

**Enabling the Electrochemical Activity in Sodium Iron Metaphosphate
[NaFe(PO₃)₃] Sodium Battery Insertion Material:
Structural and Electrochemical Insights**

Ritambhara Gond, Sher Singh Meena, S. M. Yusuf, Vivekanand Shukla,
Naresh K. Jena, Rajeev Ahuja, Shigeto Okada, and Prabeer Barpanda*

Supporting Information

Table S1. Selected interatomic distances d (Å) from the Rietveld-refined structure of NaFe(PO₃)₃ compound.

Fe1—O6	2.0804	Fe2—O4	2.1374	Fe3—O1	2.0761
Fe1—O9	2.0012	Fe2—O11	2.1818	Fe3—O12	2.1475
Fe1—O19	2.3485	Fe2—O15	2.1717	Fe3—O16	2.1331
Fe1—O21	2.1718	Fe2—O24	2.2838	Fe3—O23	2.0866
Fe1—O31	2.1312	Fe2—O26	2.1374	Fe3—O27	2.1878
Fe1—O33	2.2659	Fe2—O35	2.2199	Fe3—O36	2.0800
Fe4—O7	1.8936	Na1—O4	1.8422	Na2—O1	2.4336
Fe4—O10	2.0450	Na1—O10	2.8497	Na2—O9	1.9610
Fe4—O18	2.1460	Na1—O15	2.3140	Na2—O16	2.3474
Fe4—O20	2.0168	Na1—O20	2.8033	Na2—O21	2.4064
Fe4—O30	2.2854	Na1—O26	2.3163	Na2—O27	2.4330
Fe4—O32	2.2849	Na1—O32	2.4302	Na2—O33	2.4350
Na3—O6	2.3276	Na4—O7	2.5699		
Na3—O11	2.2845	Na4—O12	2.4111		
Na3—O19	2.6040	Na4—O18	2.4079		
Na3—O24	2.6561	Na4—O23	2.3484		
Na3—O31	2.3734	Na4—O30	2.6098		
Na3—O35	2.6151	Na4—O36	2.3948		

Table S2. Selected bond angles (°) from the Rietveld refinemen of NaFe(PO₃)₃.

O6—Fe1—O9	87.052	O4—Fe2—O11	168.479	O1—Fe3—O12	176.812
O6—Fe1—O19	80.678	O4—Fe2—O15	83.037	O1—Fe3—O16	87.543
O6—Fe1—O21	97.069	O4—Fe2—O24	92.877	O1—Fe3—O23	99.134
O6—Fe1—O31	87.050	O4—Fe2—O26	86.115	O1—Fe3—O27	82.245
O6—Fe1—O33	177.126	O4—Fe2—O35	87.275	O1—Fe3—O36	94.302
O9—Fe1—O19	168.486	O11—Fe2—O15	105.385	O12—Fe3—O16	90.311
O9—Fe1—O21	86.536	O11—Fe2—O24	79.457	O12—Fe3—O23	83.453
O9—Fe1—O31	103.887	O11—Fe2—O26	102.521	O12—Fe3—O27	99.955
O9—Fe1—O33	83.891	O11—Fe2—O35	84.567	O12—Fe3—O36	83.776
O19—Fe1—O21	84.196	O15—Fe2—O24	173.142	O16—Fe3—O23	166.474
O19—Fe1—O31	85.972	O15—Fe2—O26	82.937	O16—Fe3—O27	85.803
O19—Fe1—O33	101.946	O15—Fe2—O35	92.379	O16—Fe3—O36	100.697
O21—Fe1—O31	168.572	O24—Fe2—O26	91.315	O23—Fe3—O27	83.483
O21—Fe1—O33	84.421	O24—Fe2—O35	92.927	O23—Fe3—O36	90.579
O31—Fe1—O33	91.947	O26—Fe2—O35	172.315	O27—Fe3—O36	172.545
O7—Fe4—O10	96.777	O4—Na1—O10	121.835	O1—Na2—O9	108.218
O7—Fe4—O18	90.357	O4—Na1—O15	75.001	O1—Na2—O16	75.025
O7—Fe4—O20	106.957	O4—Na1—O20	173.390	O1—Na2—O21	177.813
O7—Fe4—O30	87.614	O4—Na1—O26	76.883	O1—Na2—O27	76.612
O7—Fe4—O32	166.008	O4—Na1—O32	107.196	O1—Na2—O33	101.772
O10—Fe4—O18	170.621	O10—Na1—O15	99.108	O9—Na2—O16	112.803
O10—Fe4—O20	88.465	O10—Na1—O20	63.963	O9—Na2—O21	71.320
O10—Fe4—O30	94.139	O10—Na1—O26	159.308	O9—Na2—O27	170.782
O10—Fe4—O32	84.501	O10—Na1—O32	72.033	O9—Na2—O33	70.750
O18—Fe4—O20	95.291	O15—Na1—O20	101.513	O16—Na2—O21	107.145
O18—Fe4—O30	80.034	O15—Na1—O26	76.091	O16—Na2—O27	75.933
O18—Fe4—O32	87.112	O15—Na1—O32	168.781	O16—Na2—O33	175.722
O20—Fe4—O30	164.814	O20—Na1—O26	96.897	O21—Na2—O27	109.689
O20—Fe4—O32	86.986	O20—Na1—O32	68.646	O21—Na2—O33	76.047
O30—Fe4—O32	78.394	O26—Na1—O32	109.683	O27—Na2—O33	100.399

O6—Na3—O11	109.513	O7—Na4—O12	102.356
O6—Na3—O19	71.698	O7—Na4—O18	70.354
O6—Na3—O24	175.896	O7—Na4—O23	174.879
O6—Na3—O31	76.192	O7—Na4—O30	68.266
O6—Na3—O35	107.3873	O7—Na4—O36	102.288
O11—Na3—O19	99.944	O12—Na4—O18	111.973
O11—Na3—O24	70.149	O12—Na4—O23	69.586
O11—Na3—O31	172.098	O12—Na4—O30	169.941
O11—Na3—O35	74.035	O12—Na4—O36	71.945
O19—Na3—O24	104.257	O18—Na4—O23	110.349
O19—Na3—O31	76.354	O18—Na4—O30	69.125
O19—Na3—O35	173.379	O18—Na4—O36	172.064
O24—Na3—O31	103.753	O23—Na4—O30	116.820
O24—Na3—O35	76.547	O23—Na4—O36	77.252
O31—Na3—O35	109.963	O30—Na4—O36	105.766
