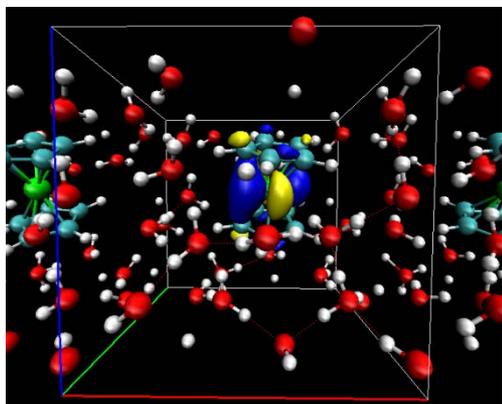


第一原理分子動力学法によるレッドクス活性 自己組織化単分子膜の酸化還元電位評価

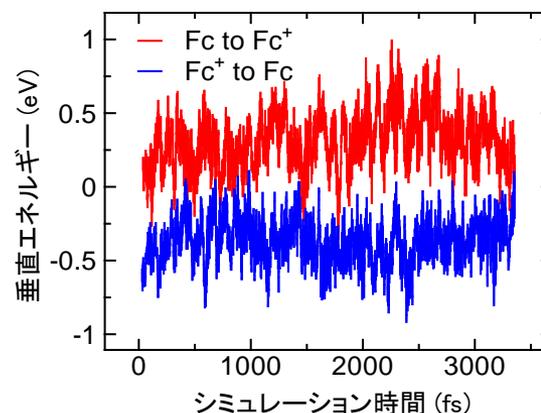
大阪大学大学院基礎工学研究科 福井 賢一, 横田 泰之, 兼田 有希央
大阪大学大学院工学研究科 森川 良忠

目的 最もシンプルなレッドクス活性種であるフェロセン誘導体自己組織化単分子膜の酸化還元電位と液体-電極界面の微視的構造の相関を明らかにする

手法 第一原理分子動力学シミュレーションプログラム STATE-Senri
+ 新たに作成した酸化還元電位評価コード → SX-9上の計算に最適化



水分子27個とフェロセンを含むユニットセル
と酸化還元に関与する最高占有軌道



ユニットセルの電荷を増減させて得られる
垂直エネルギー値から酸化還元電位を導出

結果 フェロセン水溶液の分子動力学計算を行い、垂直エネルギー値から分子の酸化還元特性を明らかにした。電極界面の研究に向けた基礎データを得ることに成功した。