電気化学環境下におけるイオン液体の電子励起スペクトル

Electronic excitation spectra of ionic liquids in electrochemical environment

阪大院基礎工　○田邊一郎，寿山安紀，佐藤大輝，今井雅也，福井賢一

Osaka Univ., °Ichiro Tanabe, Aki Suyama, Taiki Sato, Masaya Imai, Ken-ichi Fukui

E-mail: itanabe@chem.es.osaka-u.ac.jp

アニオンとカチオンのみから構成されるイオン液体は、難燃性や極端に低い蒸気圧などの特徴から新奇電解液としても注目されている。我々は近年、独自の減衰全反射遠紫外分光法(Attenuated total reflectance-far ultraviolet: ATR-FUV)を利用することで、種々のイオン液体の波長 150-450 nm にわたる電子励起スペクトル測定を進めてきた[1]。

さらに最近では、電気化学環境下で測定可能なシステム(Figure 1a)を構築し、イオン液体の ATR スペクトルの印可電圧依存性を明らかにした。特に、ヨウ化物イオンをアニオンにもつイミダゾリウム系イオン液体(1-butyl-3-methylimidazolium iodide (BMIM-I))では、アニオンとカチオンの間での電荷移動に伴う吸収の強度が大きく増減した。これらの変化は、量子化学計算と分子動力学(MD)計算による検討から、電極電位に応じた電極近傍のアニオン濃度の変化に由来することが示唆された。本研究で測定する波長 150~450 nm の領域では、エバネッセント波の浸み出しが 100 nm 以下と短いため、電極界面のイオン液体の電子状態を強く反映したスペクトルが測定されたと考えられる。

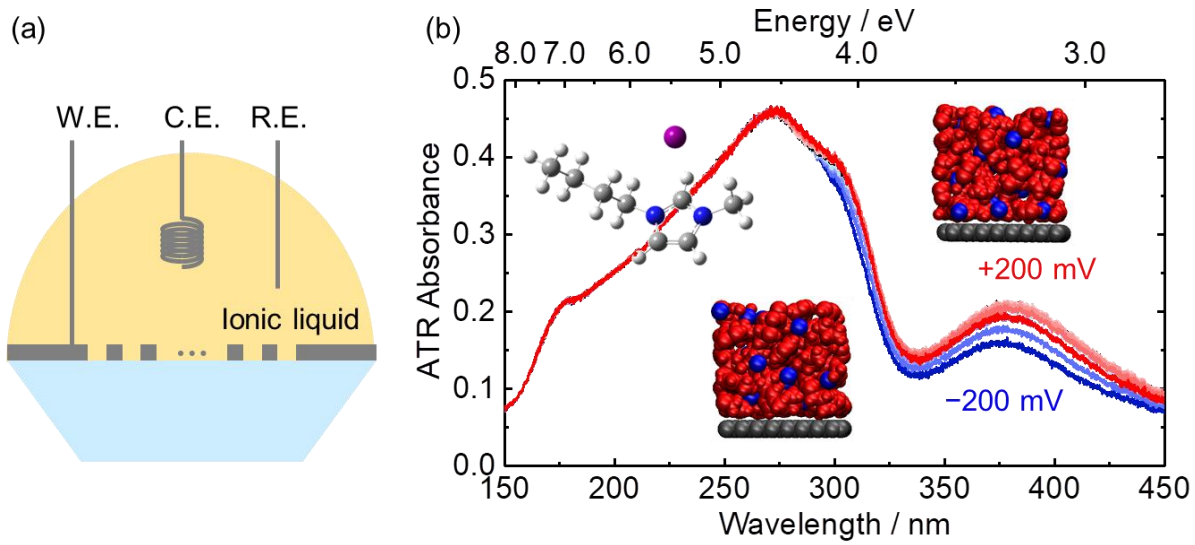

Figure 1. (a) A schematic diagram of the developed electrochemical ATR spectroscopic system and (b) ATR spectra of BMIM-I in electrochemical environment between +200 mV and -200 mV vs. Pt. Insets in b show the structure of BMIM-I and MD simulations (red: $BMIM^+$ cations and bleu: I^- anions)

[1] I. Tanabe, Y. Kurawaki, Y. Morisawa and Y. Ozaki, **Phys. Chem. Chem. Phys.**, 18, 22526-22530 **(2016)**; I. Tanabe, A. Suyama, T. Sato and K. Fukui, **Analyst**, 143, 2359-2545 **(2018)**.

© 2019年 応用物理学会