

Energia renovável

Estudo computacional avalia novos eletrólitos para baterias do futuro

Trabalho investigou detalhadamente compostos que podem ser usados como eletrólitos em dispositivos de íons de sódio, elemento abundante e bem distribuído em todo o planeta; equipamentos são muito promissores no armazenamento de energia excedente de parques solares e eólicos

23 de julho de 2025

[WhatsApp](#) [Instagram](#) [Facebook](#) [Twitter](#) [LinkedIn](#) [EN](#)

Agência FAPESP* – Um estudo computacional [publicado](#) no *Journal of Molecular Liquids* traz contribuições importantes para o desenvolvimento de novas baterias seguras e de alto desempenho. Realizado por uma equipe de pesquisadores ligados ao [Centro de Inovação em Novas Energias \(CINE\)](#) com colaboradores da Universidade de Bonn (Alemanha), o trabalho investigou detalhadamente compostos que podem ser usados como eletrólitos em baterias de íons de sódio.

O CINE é um Centro de Pesquisa em Engenharia ([CPE](#)) constituído pela FAPESP e pela Shell em 2018. O centro é sediado na Universidade Estadual de Campinas (Unicamp), Universidade de São Paulo (USP) e Universidade Federal de São Carlos (UFSCar), com a participação de outras oito instituições brasileiras.



(foto: Tuanan da Costa Lourenço/CINE, divulgação)

Baseadas no sódio, elemento abundante e bem distribuído em todo o planeta, essas baterias são consideradas muito promissoras, principalmente para armazenar a energia excedente de parques solares e eólicos. Seu funcionamento se baseia no deslocamento de íons de sódio entre os eletrodos da bateria, atravessando o eletrólito, durante a carga e a descarga do dispositivo.

Entre os compostos mais estudados para conduzir esses íons no eletrólito estão os líquidos iônicos, uma família de sais que se apresentam em estado líquido à temperatura ambiente. Além de serem bons condutores de íons, esses compostos, que não são inflamáveis, oferecem alta segurança às baterias. Entretanto, a adição de íons de sódio nesses líquidos leva ao aumento da viscosidade, que reduz a mobilidade dos íons e piora o desempenho do eletrólito.

Buscando superar essa limitação, pesquisadores do CINE investigaram uma série de eletrólitos baseados em líquidos iônicos de dois tipos: o aprótico, o mais usado nas pesquisas de eletrólitos, e o prótico, que tem menor custo e é mais fácil de produzir, mas era pouco estudado. A ideia foi adicionar sal de sódio a esses compostos para melhorar a mobilidade dos íons.

“O ponto principal nesse trabalho foi avaliar o efeito do aumento da concentração de sal de sódio em um eletrólito baseado em um líquido iônico prótico e seu análogo contendo um líquido iônico aprótico”, resume [Tuanan da Costa Lourenço](#), pós-doutorando do CINE no Instituto de Química de São Carlos ([IQSC-USP](#)) e autor correspondente do artigo.

Para desenvolver a pesquisa, a equipe realizou simulações de dinâmica molecular, método computacional que descreve as interações de átomos e moléculas. Usando dezenas de computadores em rede e software avançado, os autores resolveram as complexas equações matemáticas envolvidas nas simulações. No processo, foram utilizados recursos computacionais da USP, do Laboratório Nacional de Computação Científica ([LNCC](#)), localizado em Petrópolis (RJ), e da Universidade de Bonn.

estrutura molecular dos íons e da característica prótica ou aprótica do líquido iônico. “Além disso, observamos que em altas concentrações de sal de sódio há uma diminuição das forças de interação entre o íon sódio e o ânion dos eletrólitos, o que pode ser benéfico para o funcionamento de uma bateria”, diz Lourenço.

Colaboração internacional

Selecionar eletrólitos promissores para as baterias do futuro é um dos objetivos do programa Design Computacional de Materiais ([CMD](#), na sigla em inglês) do CINE, coordenado por [Juarez Lopes Ferreira da Silva](#), que também assina o *paper*. Neste caso, o trabalho contou com a participação de membros do programa ligados à USP, bem como do grupo de pesquisa de [Barbara Kirchner](#), da Universidade de Bonn, que se dedica à modelagem de sistemas grandes e complexos envolvendo líquidos e suas interfaces e é coautora do artigo.

“A colaboração não apenas tornou possível o aprofundamento da discussão e das conclusões obtidas, mas também resultou no desenvolvimento de novas ferramentas, melhoria dos modelos utilizados e novas colaborações”, diz Lourenço, que passou 15 meses no grupo de Kirchner trabalhando no estudo.

A equipe científica está atualmente dando continuidade à pesquisa por meio de um segundo trabalho que visa entender como modular as interações entre os íons dos líquidos iônicos para otimizar o desempenho da bateria.

Além do apoio da FAPESP, a pesquisa foi financiada pela Shell, pela Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior (Capes) e por agências da Europa, além de contar com suporte estratégico da Agência Nacional do Petróleo, Gás Natural e Biocombustíveis (ANP).

O artigo *Structural investigation of protic ionic liquid electrolytes with sodium salt using polarizable force fields* pode ser lido em: <https://doi.org/10.1016/j.molliq.2025.127496>.

* Com informações de Verónica Savignano, do CINE.

— [Republicar](#)

MAIS NOTÍCIAS