

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

Murilo A. Dada^{1*}, Alex S. Moraes¹, Rafaela B. da Silva¹, Giovanna Tâmega¹, Graziela C.

Sedenho^{1,2}, Ernesto C. Pereira¹, Marco A. B. Ferreira¹

¹ Departamento de Química - Universidade Federal de São Carlos, ² Instituto de Química de São Carlos - Universidade de São Paulo

**e-mail: 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 ($> 3 \text{ mol L}^{-1}$) e a caracterização eletroquímica em acetonitrila como solvente revelou um processo redox quasi-reversível com potencial de meia-onda de $-1,998 \pm 0.033 \text{ V}$ (vs. Ag/Ag^+), em concordância com as previsões teóricas realizadas, e separação de potenciais de pico de $78 \pm 4 \text{ mV}$. O processo eletroquímico é controlado por difusão, com coeficiente de difusão $1,25 \times 10^{-5} \text{ cm}^2 \text{ s}^{-1}$ e constante de transferência de elétrons de $5,5 \times 10^{-3} \text{ s}^{-1}$. 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] Kuchеров, F. A. et al., ACS Sustainable Chem. Eng., 9, 3011 (2021).