

Anais

XXIV Simpósio Brasileiro de
**ELETROQUÍMICA &
ELETROANALÍTICA**



Simone Stülp
Tatiana Rocha
Leandro Machado de Carvalho
Daniel Ricardo Arsand
Daiane Dias
Pedro Hernandez Jr.
Fernanda Trombetta
Alexandre Schneider
(Orgs.)

Anais do XXIV Simpósio Brasileiro de Eletroquímica e Eletroanalítica

1ª edição



EDITORA
UNIVATES

Lajeado/RS, 2024



Universidade do Vale do Taquari - Univates

Reitora: Profa. Ma. Evania Schneider

Vice-Reitora e Pró-Reitora de Ensino: Profa. Dra. Fernanda Storck Pinheiro

Pró-Reitor de Pesquisa e Pós-Graduação: Prof. Dr. Carlos Cândido da Silva Cyrne



EDITORA
UNIVATES

Editora Univates

Coordenação: Prof. Dr. Carlos Cândido da Silva Cyrne

Editoração: Marlon Alceu Cristófoli

Avelino Talini, 171 – Bairro Universitário – Lajeado – RS, Brasil

Fone: (51) 3714-7024 / Fone: (51) 3714-7000, R.: 5984

editora@univates.br / <http://www.univates.br/editora>

S612 Simpósio Brasileiro de Eletroquímica e Eletroanalítica (24. : 2023 :
Lajeado, RS)

Anais do XXIV Simpósio Brasileiro de Eletroquímica e Eletroanalítica,
2 a 5 de outubro de 2023, Lajeado, RS [recurso eletrônico] / Simone
Stülp et al. (org.) – Lajeado : Editora Univates, 2023.

Disponível em: www.univates.br/editora-univates/publicacao/413
ISBN 978-85-8167-307-3

1. Eletroquímica. 2. Eletroanalítica. 3. Anais. I. Stülp, Simone. II.
Rocha, Tatiane. III. Carvalho, Leandro Machado de. IV. Arsand, Daniel
Ricardo. V. Dias, Daiane. VI. Hernandez Jr., Pedro. VII. Trombetta,
Fernanda. VIII. Schneider, Alexandre. IX. Título.

CDU: 543.55

Catálogo na publicação (CIP) – Biblioteca Univates
Bibliotecária Gigliola Casagrande – CRB 10/2798



As opiniões e os conceitos emitidos, bem como a exatidão,
adequação e procedência das citações e referências, são de exclusiva
responsabilidade dos autores e não refletem necessariamente a
visão do Conselho Editorial da Editora Univates e da Univates.

Nome dos autores: Enrique A. Paredes-Salazar, Hamilton Varela

Nome dos Apresentadores: Enrique A. Paredes-Salazar, Hamilton Varela, Enrique A. Paredes-Salazar

Instituição de Ensino: Instituto de Química de São Carlos - Universidade de São Paulo

UNDERSTANDING THE METHANOL ELECTRO-OXIDATION REACTION THROUGH COMBINED EXPERIMENTAL AND NUMERICAL APPROACHES

Resumo: The methanol electro-oxidation reaction (MEOR) is of significance in an energy landscape due to the applicability of this alcohol in direct methanol fuel cells (DMFC) and its role in transitioning the current energy sector toward a sustainable and clean scenario. Understanding the correlation between microscopic properties, such as reaction mechanism, electrode structure, and electrode composition, and mesoscopic properties, including reaction rate and selectivity, is crucial for designing materials with enhanced electrocatalytic activity at low overpotentials. Here, we present a combined numerical and experimental approach, employing both conventional and oscillatory regimes, to elucidate the reaction mechanism and investigate how changes in individual reaction rates and experimental parameters affect the overall electrochemical behavior. The results demonstrate that a proposed mechanism gains reliability when supported by a microkinetic model capable of simulating the dynamic response, i.e., capturing the evolution of variables over time.^[1] We emphasize the utilization of oscillatory dynamics as a powerful tool to obtain detailed and comprehensive information on the electrochemical system^[2] since oscillations usually outperform conventional techniques such as chronoamperometry and cyclic voltammetry due to their heightened sensitivity to the electrochemical environment. In this regard, we show the importance of carefully controlling experimental parameters in this type of study to improve the accuracy, reproducibility, and comparability of data, thereby advancing our understanding of electrochemical systems as a whole. Importantly, the approaches shown in this work can be extrapolated to other electrocatalytic reactions, enabling a complementary relationship between laboratory experiments and computational simulations.

Agradecimento: The authors acknowledges CNPq for financial support (#140644/2020-2) and CAPES (Finance Code 001).