

ESTUDO COMPUTACIONAL DA DIFUSÃO DE ÍONS Li^+ EM FILMES FINOS DE WO_3

¹LOURENZO BERNARD MENEZES RODRIGUES; ²MARCO P. RODRIGUES;

²EDUARDO GOMES DE FREITAS;

²JAVIER ANTONIO GÓMEZ ROMERO; ³CÉSAR O. AVELLANEDA

¹CDTec-Universidade Federal de Pelotas – lourenzo.menezes.rodrigues@hotmail.com

²CDTec-Universidade Federal de Pelotas – marco.paulsen.rodrigue@gmail.com

²CDTec-Universidade Federal de Pelotas – dudugfreitas@hotmail.com]

²CDTec-Universidade Federal de Pelotas – javiergomezromero@gmail.com

³CDTec-Universidade Federal de Pelotas – cesaravellaneda@gmail.com

1. INTRODUÇÃO

O uso de tecnologias que reduz o consumo energético é cada vez mais importante para melhorar seu faturamento, em um mercado cada vez mais competitivo e acirrado, as indústrias possuem poucas alternativas: vender mais (o que não é exatamente fácil no ambiente econômico recessivo atual) e reduzir os custos de produção. Nesse sentido, tem se discutido outros meios. Um deles, que entra em sintonia com os desafios do próprio País, é buscar maior eficiência energética, aproveitando ao máximo a energia comprada, cujo custo está cada vez mais alto. Para isso, é preciso identificar e reduzir desperdícios e encontrar soluções para que os equipamentos mantenham a produção, consumindo menos.

Uma ampla classe de materiais opticamente ativos vem despertando interesse comercial, especialmente aqueles com absorção, transmissão ou reflexão controláveis, devido às suas potenciais aplicações. Esses materiais cromógenos e são conhecidos pela capacidade de mudar suas propriedades ópticas, em resposta a alterações nas condições que alguns materiais ou sistemas apresentam de mudar a cor (absorção e/ou reflexão espectral) reversivelmente, em resposta a um potencial externo aplicado. (ANDRADE, 2015)

Como alternativa, para evitar o desencadeamento de uma crise energética, conta-se com o desenvolvimento de pesquisas para a produção de energias renováveis. Entretanto, é difícil prever-se que essas fontes podem ser capazes de substituir a energia fóssil em um futuro próximo (IEA, 2004)

Para processos de difusão em estado estacionário, a equação que correlaciona o fluxo de difusão J com o gradiente de concentração dC/dx é chamada de PRIMEIRA LEI DE FICK. (PMT, 2005)

$$1^{\circ}LF: \quad J = -D \left(\frac{\partial C}{\partial x} \right)$$

Figura 1: first law of Fick (CRANK, 1975)

O propósito do trabalho é mostrar um dos métodos computacional da difusão química de íons lítio em filmes finos de WO_3 preparados pelo processo de sol-gel. Apresentar o quanto o estudo e as aplicações desse tipo de dispositivo pode ser benéfico em diversos setores como industrial, saúde, comércio, residencial de maneira mais sustentável.

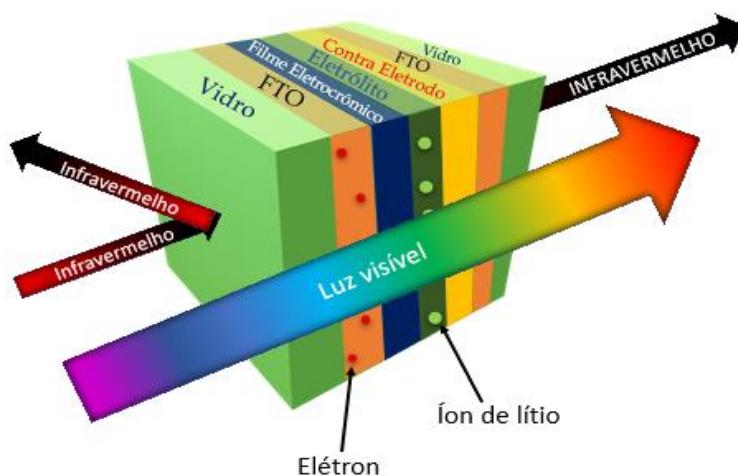


Figura 2: esquema de dispositivo eletrocrômico (RODRIGUES, 2018)

2. METODOLOGIA

2.1. Entender o conceito de eletrocromismo

Fenômeno apresentado por alguns compostos químicos de mudança reversível de cor quando uma descarga de carga elétrica sobre ela é aplicada.

2.2 Entender o conceito de difusão

Um processo físico em que substâncias são transportadas de uma região mais concentrada para outra menos concentrada (a favor do gradiente de concentração) de maneira aleatória e espontânea.

2.3. Resolver matematicamente a segunda lei de Fick

Obter as expressões do coeficiente de difusão química, de íons lítio para dois casos na interface eletrodo-eletrolito.

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D \left(\frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 C}{\partial z^2} \right),$$

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D \frac{\partial^2 C}{\partial x^2}$$

Figura 3: second law of diffusion (CRANK, 1975)

2.4. Confirmar código de programação

Validação do código computacional e do exemplo matemático com base nos dados experimentais,

2.5. Caracterizar os filmes

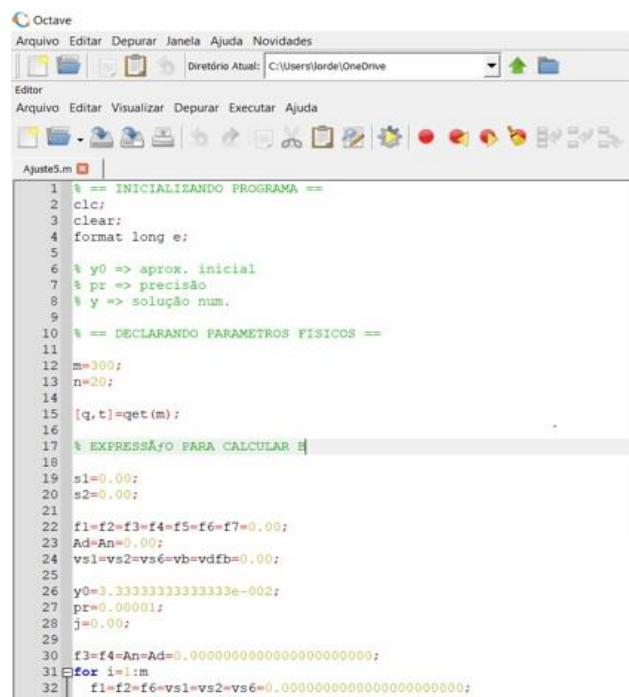
Caracterizar eletroquimicamente os filmes por técnicas de voltametria cíclica, cronometria, cronoamperometria, impedância eletroquímica e cronopotenciometria.

2.6. Propriedades influentes

Estudar as propriedades influentes nos perfis de absorbância e transmitância, comparando-os com o perfil teórico de densidade de cargas.

3. RESULTADOS E DISCUSSÃO

A partir do estudo obtivemos os resultados dos seguintes parâmetros dos dispositivos, eficiência eletrocrônica, o quanto é obtido nas variações das propriedades ópticas e quanto foi inserido de corrente, memória óptica que nos diz o quanto está permanecendo no dispositivo, tempo de resposta o quanto da durando para acontecer a medida que é posto a carga, estabilidade não a ver variações de cor e a durabilidade o quanto tempo o filme está durando



```

1 % == INICIALIZANDO PROGRAMA ==
2 clc;
3 clear;
4 format long e;
5
6 % y0 => aprox. inicial
7 % pr => precisão
8 % y => solução num.
9
10 % == DECLARANDO PARAMETROS FISICOS ==
11
12 m=300;
13 n=20;
14
15 [q,t]=qet(m);
16
17 % EXPRESSÃO PARA CALCULAR E
18
19 s1=0.00;
20 s2=0.00;
21
22 f1=f2=f3=f4=f5=f6=f7=0.00;
23 Ad=An=0.00;
24 vs1=vs2=vs6=vb=vdfb=0.00;
25
26 y0=3.3333333333333e-002;
27 pr=0.00001;
28 j=0.00;
29
30 f3=f4=An=Ad=0.00000000000000000000000000000000;
31 for i=1:m
32 f1=f2=f6=vs1=vs2=vs6=0.00000000000000000000000000000000;

```

```

96 endfor
97 y0=y;
98 j=j+1;
99 y=y0-fb/dfb;
100 end
101
102 for i=1:m
103 f1=f2=vs2=0.00000000000000000000000000000000;
104 for k=1:n
105 f1=exp(-y0*((2*(k-1)+1)^2)*(pi^2)*t(i)/4);
106 f2=((1/((2*(k-1)+1)^2))-(1/((2*(k-1)+1)^2))*f1);
107 vs2=vs2+f2;
108 s2(i,1)=vs2;
109 endfor
110 Q(i,1)=A*s2(i,1);
111 endfor
112
113 Res=zeros(m, 3);
114 for i=1:m
115 Res(i, 1)=t(i, 1);
116 Res(i, 2)=Q(i, 1);
117 Res(i, 3)=q(i, 1);
118 end
119
120 save Res.txt Res

```

4. CONCLUSÕES

Tendo em vista os aspectos observados é com a implementação da simulação computacional que podemos obter resultados mais precisos, com menor tempo no estudo do problema, para isso foi necessário um bom entendimento matemático e conhecimento de programação, nesse caso octave e mathlab com uma vasta gama de opções linguagem para testes futuros.

O benefício do uso de filmes finos, mostra que a produção de dispositivos mais eficiente, traz vantagens ao meio ambiente, menor emissão raios UV, de gás carbônico (CO₂), e econômico com menor consumo de eletricidade, a medida que avança a pesquisa.

5. REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

CHOLANT, C. M. **Filmes Finos de V₂O₅:MoO₃ e Eletrólitos Sólidos à Base de PVA:GA para Aplicação em Dispositivos Eletrocrônicos.** 2018. Tese (Doutorado)- Programa de Pós-Graduação em Ciência e Engenharia de Materiais do Centro de Desenvolvimento Tecnológico da Universidade Federal de Pelotas.

KRÜGER, L. U. **Caracterizações Opto-Eletroquímicas de Filmes Finos de MoO₃.** 2019. Qualificação de Mestrado- Programa de Pós-Graduação em Ciência e Engenharia de Materiais do Centro de Desenvolvimento Tecnológico da Universidade Federal de Pelotas.

RAPHAEL, E. **Estudo de Eletrólitos Poliméricos à Base de Agar para Aplicação em Dispositivos Eletrocrônicos.** 2010. Tese Doutorado. Programa de Pós-Graduação em Química da Universidade de São Paulo.

FERREIRA, L. L. **Estudo Espectroeletrouquímico de Politiofenos Substituídos para Aplicação em Dispositivos Eletrocrônicos.** 2015. Dissertação (Mestrado)- Programa de Pós-Graduação do Instituto de Ciências Exatas da Universidade Federal de Minas Gerais.

ANDRADE, J. R. **Desenvolvimento de dispositivos eletrocrônicos 2015.** Tese apresentada ao Instituto de Química de São Carlos da Universidade de São Paulo, USP como parte dos requisitos para obtenção do título de Doutor em ciências.

LUCIO, C. S. **Propriedade eletrocrônicas de filmes finos de WO₃;Li⁺ E WO₃;Li⁺TiO₂**_ Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Ciências e Engenharia de Materiais, da Universidade Federal de Pelotas, como requisito parcial à obtenção do título de Mestre em Ciências e Engenharia de Materiais.