

平成27年度 トピックス

分子・物質合成プラットフォームにおける利用成果

ヨウ素添加イオン液体の低温核磁気共鳴測定

^a防衛大学校, ^b昭和薬科大学

青野 祐美^a, 阿部 洋^a, 清谷 多美子^b

【目 的】

イオン液体は、室温で液体の塩であり、不揮発・不燃である上、電気伝導性を有するため、リチウムイオン電池などの電解質応用が期待されている材料である。数多あるイオン液体の中でも、固体ヨウ素を添加したイオン液体は、複数のポリヨウ素イオンの形成による、高い電子輸送能力を有する可能性があるかと期待できる材料である。しかし、ポリヨウ素イオンは特殊な状態であり、研究報告はほとんどない。本研究は、ヨウ素添加イオン液体の核磁気共鳴(NMR)測定を試み、イオン液体中でのポリヨウ素アニオンの状態を明らかにすることにより、太陽電池の光吸収層および電子輸送層への応用を目指すものである。

【成 果】

分子科学研究所のNMR(JNM-ECA600)を利用し、カチオンのアルキル側鎖長が異なる4種類のイミダゾリウム系イオン液体([C₂mim][I], [C₃mim][I], [C₄mim][I], [C₆mim][I]:各数字がアルキル側鎖の長さを表す(図1参照))に固体ヨウ素を添加したI_x⁻(xは分子数であり、整数である)アニオンを有する試料を-20℃から50℃までの温度範囲で¹²⁷Iのスペクトルを測定した。

その結果、¹²⁷I自体の測定例も少なく、イオン液体においては、おそらく初めてとなる¹²⁷Iスペクトルの取得に成功した。また、カチオンのアルキル鎖長依存性(図2)および温度依存性(図3)を明確に捉えることができた。さらに、図3の20℃で測定したNMRスペクトルにみられるように、測定温度が低い場合には、¹²⁷Iに2つのピークの存在が示唆される結果が得られた。これらのピークは、状態の異なるヨウ素原子(イオン)の存在を示唆しており、カチオンの種類によってピークが出現する温度が異なる、ヨウ素添加量xに対してピーク位置が異なる(ピークシフトが起こる)など、デバイス作製上、重要な知見が得られた。今後、シミュレーションと組み合わせてピークの同定を行っていく予定である。

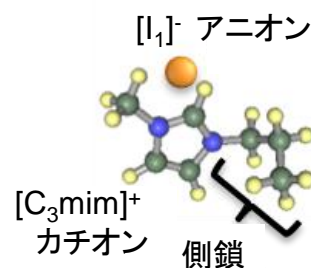


図1. [C₃mim][I₁] の構造

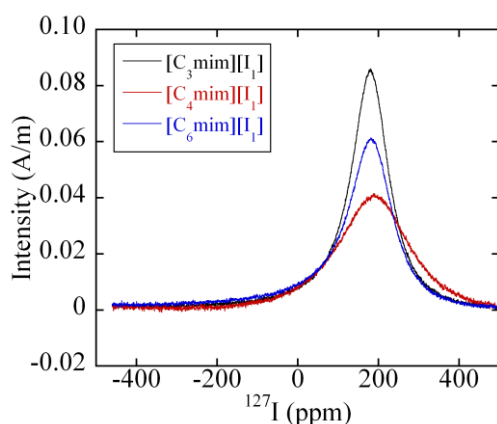


図2. アニオンの異なるイオン液体のNMRスペクトル

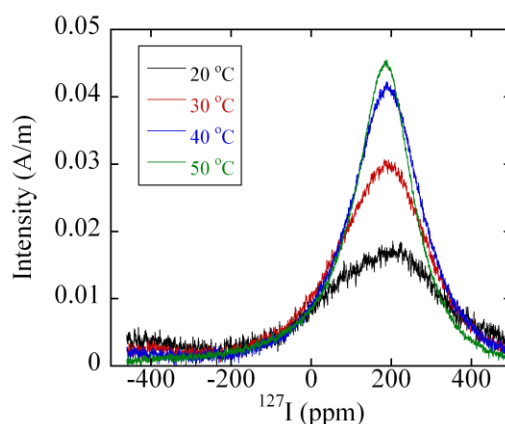


図3. [C₄mim][I₁]のNMRスペクトルの温度依存性