

表面 X 線散乱法を用いたイオン液体/Au(111)電極表面の その場構造解析

田村和久¹、宮口真一郎²、阪上潔²、西畑保雄¹
日本原子力研究開発機構¹、関西学院大学大学院理工学研究科²

イオン液体は常温常圧下で液体の塩であり、構成するカチオンおよびアニオンをデザインすることで、難燃性、不揮発性、高電気伝導性などの機能を持つ塩の合成が可能である。近年、このようなイオン液体の特徴を生かし、イオン液体を電解質としたりリチウムイオン電池、燃料電池、電気二重層キャパシタなどの電気化学デバイスの研究が急速に進んでいる。しかしながら、これら電気化学デバイスの性能を決める重要な要素である、イオン液体/電極界面の構造や振る舞いについては、技術的な問題が多く、理解が進んでいない。イオン液体/電極界面は、まさに電気化学反応の反応場であり、その構造や振る舞いを理解することは非常に重要である。そこで本研究では、表面X線散乱法を用い、in situ でイオン液体の1つである、1-butyl-1-methylpyrrolidinium bis(trifluoromethylsulfonyl)amide ([BMP]TFSA)中での Au(111)電極表面構造の電極電位依存性を詳細に調べた。

図1に、[BMP]TFSA 中における Au(111)単結晶電極の電流電位曲線および Au(111)-(1 × 1)構造からの回折強度を示す。E = -1 V を初期電位として -3.2 V まで電位掃引を行った場合(細線)、E = -1.5 V を境に負側では(1 × 1)構造からの回折強度が減少し、正側では強度が増加した。また、E = -1 V を初期電位とし、E = 1.2 V まで電位掃引した場合(太線)、E = 0 V 付近で回折強度が一旦落ち込み、E = 0.9 V 付近から大きく減少することが分かった。これらの結果から、[BMP]TFSA 中における Au(111)電極表面の電位依存性は、①再構成が進む再構成領域(E < -1.5 V)、②(1 × 1)構造が安定な(1 × 1)領域(-1.5 < E < 0.05 V)、③(1 × 1)構造が安定であるが、電気二重層の構造が異なる (1 × 1)-II 領域(0.05 < E < 0.9 V) に分けられることが分かった。

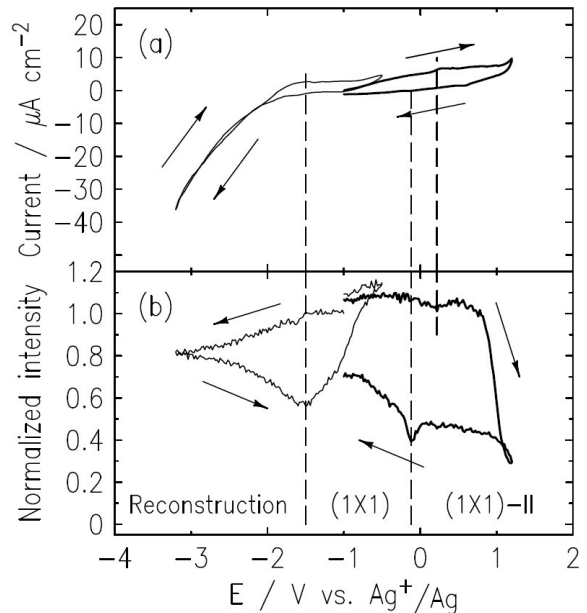


図1 [BMP]TFSA 中における Au(111)電極の(a)電流電位曲線および(b)Au(111)-(1 × 1)構造からのX線回折強度の電位依存性：掃引速度 $v = 2 \text{ mV s}^{-1}$ 、細線は電位掃引を-1 ~ -3.2 Vの間で行った場合、太線は-1 ~ 1.2 Vの間で行った場合。