(※本報告書は英語で記述してください。ただし、産業利用課題として採択されている方は日本語で記述していただいても結構です。)

Experimental Report	
	提出日 Date of Report
課題番号 Project No.	装置責任者 Name of Instrument scientist
2013B0103	柴田薫
実験課題名 Title of experiment	装置名 Name of Instrument/(BL No.)
中性子準弾性散乱による二次電池電極表面での電解質溶液の	DNA (BL-02)
ダイナミクスの解明	実施日 Date of Experiment
実験責任者名 Name of principal investigator	2014/02/24 ~ 2014/02/26
山口敏男	
所属 Affiliation	

試料、実験方法、利用の結果得られた主なデータ、考察、結論等を、記述して下さい。(適宜、図表添付のこと) Please report your samples, experimental method and results, discussion and conclusions. Please add figures and tables for better explanation.

- 1. 試料 Name of sample(s) and chemical formula, or compositions including physical form.
- (1) 二次電池陰極用グラファイトカーボン(ECO)
- ② エチレンカーボネート単体(EC100)

福岡大学

③ エチレンカーボネート 20wt% / グラファイトカーボン混合物(EC20)

2. 実験方法及び結果(実験がうまくいかなかった場合、その理由を記述してください。)

Experimental method and results. If you failed to conduct experiment as planned, please describe reasons.

吸着材あるいは電池電極材は、比有効体積あるいは重量あたりの反応効率を高めるため、高比表面積の材料を必要とする。それと同時に反応速度を高めるためには被吸着分子である、溶媒や溶質、さらに溶媒和した溶質分子が容易に材料表面を移動する必要がある。活性炭などの多孔質材料は小さな細孔を表面に多く形成させれば、比表面積は増大するが、イオンや溶媒和した分子がそれらの細孔内に拡散できなければ必要な機能は得られない。電解質に液体を利用する通常の二次電池においては、電解質、溶質イオン、各種添加剤と電極表面との相互作用は電池特性に直接影響を与える重要な因子の一つである。そこで、本課題では中性子準弾性散乱(QENS)測定を用いて、電解質溶液のダイナミクスに対して、電極材料として利用されるグラファイトカーボンが与える影響を明らかにすることを目的とした。

実験に用いた試料はグラファイトカーボン (ECO)、エチレンカーボネート単体 (EC100)及び、エチレンカーボネート 20wt% / グラファイトカーボン混合物 (EC20)である。測定はダイナミクスの全貌を把握するための Elastic Scan と詳細にダイナミクスを解析するための準弾性散乱測定を行った。Elastic Scan は 10 ~ 330 K の範囲を 1K/min で測定した。準弾性散乱は 330 K で 6h 程度測定した。エネルギー分解能は DNA の高分解

2. 実験方法及び結果(つづき) Experimental method and results (continued)

モード(E_{Reso} =3.5 μ eV)とした。

Figure 1 には各試料の平均自乗変位の温度依存性を示した。EC100及びEC20では、融点に対応した310K付近で平均自乗変位に飛びが見られた。しかしながら、細孔に吸着した分子でよく見られる融点以下の温度域での変化は見られなかった。

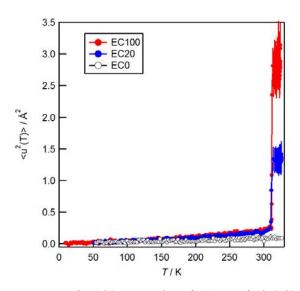


Figure1: 各試料の平均自乗変位の温度依存性

Figure 2 には EC20 の準弾性散乱測定(330K)で得られた準弾性プロファイルを示した。グラファイトカーボン由来の Elastic 成分と、液体状態のエチレンカーボネートに由来する準弾性散乱が観察された。得られたプロファイルを、デルタ関数、ローレンツ関数、定数バックグラウンドの和として表現し、装置関数を畳み込んでフィッティングすることで、よくフィットされた。しかしながら、高いQ側は測定エネルギー範囲よりも広い緩和成分となり、フィッティングできなかった。得られたローレンツ関数の半値半幅を散乱ベクトル(Q)に対してプロットしたところ、低Q側ではQ²に比例することが明らかになった。EC20とEC100を比較すると、得られる拡散係数に差がないことが分かった。このことから、今回実験に用いたグラファイトカーボン内にはエチレンカーボネートは侵入・吸着していないことが明らかになった。

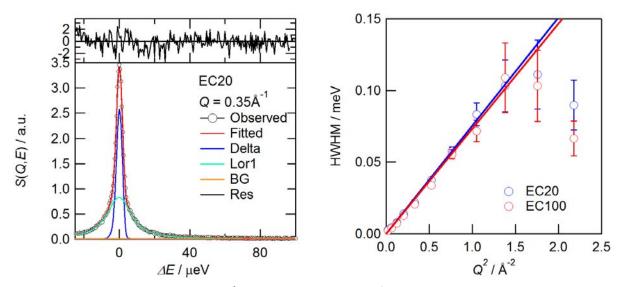


Figure2: EC20 の準弾性散乱プロファイルとフィッティングにより得られた半値半幅の Q 依存性