

単分子－単分子間における電子移動の 理論的検討

大阪府立大学工学研究科 西野 智昭

目的 我々は最近、単分子－単分子間に生起する電子移動の初めての計測法を開発した。このような電子移動は、機能性分子を水素結合などの化学的相互作用を合目的に用いて自己組織的に集積するボトムアップ型の分子デバイスに密接に関与している。本手法により、水素結合を介した単分子間電子移動が、共有 σ 結合を介した電子輸送よりも有利であるなど興味深い知見が得られている。本研究では、単分子間電子移動についてより深い理解を得るため第一原理計算に基づく理論検討を行うことを目的とした。

内容 検討にあたり、始めに、単分子－単分子ジャンクションを構成する種々の分子の構造最適化を Gaussian09により行った。 ω -カルボキシプロパンチオール等、末端に様々な官能基を有するアルカンチオールを対象とした。今後は、プローブ電極を付加した構造を作成した後、様々な電気伝導特性のシミュレーションを行う。

利用した計算機 HCC

