



您现在的位置: 首页 > 新闻动态 > 科研进展

福建物构所单个分子机器的运动表征研究取得新进展

更新日期: 2021-12-01

2016年诺贝尔化学奖授予研究分子机器的三位科学家。分子机器在分子尺度下模拟的宏观机械的运动, 现阶段主要包含分子马达、分子齿轮和分子曲轴等结构在内。其运动行为主要被外界刺激影响, 是一种概念新颖的刺激响应材料。关于分子机器结构内部运动的研究, 目前主要采用包括核磁共振与介电光谱在内的谱学方式。这些研究方法成功表征了聚集态下分子机器的宏观统计性运动结果。但如何在单分子尺度下原位捕获分子机器的动态行为依然是一个颇具挑战的课题。

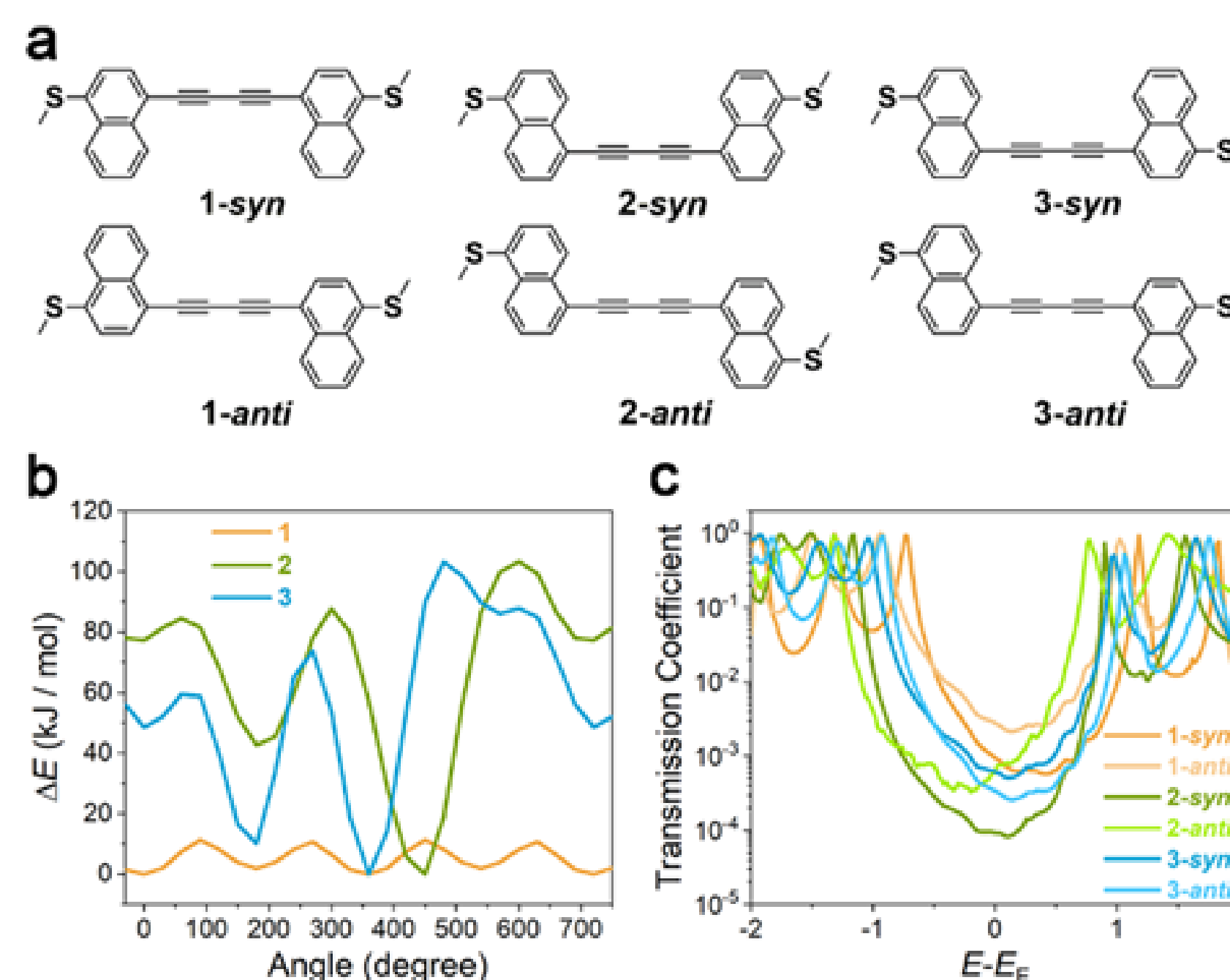


图: (a)分子曲轴1-3的顺式与反式构象结构示意图。(b)分子1-3的旋转势能面曲线。(c)分子1-3的透射系数曲线。

在国家自然科学基金、中科院战略性先导科技专项 (B类)、福建省科技计划和福建光电信息科学与技术创新实验室项目的资助下, 陈忠宁研究员课题组与厦门大学洪文晶教授课题组通过分子电子学中的扫描隧道显微镜分子结裂结 (STM-BJ) 技术手段清晰地表征被选中的单个分子的电导。该研究设计合成了一系列曲轴形状分子, 通过分子上的甲硫基与纳米金属电极组装, 形成“电极-分子-电极”结构的分子结。该分子曲轴以1,3-丁二炔基为旋转轴, 使得两段的苯环可以在顺式/反式之间自由翻转。该研究首先利用理论计算模拟了分子曲轴在分子结中的翻转, 并计算了两种构型之间的电导差异。随后通过STM-BJ技术捕捉到了单个分子曲轴在分子结中发生构型翻转的电导切换行为。该研究进一步发现, 这种随构型翻转而产生的电导切换行为, 是由两种构型下分子轨道间量子干涉效应的差异引起。这一研究成果不仅表明单分子电导测试可以作为监测分子机器转动的可靠手段, 更是为设计一类通过转动调节电导的分子器件提供了有力的理论基础。

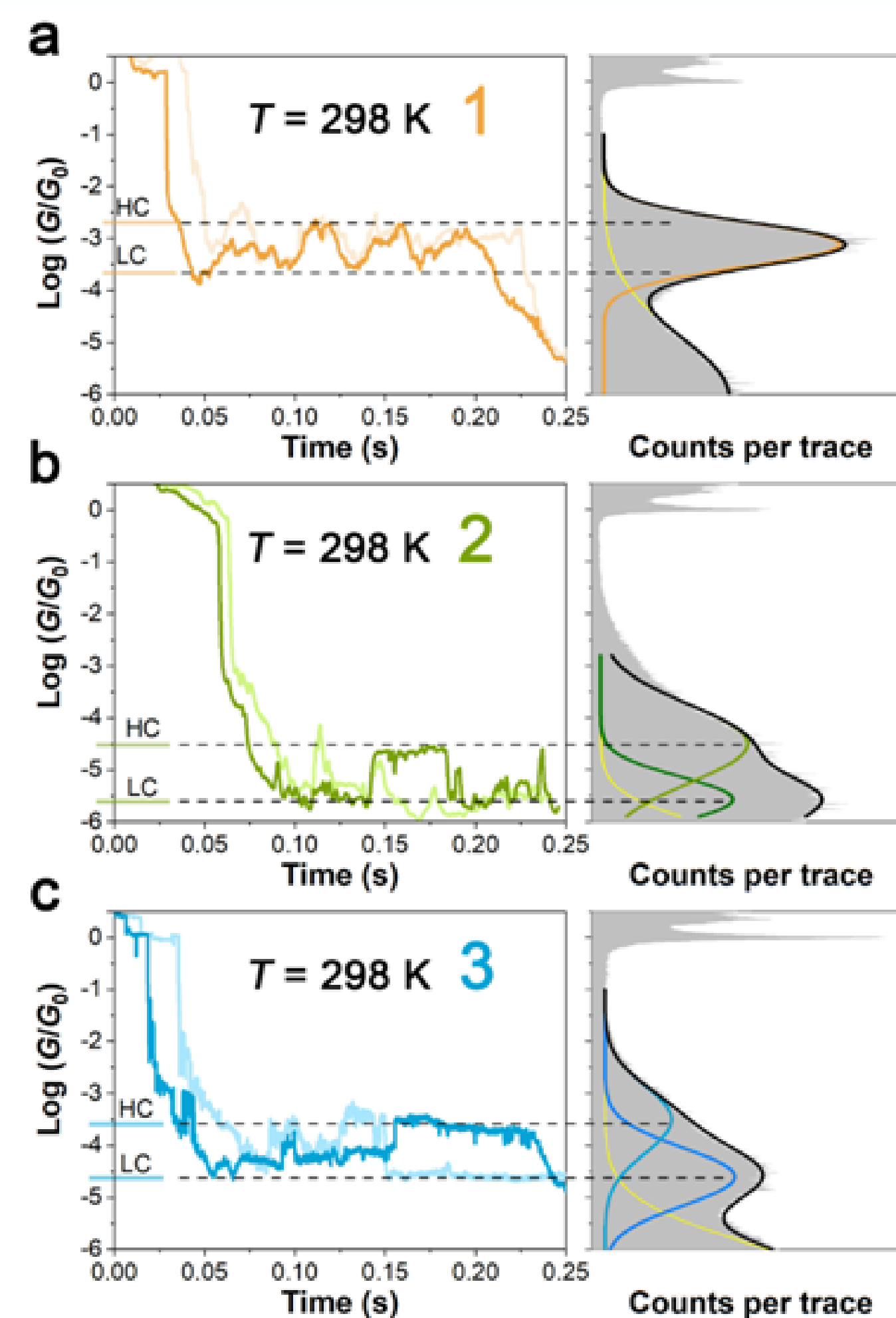


图: 分子1-3的典型电导-时间曲线 (左) 与一维电导图 (右), 一维图中黄色线代表电导测试实验当中的背景数据。

上述工作以《Capturing the Rotation of One Molecular Crank by Single-Molecule Conductance》为题, 发表在 NanoLetters。文章第一作者为上海科技大学联合培养博士生屈恺和厦门大学博士后段平以及物构所副研究员王金云, 通讯作者为张潜翀副研究员和陈忠宁研究员以及厦门大学洪文晶教授。厦门医学院的张伯超博士参与了研究工作。

文章链接: <https://doi.org/10.1021/acs.nanolett.1c03626>

(陈忠宁课题组供稿)

