

## ATR-Far UV を用いた有機溶媒電解質の溶媒和構造分析手法の開発

(立教大理<sup>1</sup>) ○上野 那美<sup>1</sup>・田邊 一郎<sup>1</sup>

Development of the analytical method for the solvation structure of the organic electrolytes by ATR-far UV (<sup>1</sup>College of Science, Rikkyo University) ○Nami Ueno,<sup>1</sup> Ichiro Tanabe,<sup>1</sup>

The electrolyte is a critical component that predominantly influences the performance of lithium-ion batteries. The solvation structure within the electrolyte, which consists of solvent molecules and anions, plays a pivotal role in determining its functionality. Most important is the coordination number of solvent molecules and the location of anions around the lithium-ion. This research aims to establish an analytical method to investigate changes in the solvation structure induced by the stimulation like Li salt concentration, employing electronic transition analysis. Specifically, this study elucidates the mechanisms underlying the variations in the absorption spectra of organic solvents in the carbonate series within the far-ultraviolet (Far-UV) region, as measured using attenuated total reflectance far-ultraviolet (ATR-FUV) spectroscopy.

*Keywords* : ATR far-ultraviolet spectroscopy, organic electrolyte, solvation structure, electronic states, surface analysis

Li<sup>+</sup>電池における電解質選択は電池性能を左右する重要な要素である。特に電極において安定な固体電解質界面形成が重要である。SEIの形成において支配的要因となるのは電極近傍における電解質の構造である。つまりLi<sup>+</sup>に対する溶媒の配位数やアニオンの相対位置等の溶媒和構造を理解することが重要である。本研究は溶媒やアニオン由来の電子遷移を直接観測可能である減衰全反射遠紫外分光(ATR-FUV)法を用いることでLi塩濃度等による溶媒和構造の変化を電子吸収スペクトルの解析から明らかにすることを目的とする。図1に示すように代表的な溶媒であるEC, DMCにおいて溶媒和の形成に伴い生じるピークシフトが反対方向に生じることが明らかとなった。発表では量子化学計算をベースに、これらの要因についても報告を行う。

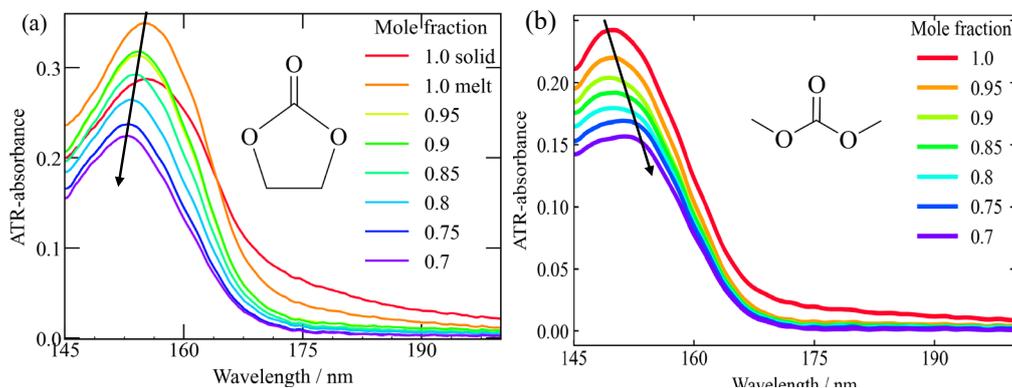


Fig. 1 ATR-FUV スペクトルにおける(a) Ethylene carbonate、(b) Dimethyl carbonate 溶媒と LiBF<sub>4</sub> からなる電解質の LiBF<sub>4</sub> 濃度依存性