

---

## Propriedades redox e estabilidade eletroquímica de ftalimida sustentável como anólito para bateria de fluxo redox orgânica

Murilo A. Dada<sup>1\*</sup>, Alex S. Moraes<sup>1</sup>, Rafaela B. da Silva<sup>1</sup>, Giovanna Tâmega<sup>1</sup>, Graziela C.

Sedenho<sup>1,2</sup>, Ernesto C. Pereira<sup>1</sup>, Marco A. B. Ferreira<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Departamento de Química - Universidade Federal de São Carlos, <sup>2</sup> Instituto de Química  
de São Carlos - Universidade de São Paulo

\*e-mail: [mdada@estudante.ufscar.br](mailto:mdada@estudante.ufscar.br)

Na busca por materiais sustentáveis para armazenamento de energia, compostos à base de ftalimida têm demonstrado grande potencial como moléculas eletroquimicamente ativas para baterias de fluxo redox (BFRs) [1]. Este trabalho descreve o estudo de ftalimidas sustentáveis como anólitos para BFRs. A partir de uma triagem computacional com mais de 5.700 moléculas, uma ftalimida com propriedades promissoras foi selecionada e sintetizada através de uma rota sustentável, partindo de precursores de biomassa [2]. A espécie sintetizada apresentou notável solubilidade em acetonitrila ( $> 3$  mol L<sup>-1</sup>) e a caracterização eletroquímica em acetonitrila como solvente revelou um processo redox quasi-reversível com potencial de meia-onda de  $-1,998 \pm 0.033$  V (vs. Ag/Ag<sup>+</sup>), em concordância com as previsões teóricas realizadas, e separação de potenciais de pico de  $78 \pm 4$  mV. O processo eletroquímico é controlado por difusão, com coeficiente de difusão  $1,25 \times 10^{-5}$  cm<sup>2</sup> s<sup>-1</sup> e constante de transferência de elétrons de  $5,5 \times 10^{-3}$  s<sup>-1</sup>. A ftalimida demonstrou estabilidade eletroquímica no decorrer de 2000 ciclos consecutivos de potencial e nenhuma degradação química foi observada por espectroscopia UV-Vis e FTIR após ciclagem galvanostática. Os resultados validam o design computacional e o potencial da ftalimida como um anólito robusto e sustentável para BFRs.

### Agradecimentos:

Os autores agradecem o apoio de CEPID, CDMF, CNPq, CAPES, FAPESP (processo nº 2017/11986-5) e Shell, bem como o apoio estratégico da ANP.

### Referências:

- [1] Zhang, C. et al., Chem, 4, 2814 (2018).
- [2] Kucherov, F. A. et al., ACS Sustainable Chem. Eng., 9, 3011 (2021).