

目 次

まえがき i

I エキゾチック π 電子系有機分子の設計・合成

1 有機導電体の設計と合成菅原 正, 泉岡 明... 3

- 1 分子性導体の電子構造 3
 - 1.1 ドナーのカチオンラジカルの一次元配列とダイマーモデル 3
 - 1.2 混合原子価状態の電子構造 4
 - 1.3 強電子相関系の電子構造 5
 - 2 新しいドナー・アクセプターの設計指針 6
 - 3 拡張 π 電子系を有するドナー・アクセプターの設計 8
 - 3.1 拡張 π ドナーの設計 8
 - 3.2 拡張 π アクセプターの設計 9
 - 4 多彩な伝導経路を可能にするドナーの設計 9
 - 4.1 カルコゲン原子の接触と導電経路の形成 9
 - 4.2 ダイマー型ドナーの特徴 10
 - 4.3 導電経路の多次元化 11
 - 4.4 導電経路の直交化 11
 - 5 超分子構造体の構成単位となるドナーの設計 13
 - 5.1 配列制御部位を組込んだドナー・アクセプター 13
 - 5.2 包接体結晶を与えるドナー 15
 - 6 強電子相関関係を出現しうるドナー・アクセプター 16
 - 6.1 強電子相関を示しうるドナー分子集合体の構築 26
 - 6.2 バンドフィリングを制御しうるドナー・アクセプター 17
 - 6.3 2重交換相互作用を有する有機磁性金属の設計 18
- 文 献 20

2 π 共役系オリゴマー・ポリマーの分子設計・合成

——高規則性 π 共役芳香族高分子の合成を中心に山本隆一, 丸山 司...22

- 1 π 共役芳香族高分子の合成法 22
 - 1.1 ポリ(*p*-フェニレン)(PPP) 22
 - 1.2 ポリ(チオフェン-2,5-ジイル)(PTh) 27
 - 1.3 ポリ(ピリジン-2,5-ジイル)(Ppy) およびポリキノリンジイル(PQ) 32
 - 1.4 ポリ(アリーレンビニレン) 35
 - 1.5 ポリ(アリーレンエチニレン) 36
 - 1.6 π 共役有機金属ポリマー 37
- 文 献 39
<追 補> 42

3 分子性有機磁性体の分子設計・合成杉本豊成...44

- 1 有機高スピン分子の合成と有機高スピンポリマーへの展開 45
- 2 分子間強磁性的相互作用を有する有機ラジカル結晶 46
- 3 有機 CT 錯体に基づく有機磁性体の開発 47
 - 3.1 縮重軌道をもつ有機ドナーおよびアクセプターの合成とその基底スピン状態 48

- 3.2 有機 CT 錯体強磁性体合成の試み 49
- 3.3 ラジカル置換基を有するドナーあるいは
アクセプターの CT 錯体——有機強磁性
体, フェリ磁性体および強磁性金属の可
能性 52
文 献 54
- 4 強磁性高分子の分子設計・合成……………岩村 秀…57
- 1 分子内スピン整列の設計 58
- 2 高スピン有機分子の設計——Hund 則を
破る非 Kekulé 分子の発見 60
- 3 高スピンオリゴマーおよびポリマーの合
成と磁性 63
文 献 69
- 5 アモルファス分子材料の分子設計・合成……………城田靖彦…71
- 1 ガラスとは 71
- 2 ガラスの生成と確認 72
- 3 アモルファス分子材料 73
- 3.1 真空蒸着法その他によって生成するアモ
ルファス膜 73
- 3.2 高いガラス転移温度を有する安定なガラ
ス 73
- 4 π 電子系スターバースト分子の合成 76
- 5 分子構造とガラス形成能との相関 77
- 6 分子構造とガラス転移温度との相関 78
- 7 ガラスからの緩和過程——ポリモルフィ
ズム 78
- 8 ガラス状態における反応と物性 79
- 8.1 導電性 80
- 8.2 電荷輸送特性 80
- 8.3 分子性ガラスマトリックス中におけるフ
ォトクロミック反応 80
- 9 アモルファス分子材料の有機エレクトロ
ルミネッセンス素子への応用 81
文 献 82
- 6 分子軌道法を用いる π 電子系機能分子の設計……………
……………山口 兆, 中野雅由, 森 和亮…83
- 1 磁氣的性質 83
- 1.1 スピン整列規則 83
- 1.2 有効交換積分(J)の理論計算 85
- 1.3 転移温度の推算 87
- 2 有機磁性金属の分子設計 87
- 3 光学的性質 89
- 3.1 電子相関効果 89
- 3.2 周波数依存分極率および超分極率 90
- 3.3 非線形光学スペクトルの計算 91
文 献 92
- II π 電子系有機固体における電荷の振舞い
- 7 有機半導体の新展開……………井口洋夫 95
- 1 有機半導体の分類とその歴史的流れ 95
- 2 BTQBT 98
- 3 BTQBT の電子構造とエネルギー帯構造 99
- 4 有機半導体のこれから 101
文 献 102
- 8 分子性金属・超伝導体の結晶構造……………小林速男, 小林昭子… 104
- 1 金属状態が実現する条件 105
- 2 部分酸化型一次元白金錯体 105
- 2.1 中心金属の鎖状配列 105
- 2.2 格子変調 106

- 3 分離積層型カラム構造をもつ分子性金属 106
- 3.1 平行カラム構造 106
- 3.2 立体交差型カラム構造 107
- 4 多カルコゲン分子とカラム間相互作用の導入 108
- 4.1 TMTSF系 108
- 4.2 金属ジチオレン錯体 109
- 5 BEDY-TTF 超伝導体——二次元分子配列様式をもつ超伝導体 109
- 5.1 β -型構造 110
- 5.2 κ -型構造 110
- 5.3 その他の重要構造 111
- 6 遷移金属錯体分子を構成要素とする伝導体 112
- 6.1 $M(dmit)_2$ ($M=Ni, Pd$) の超伝導体の構造タイプ 112
- 6.2 その他の重要な伝導体 113
- 文献 114
- 9 分子性金属・超伝導体の物性小林速男, 加藤礼三... 115
- 1 強結合近似バンド 115
- 2 一次元金属と不安定性 116
- 2.1 一次元 d バンド 116
- 2.2 分極率の異常 117
- 2.3 格子変形とバンドの分裂 118
- 2.4 交互積層カラム 118
- 3 擬一次元金属状態 118
- 3.1 次元性 118
- 3.2 TMTSF 超伝導体 120
- 4 二次元金属系 121
- 4.1 BEDT-TTF 超伝導体など 121
- 4.2 分子性金属のフェルミ面 123
- 5 その他の伝導体 124
- 5.1 $M(dmit)_2$ 超伝導体 124
- 5.2 DCNQI-Cu 系 125
- 文献 126
- 10 導電性高分子の電子物性田中政志, 神谷幸司... 128
- 1 ポリアセチレン(PA)の電子構造 128
- 2 少量ドーブしたポリアセチレンの電子構造 128
- 3 多量にドーブしたポリアセチレンの電子物性 130
- 4 ポリピロール(PPY)およびその類似化合物の電子物性 134
- 5 ポリアニリンの電子物性 135
- 6 共役系高分子の応用 138
- 文献 140
- 11 フラーレン固体の電子物性丸山有成... 143
- 1 フラーレン(C_{60})分子の電子状態 144
- 2 フラーレン(C_{60})固体の電子状態と物性 146
- 2.1 C_{60} 結晶の分子配向と結晶構造 146
- 2.2 バンド構造と導電性 149
- 3 フラーレン化合物の電子物性 152
- 3.1 C_{60} 化合物の電子構造の基本的問題 152
- 3.2 C_{60} 化合物における分子配向 153
- 3.3 M_3C_{60} の超伝導機構について 154
- 3.4 C_{60} 錯体の磁性について 157
- 3.5 C_{70} および金属入りフラーレン 157
- 文献 158
- 12 有機非晶固体における電荷輸送城田靖彦... 161
- 1 ドリフト移動度 161
- 2 非晶固体系における電荷輸送の特徴 162
- 3 非晶固体系における電荷輸送の理論とモデル 162
- 3.1 Scher-Montroll 理論 162
- 3.2 ドリフト移動度のホッピングサイト間距離, 電場強度および温度依存性 163

- Poole-Frenkel モデルに基づく経験式
163 / Small-polaron モデル 164 /
Disorder モデル 165
- 4 最近の研究例 166
- 4.1 負の電場強度依存性 166
- 4.2 活性化エネルギーのホッピングサイト間
距離依存性 167
- 4.3 電子輸送 168
- 4.4 バインダーポリマーの影響 168
- 4.5 分子性ガラスにおける電荷輸送 169
- 文 献 171

III π 電子系有機固体におけるスピンの振舞い

- 13 強磁性的分子間相互作用のメカニズム阿波賀邦夫... 175
- 1 McConnell の提案 175
verdazyl 180
- 2 強磁性的ラジカル分子の電子状態 178
- 3 強磁性的な分子間配置 179
- 3.1 Galvinoxyl 179
- 3.2 1,5,6-Triphenyl-3(4-nitrophenyl)
4 McConnel の2つの提案, その同等性
181
- 文 献 183
- 14 低分子量有機 radical 結晶の磁性木下 實... 187
- 1 有機 radical の磁性 187
- 2 反強磁性相互活用 188
- 3 Polyradicals 191
- 4 強磁性相互作用 193
- 5 有機強磁性体 195
- 5.1 *p*-NPNN の β 相 195
- 5.2 その他の化合物 197
- 文 献 198
- 15 高分子系有機固体の磁性蒲池幹治... 200
- 1 主鎖共役型高分子 200
- 2 平面網目状高分子 206
- 3 含金属高分子 207
- 文 献 212

IV π 電子系有機固体の応用

- 16 FET 素子——有機半導体薄膜の構造と導電性堀田 収... 217
- 1 オリゴチオフェン薄膜の構造 217
- 2 FET 素子の作製とその動作特性 217
- 3 薄膜の構造と伝導機構 219
- 文 献 221
- 17 二次電池山本隆一, 神原貴樹... 222
- 1 二次電池の動作原理 222
- 2 二次電池の設計 224
- 3 関連分野 228
- 文 献 228
- 18 薄膜発光素子斎藤省吾... 232
- 1 有機 EL 素子の構造 232
- 2 有機発光層内の注入キャリアーおよび生
成励起子の閉じ込め 233
- 3 発光層中の発光サイトの分布 234

4	発光材料の新しい流れ	234	子	235	
5	光マイクロキャビティとしての EL 素		文 献	236	
19	光電導を用いた光屈折性高分子材料とその応用川上哲司, 園田信雄...		237	
1	光屈折性の発現機構	237	3	光屈折性高分子の応用	241
2	有機高分子材料における光屈折性の研究		文 献	244	
		239			
	ABSTRACTS : Organic Solids Based on π -Electron Systems			247
	索 引			255
	著者紹介	127, 231, 246			