DOI: http://dx.doi.org/10.21577/1984-6835.20240062

Informações Suplementares

Compostos Hexacianoferratos Aplicados em Baterias Aquosas de Inserção de Prótons

Hexacyanoferrate Compounds Applied to Aqueous Proton-Insertion Batteries

Lorena Almeida Cadête Costa,[a,*] (https://orcid.org/0009-0002-9086-5827) Débora Alois de Abreu Martins,[a] (https://orcid.org/0009-0003-3999-3679) José Domingos Ardisson,[b] Luciana Flavia de Almeida Romani,[a] Tulio Matencio,[a] (https://orcid.org/0000-0002-5660-8125) Luciano Andrey Montoro[a]

[a]Universidade Federal de Minas Gerais, Instituto de Ciências Exatas, Departamento de Química, CEP 31270- 901, Belo Horizonte-MG, Brasil

[b]Centro de Desenvolvimento da Tecnologia Nuclear – CDTN, CEP 31270- 901, Belo Horizonte-MG, Brasil

*lorena_kdt@hotmail.com

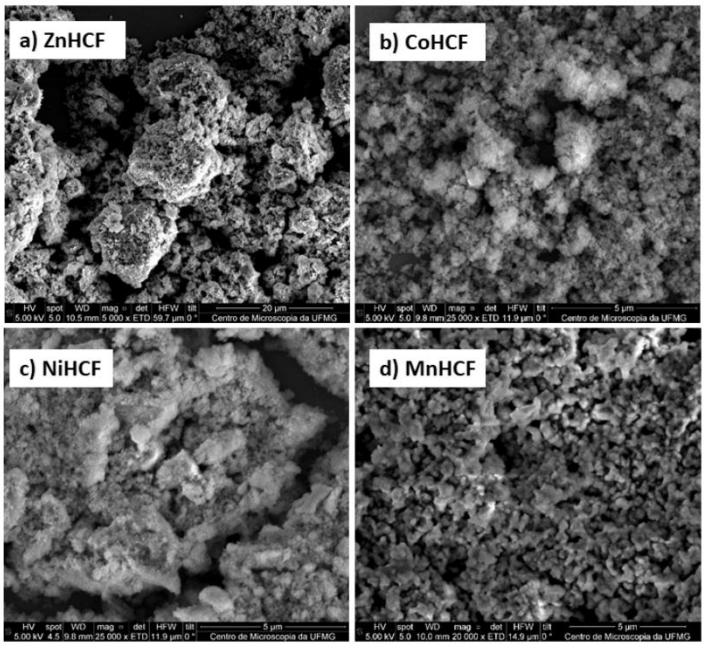


Figura 1S. Imagens representativas obtidas por Microscopia Eletrônica de Varredura (MEV) para os materiais de (a) ZnHCF, (b) CoHCF, (c) NiHCF e (d) MnHCF

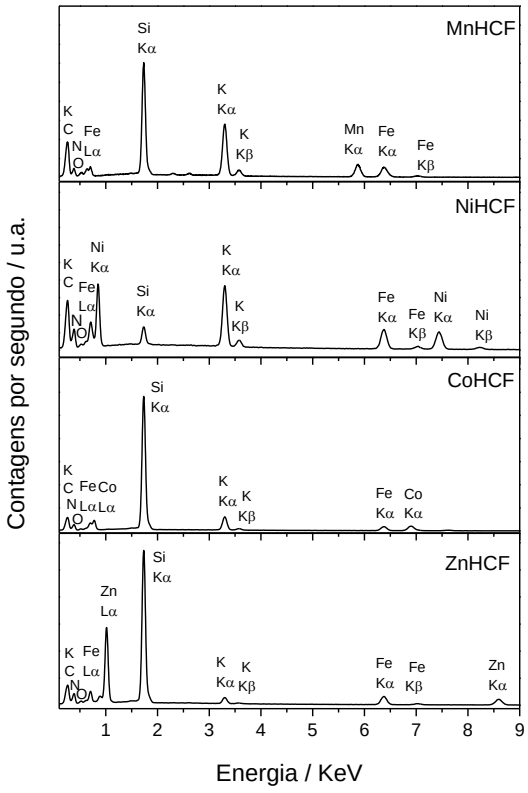


Figura 2S. Resultados de Espectroscopia de Energia Dispersiva de raios X (EDS) integrada ao Microscópio de Varredura (MEV) obtidos para os materiais analisados neste estudo (ZnHCF, MnHCF, CoHCF e NiHCF)

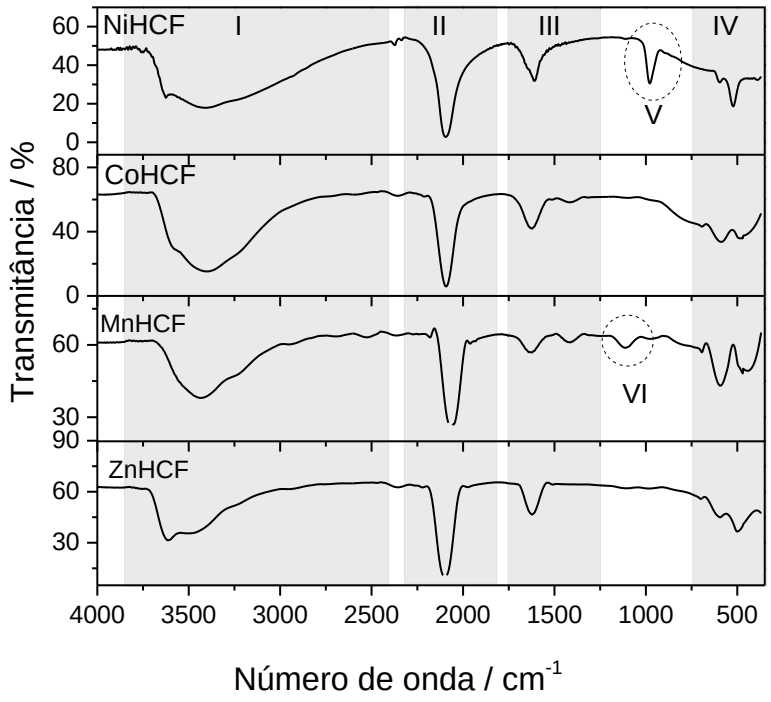


Figura 3S. Resultados de Espectroscopia vibracional na região do infravermelho (KBr) obtidos para os materiais analisados neste estudo (ZnHCF, MnHCF, CoHCF e NiHCF)

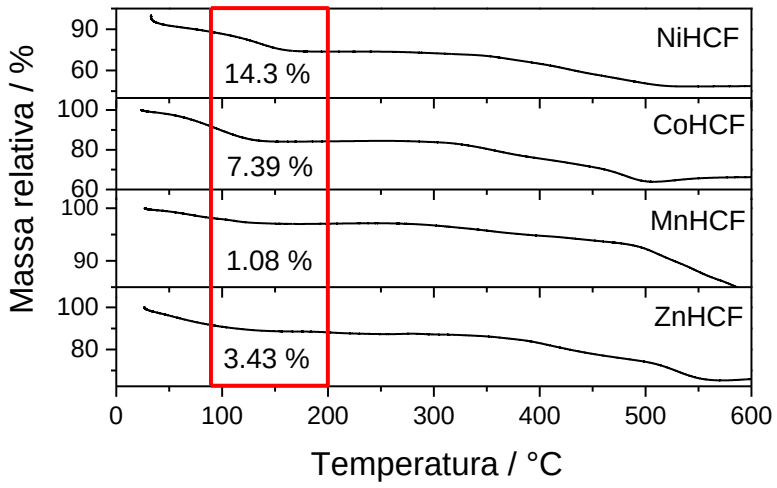


Figura 4S. Resultados de Análise termogravimétrica obtidos para os materiais analisados neste estudo (ZnHCF, MnHCF, CoHCF e NiHCF)

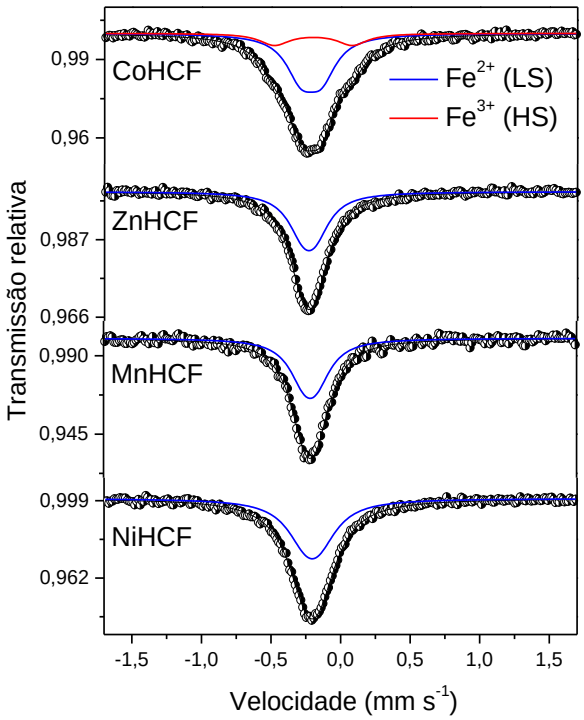


Figura 5S. Espectros Mössbauer de ^{57}Fe obtidos a temperatura ambiente para os materiais analisados neste estudo (ZnHCF, MnHCF, CoHCF e NiHCF)

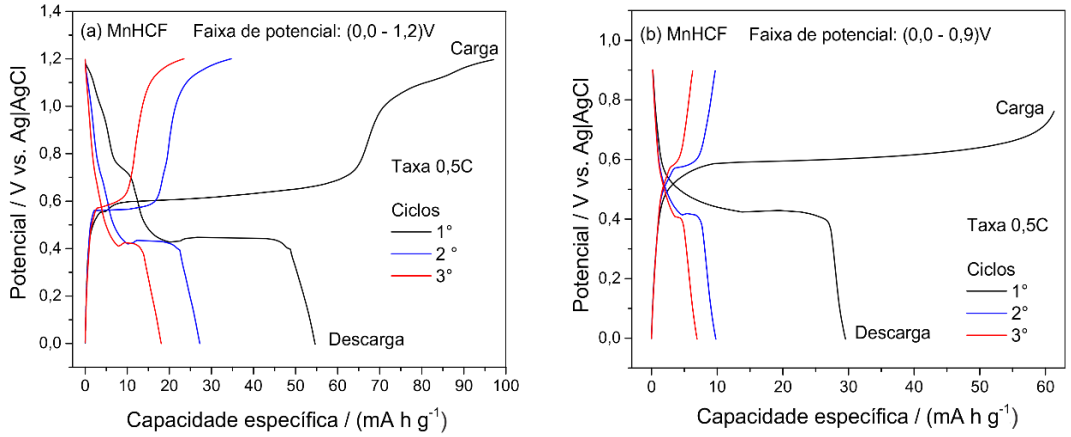


Figura 6S. Curvas de CGPL obtidas em soluções de 1 mol L^{-1} de H_2SO_4, para o material de MnHCF em taxa 0,5C em faixa de potencial de (a) 0,0 a 1,2 V e (b) 0,0 a 0,9 V

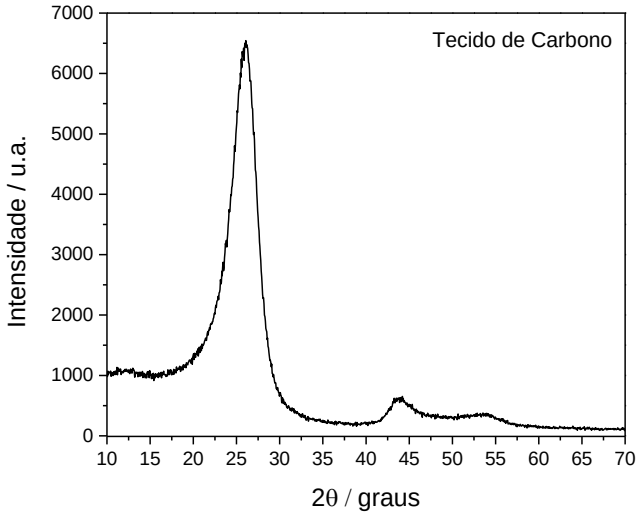


Figura 7S. Difratograma de raios X (DRX) obtido para o tecido de carbono utilizado nos eletrodos de MnHCF

Tabela 1S. Parâmetros cristalográficos dos materiais sintetizados neste estudo (ZnHCF, MnHCF, CoHCF e NiHCF). Parâmetros das arestas da célula unitária (a, b, c); volume (V) e tamanho de cristalito (τ).

Materiais	**Sistema Cristalino**	**Grupo Espacial**	**a/ Å**	**b/ Å**	**c/ Å**	**V/ Å^3**	**β/ °**	**τ/ nm**
ZnHCF	Romboédrico	R-3c	10,76	-	41,47	4159,91	-	21,62
MnHCF	Monoclínico	$P2_1/c$	10,12	10,11	9,97	1020,92	92,50	18,74
CoHCF	Cúbico	Fm-3m	10,11	-	-	1034,20	-	15,91
NiHCF	Cúbico	Fm-3m	10,12	-	-	1036,59	-	12,04

Parâmetros das arestas da célula unitária (a, b, c); volume (V); ângulo beta (β) e tamanho de cristalito (τ)

Tabela 2S. Média e desvio padrão dos óxidos dos metais determinados pela FRX para os materiais analisados neste estudo (ZnHCF, MnHCF, CoHCF e NiHCF)

Materiais	**Porcentagem em Massa/ %**					
	K_2O	**Fe_2O_3**	**ZnO**	**Co_2O_3**	**NiO**	**MnO**
ZnHCF	7,40 ± 1,05	30,9 ± 0,6	61,6 ± 0,5	-	-	-
MnHCF	35,8 ± 1,9	31,20 ± 2,05	-	-	-	33,0 ± 0,3
CoHCF	23,1 ± 0,06	33,1 ± 0,1	-	43,8 ± 0,2	-	-
NiHCF	21,1 ± 1,3	34,8 ± 0,3	-	-	44,1 ± 0,9	-

Tabela 3S. Parâmetros hiperfinos obtidos a temperatura ambiente por Espectroscopia Mössbauer de ^{57}Fe para os materiais analisados neste estudo (ZnHCF, MnHCF, CoHCF e NiHCF)

Materiais	**Estado de Oxidação**	**& (± 0.05) / mm/s**	**ΔEq (±0.05) / mm/s**	**Γ (±0.05) / mm/s**	**Área (± 1) / %**
MnHCF	$Fe^{(II)}$ (LS)	-0,11	0,09	0,29	100
ZnHCF	$Fe^{(II)}$ (LS)	-0,13	0,08	0,29	100
CoHCF	$Fe^{(II)}$ (LS)	-0,11	0,14	0,30	77
	$Fe^{(III)}$ (HS)	-0,10	0,56	0,30	23
NiHCF	$Fe^{(II)}$ (LS)	-0,10	0,09	0,30	100

Deslocamento isomérico relativo ao α-Fe (&), desdobramento quadrupolar (ΔEq), largura de linha à meia altura (Γ) e da área espectral para todos os compostos analisados. LS refere-se aos estados de baixo-spin e HS aos estados de alto-spin.