

▶ 理論化学・情報化学・計算化学ディビジョン

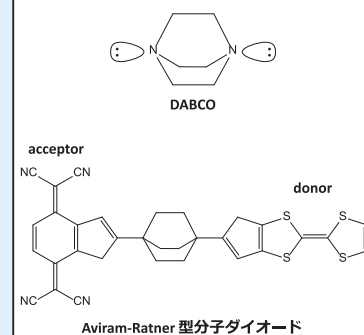
σ電子系における量子干渉現象 Quantum Interference Phenomena in σ-Electron Systems

1,4-ジアザビシクロ[2.2.2]オクタン (DABCO) の孤立電子対の間の相互作用に関する興味に端を発して、いわゆる through-space および through-bond という相互作用の区別が確立したのは1968年のことである¹⁾。その後、1974年にDABCOと同じσ骨格でドナー部位とアクセプター部位を隔てた Aviram-Ratner 型の分子ダイオード²⁾が提案されたのをきっかけとして、分子エレクトロニクス分野が勃興した。時は流れて、2018年にDABCOのケイ素類縁体において³⁾、そして2021年にはDABCO自体において⁴⁾、興味深い電子輸送特性が観測された。それは、これらの分子を透過する電子の量子的な位相の破壊的干渉効果により、電子の透過率が極めて低くなるとい

う特性であり、量子干渉現象と呼ばれる。量子干渉現象はπ電子系ではよく知られていたが、DABCOなどにおける実験的報告がきっかけとなってσ電子系における量子干渉現象が注目を集めることとなった。π電子系の量子干渉現象の予測においてはヒュッケル法が有効であるため、それを応用した様々な解釈が提案されてきた。σ電子系においても Ladder C モデルと呼ばれる tight-binding モデルを活用した量子干渉現象の解釈が提出されつつある⁵⁾。また、through-space および through-bond の観点から量子干渉現象を理解することも可能であり⁶⁾、今後この現象の理解の深化やデバイス応用などが期待される。

- 1) R. Hoffmann et al., *J. Am. Chem. Soc.* **1968**, 90, 1499.
- 2) A. Aviram et al., *Chem. Phys. Lett.* **1974**, 29, 277.
- 3) M. H. Garner et al., *Nature* **2018**, 558, 415.

ビシクロ[2.2.2]オクタン骨格



- 4) B. Zhang et al., *Chem. Sci.* **2021**, 12, 10299.
- 5) N. Cao et al., *J. Chem. Phys.* **2023**, 158, 124305.
- 6) Y. Tsuji et al., *J. Am. Chem. Soc.* **2024**, 146, 32506.

辻 雄太 九州大学大学院総合理工学研究院

© 2025 The Chemical Society of Japan

▶ 無機化学ディビジョン

特異な近赤外光吸収特性を持つ ニードル型金クラスター Needle-shaped Au Clusters with Unique NIR Absorption Band

有機配位子で表面が保護された金クラスターは安定な無機ナノ物質群である。特に、形式的に0価の金を含むクラスターはその6s価電子が分子全体に非局在化した軌道に収容され、可視-近赤外領域にまたがる特徴的な光吸収特性を持つ。

チオラート (RS⁻) は金クラスターの安定化配位子として有用であり、数多くのクラスターの構造と性質の相関が調べられてきた。その中でも、棒状のような異方性構造を持つクラスターは色素様の顕著な光吸収ピークを持つため光機能性物質としての応用が期待されている。しかしながら、100個程度の原子が集合し

てできた金クラスターは表面積を最小とするような球形の構造が最安定になることが実験的に確かめられており¹⁾、これまでの合成研究の中で異方的な構造を持つクラスターが安定種として得られた例はほとんどない。

こういった現状の中、ごく最近、三角形型 Au₃ ユニットが1次元に配列したコア構造を持つニードル型クラスター Au₆₀(SR)₄₄の単離と構造決定が報告された²⁾。図1にあるような細い針のような構造が安定種として得られたことも驚きだが、その近赤外光吸収ピーク (図1右) は約 $3 \times 10^5 \text{ M}^{-1} \text{ cm}^{-1}$ といった色素分子と比べても遜色ない吸光係数を持つため、近赤外光を利用したイメージングや光熱変換への応用が期待できる。30年近い歴史を持つチオラート保護金クラスターの研究において、いまだにこういった分子が

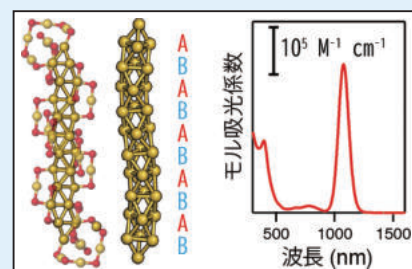


図1 (左) Au₆₀S₄₄ フレームワークと Au₃₂ コアの構造。赤は硫黄、黄色は金原子に対応。ABABA……は Au₃ ユニットの配列を示す (長さ約 2.7 nm)。 (右) Au₆₀ 溶液の可視-近赤外光吸収スペクトル。

新規に発見されることはナノの世界における限りない可能性の顕れである。

- 1) Y. Negishi et al., *J. Am. Chem. Soc.* **2015**, 137, 1206.
- 2) L. Luo et al., *Proc. Natl. Acad. Sci. USA* **2024**, 121, e2318537121.

高野慎二郎 東京大学大学院理学系研究科

© 2025 The Chemical Society of Japan

化学経済のディビジョン？ What is Chemical Economy Division of CSJ?

化学経済？ 経営？ これって日本化学会の活動？ と思いいになった方も多いかと思いますが。日本化学会の活動の幅広さを表すディビジョン名かと思いますが。

幹事は企業中心で、経済、経営、研究管理について本気で議論しております。年1回程度の講演会（通常無料）を開催しており、行事のタイトルから活動内容をご理解いただけるかと思いますが。

- ・勉強会「研究開発とセレンディピティ～研究開発必勝法～」(府川伊三郎先生 (株)旭リサーチセンター シニアリサーチャー (当時) 2017年2月)

- ・勉強会「『電子コンパスビジネスの挑戦』-「新技術」「新製品」ではなく「新ビジネスモデル」を創れ！」(山下昌哉先生 旭化成(株)研究・開発本部 (当時) 2017年12月)
- ・オンライン勉強会「米国大手化学企業の事業再編」(可児勝先生 元三菱化学(株) 2021年4月)
- ・オンライン勉強会「大手農芸化学企業の事業再編」(可児勝先生 元三菱化学(株) 2022年11月)
- ・「住友化学(株)SYNERGYCA 共創ラウンジ見学会とディスカッション『日本企業の国内シーズの事業化について』」(2023年8月)
- ・オンライン勉強会「化学企業の事業再

編；世界の大手塗料・コーティング企業について」(可児勝先生 元三菱化学(株) 2024年6月)

特に2021年4月以降は元三菱化学(株)の可児先生によるオンライン開催の勉強会が中心となっており、その底流となるテーマは化学企業の経営と株主の関係という経営における重要課題です。

当ディビジョンの活動にご関心をお持ちの会員は、ぜひ日本化学会マイページのディビジョン登録をお願いいたします。ご登録いただきますと、行事開催のご案内をお届けします。

田中紳一郎 元住友化学株式会社

© 2025 The Chemical Society of Japan

公益社団法人日本化学会 ご支援のお願い

(公社)日本化学会では化学の振興、普及を目的とした活動に対し、皆さまにご寄付をお願いしております。

化学振興活動

各種イベント(春季年会、CSJ化学フェスタ、市民公開講座等)、化学グランプリ国際化学オリンピックへの代表生徒派遣、化学会館の修繕・補修、支部・部会活動等、本会事業全体に活用させていただきます。

化学だいすき クラブ事業

小・中学生対象事業を専門にした支援です。子どもたちへ冊子の無料配布や実験教室を開催するために活用させていただきます。

化学遺産事業

化学・化学技術に関する歴史的に貴重な史料を守り、また化学関係の諸先達の偉業を伝えるなど化学の業績を後世に伝えていくための活動に活用させていただきます。



国際化学オリンピック表彰式



化学実験教室



(左) 紫根と紫根染めとシコニン標本 / (右) ウコとその色素スピノクロムの標本 (認定化学遺産 第019号)

本会への寄付金は税制上の優遇措置(寄付金控除)が受けられます。
詳しくは日本化学会ウェブページをご覧ください。

寄付の詳細は **日本化学会** で検索下さい。



公益社団法人
日本化学会