

まえがき

分子性導体は、有機分子や金属錯体分子等の π 共役分子を構成成分とする電気伝導体である。本書は基礎編と各論から構成され、分子性導体を理解するための基本的な概念を紹介した(基礎編)後に、分子性導体の具体例を示しどのような物理が展開されているかを、主に物質開発の観点から記述した(各論)ものである。分子性導体は、結晶構造が一見複雑そうに見えるが、分子を電気伝導の単位と考えると、単純な分子軌道法に基づいた**強結合近似バンド計算**によって明快なバンド構造が得られる。この明快な電子構造を舞台に、**低次元性**や**強い電子相関**が関与する多様な **π 電子物性**が展開されているのが分子性導体の世界である。基礎編では、強結合近似バンド計算を自分でできることを第一の目標としており、各論では可能な限りバンド計算に必要なデータを示すようにしている。執筆にあたって、バンド構造を記載した物質系のほぼすべてについて実際にバンド計算を行い、適切と判断したバンドパラメータを掲載した。その結果、これまでの論文とは異なる計算結果を得たものもある。

分子性導体の研究において、物理学と化学の連携は不可欠である。自然界の「こと」に注目する物理学に対し、「もの」を対象とする化学が新たに合成する様々な物質は、興味深い電子物性現象を提供してきた。我が国が分子性導体研究を国際的に先導してきたのは、両者の良好な連携によるところが大きい。筆者は化学出身で、分子性導体の物質開発を行ってきたが、その過程で、強結合近似バンド計算は、実空間で考える傾向が強い化学者と波数(運動量)空間に慣れ親しんでいる物理学者とをつなぐ翻訳機能を果たしてきたと感じている。その意味で、本書は、化学分野で分子性導体に興味を持っておられる方にも読んでいただきたい。

各論は、物質の種類別に整理し、その物質(群)でトピックスとなった電子物性を、物質開発の指針としての**多次元化**と**多軌道性**の観点から紹介している。物性研究を進めていく上で、理想の系というのはなかなか得難く、色々と泥臭い問題が生じるのが常であるが、そのような点についても必要に応じて触れるようにした。筆者自身が多少なりとも関与した物質系が中心となってしまう、

紹介しきれない物質系が多く残ってしまった。しかし、それでも執筆を進めていくと、未だ議論が完全に決着していない問題が多く残っていることに気付かされた。何がわかっているかだけでなく、何がわかっていないかを伝えることも(特に大学以上の)教科書の重要な役割と判断し、問題点をできるだけ整理して記述した。執筆中に疑問が生じた場合、関係者に問い合わせ確認させていただいた。

お忙しい中(貴重なデータの提供を含め)対応していただいた皆様に感謝いたします。特に、以下の方々には大変お世話になりました。

宇治進也，大島勇吾，賀川史敬，鹿野田一司，川相義高，近藤隆祐，
佐々木孝彦，澤博，清水康弘，鈴木順三，妹尾仁嗣，田嶋尚也，
圓谷貴夫，中澤康浩，中村敏和，山本貴，渡邊真史(五十音順)。

本書は執筆依頼を受けてから脱稿までに約 10 年をかけてしまった。本書執筆の機会を提供くださり、極めて筆の遅かった筆者を気長に見守っていただいた、監修者の藤原毅夫先生，藤森淳先生，勝藤拓郎先生，宇田川将文先生，そして内田老鶴圃の内田学社長に感謝いたします。特に，藤森淳先生には責任監修者として，原稿全体に目を通していただき有益なコメントを頂戴しました。

本書が，これまでの分子性導体研究で得られた成果の意義を明確にした上で，次世代の物質・材料研究への展望を開くことに貢献できれば，これに勝る喜びはない。

2025 年 6 月

加藤 礼三