

カラムナー集積構造を形成するヘキサアザトリフェニレン誘導体の電子物性評価

(関西学院大理工¹・JST さきがけ²) ○森 宥貴¹・藤原 誠¹・中尾 圭佑¹・豊嶋 広樹¹・吉川 浩史¹・田中 大輔^{1,2}

Characterization of Electronic Properties of Hexaazatriphenylene-Derivatives with Columnar Structure

(¹Graduate School of Engineering, Kwansei Gakuin University, ²JST PRESTO) ○Hiroki Mori,¹ Makoto Fujiwara,¹ Keisuke Nakao,¹ Hiroki Toshima,¹ Hirofumi Yoshikawa,¹ Daisuke Tanaka,^{1,2}

Recently, redox-active organic compounds have been investigated as cathode active materials for new generation lithium ion batteries (LIBs) with high-capacities. In this work, we focus on 1,4,5,8,9,12-hexaazatriphenylene-derivatives (HATCNO_{C_n}) with alkoxy groups and nitrile groups introduced alternately. These molecules show columnar assemble structures in a self-organizing manner. Herein, we aimed to investigate the relationship between the packing structures and the electrochemical properties of HATCNO_{C_n}.

Keywords : Lithium Ion Battery; 1,4,5,8,9,12-Hexaazatriphenylene-Derivative; Column Structure

近年、次世代リチウム電池の開発において正極材料として酸化還元活性な有機分子を用いようと試みる研究が盛んにおこなわれている。本研究では、ニトリル基とアルコキシ基が交互に置換し、C₃ 対称性を有するヘキサアザトリフェニレン (HAT) 誘導体 HATCNO_{C_n} に着目した。HATCNO_{C_n} は置換基効果により強い分子間相互作用 (π-π 相互作用) を示し、カラムナー構造を自己組織的に実現することが知られている。このカラムナー構造のパッキングが電気化学特性にどのように影響を及ぼすかを報告する予定である。

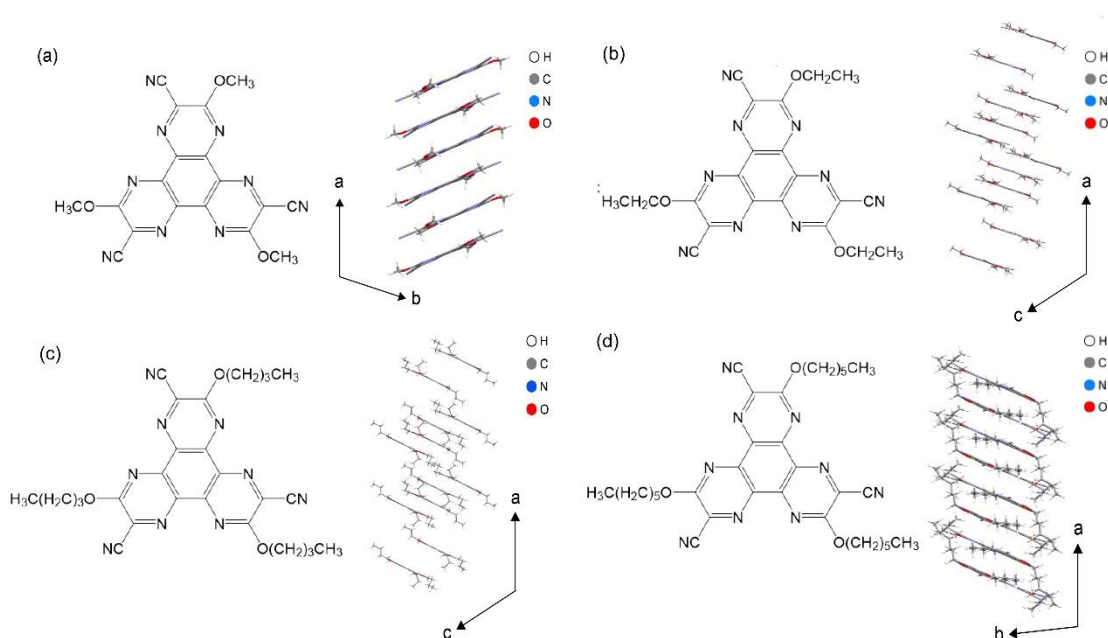


図 1. 本研究で用いた HATCNO_{C_n} の結晶構造。ニトリル基と C_nH_{2n+1}O- の直鎖アルコキシ基が交互に置換した分子構造を有する。(a) $n = 1$, (b) $n = 2$, (c) $n = 4$, (d) $n = 6$ 。