

有機イオン結晶材料の結晶化制御と応用展開

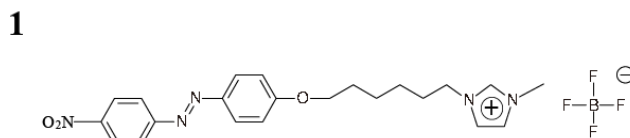
(デンソー¹・東京大学生研²・東京大学環安セ³) ○石野 勝真¹・眞貝 孟¹
・疋田 育之¹・吉川 功²・北條 博彦^{2,3}・岩瀬 勝則¹

Structural chemistry considerations and application development for controlling crystallization of ionic crystals exhibiting both hot and cold crystallization (¹ *DENSO CORP.*, ² *Institute of Industrial Science, The University of Tokyo*, ³ *Environmental Science Center, The University of Tokyo*) ○Katsuma Ishino,¹ Hajime Shingai,¹ Yasuyuki Hikita,¹ Isao Yoshikawa,² Hirohiko Houjou,^{2,3} and Katsunori Iwase¹

The use of thermal energy in heat storage applications requires exothermic behavior in either the cooling or the heating process, depending on its demand. In many cases, this is a material-specific behavior associated with a phase transition necessitating the use of different materials for each demand. We have focused on an ionic liquid crystal (**1**), which exhibits an exothermic crystallization process during both cooling and heating processes, and successfully manipulated its crystallization temperature by the addition of carbon nanotubes (CNTs), thereby expanding the design principle for heat storage application. First, we identified that the nature of the intermediate phase formed during cooling dictates the successive crystallization behavior upon heating from structural chemical studies. [1] Secondly, we identified that the crystallization of this intermediate phase is kinetically controllable by the diameter of the added CNTs through interaction via the imidazolium ring of **1**, significantly changing its exothermic behavior. [2] In this presentation, we will discuss design strategies at the molecular level to engineer materials exothermic behavior and its application to thermal energy utilization.

Keywords : ionic liquid crystals; hot & cold crystallization; thermal analysis; ONIOM calculation

蓄熱による熱エネルギーの利用では、その需要により、冷却および加熱過程のいずれかでの発熱挙動が求められる。多くの場合、発熱挙動は材料固有の現象であるため、需要毎に材料を使い分ける必要があった。我々は、冷却および加熱の両過程で結晶化による発熱挙動を示すイオン結晶 (**1**, Fig. 1) にカーボンナノチューブ (CNT) を添加することで結晶化温度の変調に成功し、蓄熱材設計に新たな指針を提示するに至った [1, 2]。第一に、純粋な **1** が冷却過程で中間的な結晶相を介することを構造化学的な分析により明らかにした [1]。そして、CNT を **1** に添加した系では、CNT の内径が **1** の中間的な結晶相の結晶形成挙動を速度論的に支配することを見出し、この挙動が **1** のイミダゾリウム環の運動に起因することを明らかにした [2]。本発表では、**1** の分子レベルの相互作用の理解に基づき、熱需要に対応するための発熱挙動を制御する分子設計戦略と熱エネルギー利用への応用展開について議論する。



[1] **K. Ishino** *et al.*, *ACS Omega* **2021**, 6, 48, 32869–32878, [2] K. Iwase, **K. Ishino**, *et al.*, *J. Phys. Chem. C* **2022**, 126, 26, 10668–10676.