

アイドリングストップ車用パラフィン系蓄冷剤の構造研究

(名古屋工業大学)○八反大貴・井田隆

(背景) アイドリングストップ車はエンジン停止時に、蓄冷剤によって車室内温度を維持している。**n-hexadecane**をはじめとする高級パラフィン、その相転移に伴う潜熱量の高さから蓄冷剤として用いられる。蓄冷剤の性能を向上するための材料設計には、融解直下の温度での結晶構造を知ることが重要である。

(方法) 実験はあいちシンクロトロン光センター BL5S2 ビームラインにて行われた。X線粉末回折データより結晶構造の解析を実施した。実測の13本のピーク位置を再現するように格子定数を調整した。次に16本の回折ピークの強度を抽出し、分子の配向を変化させながら回折強度を計算し、最小二乗解を求めた。

(結果) Fig.1 (左)は、今回測定された粉末回折データに基づいて求めた **n-hexadecane** の結晶構造投影図である (構造モデル A)。この構造の特徴として、1)a 軸方向に伸びた帯状のユニットが **b*** 軸方向に積層してシート状の構造を作る。2)b 軸方向には、分子の凸部と凹部がはまりあうように積層している。3)ab 面内に広がったシート状の構造が **c*** 軸方向に積層する。この時、分子末端の凸部と、隣のシート構造中の分子の隙間に相当する凹部がはまりあうように配置する。また、Nyburg ら^[1]と Métivaud ら^[2]によって **n-hexadecane** の結晶構造が報告されている。Nyburg らは **n-hexadecane** の結晶構造を粉末X線回折データとエネルギー計算から導いた。この構造を Lenard-Jones ポテンシャルによる計算により再現した(構造モデル B), Fig.1 (右)。構造モデル A, B により計算された回折強度の R 値はそれぞれ 9.1%, 58.0% であった。Fig.2 に実測回折図形(上)、構造モデル A, B による計算回折強度(それぞれ中、下)を示す。また、Lenard-Jones ポテンシャルを用いて計算されたエネルギーは、構造モデル A, B のそれぞれについて -38.71 kcal/mol , -39.16 kcal/mol であった。

[1]S. C. Nyburg et al. Acta Cryst. **B32**, 2289-2293 (1976).

[2]Valérie Métivaud et al. Chem. Mater. **17**, 3302-3310 (2005).

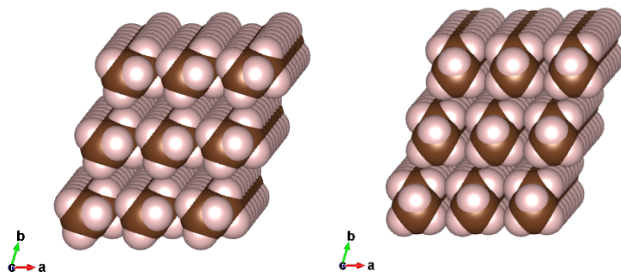


Fig.1 **n-hexadecane** の結晶構造の比較

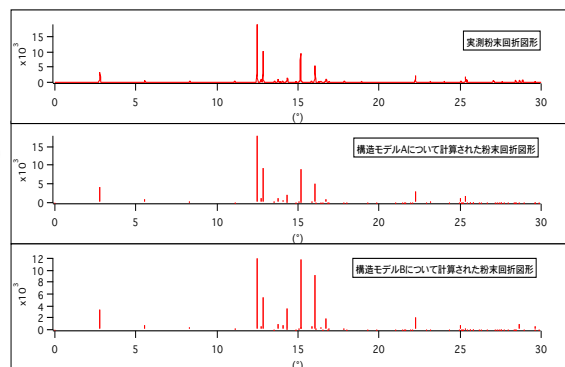


Fig.2 粉末回折パターンの比較