(\text{Recobrimento})$ e potencial aplicado (A) e sua projeção e curvas de nível projetadas em um plano (B). Fonte: autores.

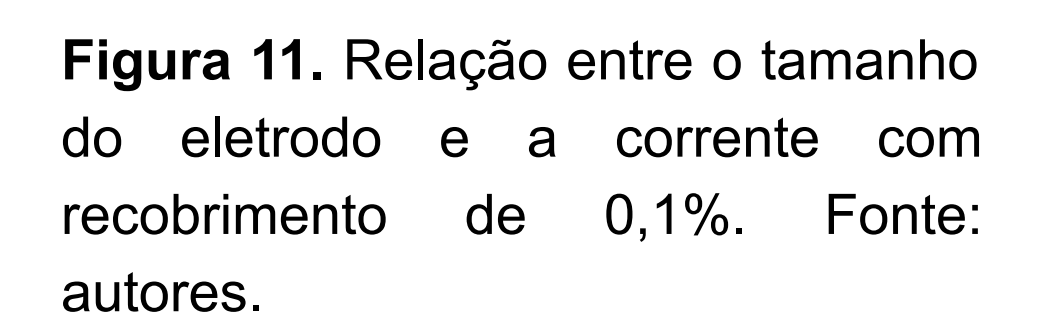


Figura 11. Relação entre o tamanho do eletrodo e a corrente com recobrimento de 0,1%. Fonte: autores.

Conclusão

Dessa forma, o estudo demonstra que o projeto racional de eletrodos, fundamentado em simulações por elementos finitos, é uma estratégia eficaz para tornar reatores eletrocatalíticos mais eficientes energeticamente e economicamente viáveis. Ao reduzir significativamente o recobrimento catalítico sem comprometer a produtividade, e ao explorar regimes de difusão mais favoráveis ao transporte de massa, é possível diminuir o uso de catalisadores e viabilizar a produção mais eficiente de combustíveis limpos e renováveis.

Referências Bibliográficas

FOOD AND AGRICULTURE ORGANIZATION OF THE UNITED NATIONS (FAO).IRENA. *Wind Power, Technology Brief*. Abu Dhabi: International Renewable Energy Agency, 2016. Disponível em: <https://www.irena.org/publications/2016/Jun/Wind-power-Technology-brief> DOS SANTOS, Antônio Nacilo Sousa et al. TERRITÓRIOS DOS VENTOS—GEOPOLÍTICA, IMPACTOS AMBIENTAIS E DESAFIOS DA ENERGIA EÓLICA NO BRASIL. ARACÉ, v. 7, n. 6, p. 29407-29458, 2025.GUARIEIRO, Elba Pinto da Silva et al. Hidrogênio verde no Brasil: oportunidades e desafios para a transição energética. Salvador: SENAI CIMATEC, 2022.YANG, Guanglei; ZHA, Donglan; CAO, Dongjin; ZHANG, Guoxing. Time for a change: rethinking the global renewable energy transition from the Sustainable Development Goals and the Paris Climate Agreement. *Innovation (Camb.)*, v. 5, n. 2, p. 100582, 2024. DOI:10.1016/j.xinn.2024.100582.KANG, Buxing. *Exploring the Potential of Electro Catalysis for Clean Energy and Carbon Management*. Journal of Thermodynamics & Catalysis, v. 15, n. 4, 2024. Disponível em:SAJI, Viswanathan S.; PILLAI, Vijayamohan K. *Role of Catalysts in Electrochemical Reactions*. In: SAJI, V. S.; PILLAI, V. K. (Org.). *Multi-functional Electrocatalysts: Fundamentals and Applications*. Cambridge: Royal Society of Chemistry, 2024. Cap. 1.2.3.UNIÃO EUROPEIA. Directive (EU) 2018/2001 of the European Parliament and of the Council of 11 December 2018 on the promotion of the use of energy from renewable sources (RED II). Official Journal of the European Union, L 328, p. 82–209, 21 Dec. 2018.Zichen Liu, Gong Zhang, Huachun Lan, Huijuan Liu, and Jihui Qu *Environmental Science & Technology* 2021 55 (18), 12596–12606 DOI: 10.1021/acs.est.1c02825Yu Chen, Gong Zhang, Qinghua Ji, Huachun Lan, Huijuan Liu, and Jihui Qu *Environmental Science & Technology* 2022 56 (13), 9722–9731 DOI: 10.1021/acs.est.2c01707;