日本化学会 第105春季年会 (2025)

深共晶溶媒リラインの分子間ダイナミクス：温度依存性

（千葉大院理）○城田 秀明・KOYAKKAT Maharoof

Intermolecular Dynamics of Deep Eutectic Solvent Reline: Temperature Dependence

(*Graduate School of Science, Chiba University*) ○Hideaki Shirota, Maharoof Koyakkat

Deep eutectic solvents are currently getting attention for their unique characteristics, such as less flammability, facile preparation, electrical conductivity, etc. The temperature dependence of the intermolecular dynamics, including intermolecular vibration and orientational relaxation, of one of the most typical deep eutectic solvents, reline, was investigated by femtosecond Raman-induced Kerr effect spectroscopy and subpicosecond optical Kerr effect spectroscopy[1]. The low-frequency band attributed to the intermolecular vibrations of the Kerr spectrum of reline showed a redshift with increasing the temperature, while the orientational relaxation band exhibited a blue shift. The temperature dependence of the intermolecular vibrational band of reline is about two times larger than that of ionic liquids[2]. The difference in the temperature dependence of the intermolecular vibrational band between reline and ionic liquids is coming from the difference in their major intermolecular interaction natures: hydrogen-bonding interaction and Coulombic interaction.

Keywords : Deep Eutectic Solvent, Reline, Dynamic Optical Kerr Effect Spectroscopy, Intermolecular Vibration, Temperature Dependence

深共晶溶媒は難燃性，調整の容易さ，導電性などのユニークな性質を有しているため，最近非常に注目を集めている。本研究では，典型的な深共晶溶媒の一つであるリラインの分子間ダイナミクス（分子間振動と集団的な配向緩和）の温度依存性をフェムト秒ラマン誘起カー効果分光とサブピコ秒光カー効果分光で検討した。温度の上昇に対して，リラインの分子間振動に由来するバンド（約 100 cm^{-1}）は低振動数シフトし，配向緩和に由来するさらに低振動数のバンド（0.01–0.1 cm^{-1}）は高振動数シフトした。リラインの分子間振動バンド（一次モーメント）の温度依存性は，イオン液体のもの[2]よりもおおよそ倍程度大きくなった。リラインとイオン液体の分子間振動バンドにおけるこの温度依存性の違いは，主要な分子間相互作用の性質の違い，すなわち水素結合相互作用とクーロン相互作用によるものと考えられる。

1) Temperature Dependence of Intermolecular Dynamics and Liquid Properties of Deep Eutectic Solvent, Reline. H. Shirota, M. Koyakkat, J. Rajbangshi, R. Biswas, *J. Phys. Chem. B*, in press.

2) Temperature-Dependent Features in Low-Frequency Spectra of Ionic Liquids. H. Shirota, S. Kakinuma, *Theoretical and Computational Approaches to Predicting Ionic Liquid Properties*, Joseph, A.; Mathew, S., Eds. Elsevier: Amsterdam, 2021; pp 159−182.