

单硫醇分子结的几何结构和电输运性质： 压力效应与末端基团效应*

胡伟¹⁾ 李宗良¹⁾ 马勇¹⁾ 李英德¹⁾²⁾ 王传奎^{1)†}

1) (山东师范大学物理与电子科学学院, 济南 250014)

2) (潍坊学院物理与电子科学学院, 潍坊 261061)

(2010年3月1日收到; 2010年5月11日收到修改稿)

利用杂化密度泛函理论, 研究了以甲基、醇基、羧基为末端基团的烷烃硫醇分子与金电极形成分子结的过程, 得到了分子结的几何结构与外加压力的关系. 并在此基础上, 利用弹性散射格林函数方法研究了烷烃硫醇分子的电输运性质. 研究表明, 对于 $C_{11}S$ 分子来说, 当两电极距离大于 2.1 nm 时, 该分子结断裂; 对于 $C_{11}SOH$ 和 $C_{10}SCOOH$ 来说, 相应的分子结断裂的电极距离基本相同 (2.15 nm). 在相同的外加压力 (4.0 nN) 下, $C_{11}S$ 分子的导电能力最强, 其次是 $C_{11}SOH$ 分子, 而 $C_{10}SCOOH$ 分子的导电能力最差. 随着压力的增加, 三种分子结的电导呈现出单调地增加, 且在相同的外加压力下, 三种分子导电能力的强弱没有改变. 理论计算结果与实验结果定性符合.

关键词: 压力, 末端基团, 烷烃硫醇分子, 电输运性质

PACS: 73.63.-b, 31.15.A, 85.65.+h

1. 引言

上世纪 90 年代以来, 随着单分子器件和自组装生长膜制备技术的进步, 分子器件的实验研究取得了长足的发展^[1-14]. 在单分子器件的形成和测量过程中, 不同的实验组对于同类分子往往给出了不同的结果^[15-20], 其主要原因是不同技术形成的单分子器件在微观上存在着差别. 已有的理论和实验工作表明, 单分子器件或者自组装生长膜的导电能力主要与分子的化学构成、分子与电极的接触类型、分子受到的外部压力、溶剂效应、电极距离等因素有关^[21-26]. 目前, 人们较深入地研究了分子化学构成、接触类型、溶剂效应、电极距离等对分子器件电输运性质的影响, 而较少地研究外加压力对分子器件电输运性质的影响. 可以预见, 在利用扫描隧道电镜断裂电极法 (STMBJ) 形成分子结时, 不同的压力 (或拉力) 形成的分子结具有不同的微观结构, 因此, 这些分子结将展现出不同的电输运性质. 同样, 在利用导电原子力显微镜 (CAFM) 测量单分子的导电性质时, 当施加到探针上的外力具有不同大小

时, 将会得到不同的测量结果. 因此, 研究外加压力对分子器件电输运性质的影响不仅有利于人们了解分子结的形成机理, 而且有利于人们了解电子在分子器件中的隧穿机理, 同时可以探讨利用外加压力来调控分子器件电输运特性的可能性.

最近, 胡海龙等人利用原子力显微镜测量了不同末端基团的硫醇自组装分子膜在不同外加压力下的电输运性质^[7,8], 实验发现外加压力较大地影响了硫醇自组装分子膜的导电特性, 且不同末端基团分子的电输运性质存在着明显的差异. 本文以实验中的三种分子作为研究对象, 从理论上计算了不同外加压力下分子的几何结构, 研究了分子结的形成和断裂过程以及外加压力和末端基团对分子结电输运性质的影响.

2. 理论方法和计算过程

在单分子器件或者自组装生长膜伏安性质测量过程中, 施加外加压力将减少电极间的距离, 从而改变分子的形状. 为了得到外加压力与分子结几何结构的变化关系, 我们采用了下面的计算过

* 国家自然科学基金 (批准号: 10804064, 10974121) 资助的课题.

† 通讯联系人. E-mail: ckwang@sdu.edu.cn

程^[27]. 首先构造一个扩展分子体系用来模拟分子结. 然后根据我们以往的经验值给出两个电极的距离, 优化扩展分子结构. 在此基础上, 逐渐改变电极间的距离, 在每个距离下优化扩展分子结构. 在得到扩展分子的能量随两个电极距离变化的关系后, 根据 $F = -\partial E / \partial d$ 得到外加压力与电极间距离的关系, 其中 E 是扩展分子的总能量, d 是两个电极间的距离, 即可以得到不同外加压力下扩展分子的几何结构.

我们所计算的分子如图 1 所示, 三种分子的主链均为十一碳烷烃, 一端为—SH, 另一端则含有不同的末端基团, 其中 (a) 的末端基团为甲基(—CH₃) (十一碳烷烃硫醇分子), (b) 的末端基团为醇基(—CH₂OH) (十一碳羟基硫醇分子), (c) 的末端基团为羧基(—COOH) (十一碳羧基硫醇分子). 分子在与金电极形成接触的时候, S 原子与金原子形成共价键, 而另一端的甲基(—CH₃)、醇基(—CH₂OH) 和羧基(—COOH) 分别物理吸附于金表面上. 由于原子间相互作用的局域性, 对分子几何结构和电子结构起明显作用的是与分子近邻的金属原子, 其他的原子由于近邻原子的屏蔽作用可以忽略. 因此我们在计算时只选择三个金原子组成的正三角形金原子团簇与分子相连, 形成扩展分子.

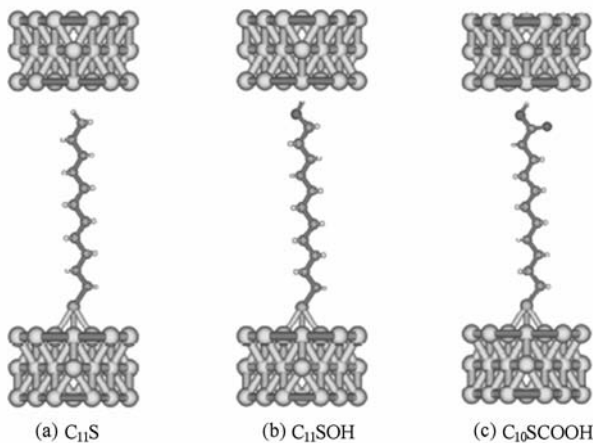


图 1 扩展分子示意图 (a) 十一碳烷烃硫醇分子; (b) 十一碳羟基硫醇分子; (c) 十一碳羧基硫醇分子

当在分子主架方向施加电压时, 两电极间的净电流可表示为^[28]

$$I = \left(\frac{9\pi}{4}\right)^{1/3} \frac{9ek_B T}{16\hbar E_f^2} \int_{eV}^{\infty} \left\{ \ln \left[1 + \exp \left(\frac{E_f - E_z + eV}{k_B T} \right) \right] - \ln \left[1 + \exp \left(\frac{E_f - E_z}{k_B T} \right) \right] \right\} |T(E_z)|^2 \frac{dE_z}{E_z}, \quad (1)$$

其中 E_f 为费米能量, V 为外加电压. 利用弹性格林函数法得到跃迁概率幅 $T(E)$ 的表达式为

$$T(E_z) = \sum_J \sum_K V_{JS} V_{DK} \sum_n \frac{\langle J | n \rangle \langle n | K \rangle}{(E - E_n) + i\Gamma_n}, \quad (2)$$

式中的 $|n\rangle$ 是扩展体系的本征态, E_n 是本征能量. J 是将体系按照原子格点展开的坐标, $J(K) = 1, 2, 3, \dots, N$, 其中 1 和 N 是分子与两个电子源相连的终端原子格点, 交叠矩阵元 $\langle J | n \rangle \langle n | K \rangle$ 描述能级的扩展性(离域性). V_{JS} 和 V_{DK} 为分子格点 $J(K)$ 与源电极和漏电极的耦合常数,

$$V_{JS} = \langle J | H | S \rangle = \sum_{n, \alpha, i} C_{n\alpha}^J \langle J_\alpha | H | S_i \rangle C_{ni}^S, \quad (3)$$

其中 $C_{n\alpha}^J$ 是能级 $|n\rangle$ 在原子 $J(K)$ 的 $|\alpha\rangle$ 轨道上的展开系数, C_{ni}^S 是能级 $|n\rangle$ 在金原子团簇的 $|i\rangle$ 轨道上的展开系数. 利用公式 $G = \frac{\partial I}{\partial V}$ 可计算电导.

计算中分子体系几何结构的优化和电子结构的计算均在 Gaussian03 程序包上进行, 其中采用杂化的密度泛函理论(B3LYP)方法, 选用 LanL2DZ 作为基矢^[29]. 分子器件电输运性质的计算是在 QCME-V1.1 程序包中完成的^[30].

3. 结果讨论

3.1. 分子结的形成

图 2 为三种分子体系的能量和外加压力随金电极距离变化的曲线. 由图可见, 这三种分子体系的能量和外加压力具有相似的变化趋势, 即随着电极间距离的减小, 体系的能量和压力单调地变化. 由于三种分子的长度不同, 故三种分子体系能量和外加压力的变化呈现出一些差别. 总体上来说, 当电极距离较大时, 即 $d \geq 2.2$ nm 时, 分子体系的能量基本保持不变. 此时, 金原子与分子的相互作用很弱, 没有形成分子结. 当 $d \leq 2.15$ nm 时, 分子体系的能量随电极距离的减小而增加, 此时, 金原子与分子的相互作用增强, 形成了分子结. 同时由图可见, 在所研究的电极距离范围内, 外加压力的大小为纳牛量级. 具体说来, 末端为—CH₂OH 的分子体系和—COOH 的分子体系的总能量在电极距离为 2.15 nm 左右开始明显增加, 而末端为—CH₃ 的分子体系的能量则在电极距离为 2.00 nm 左右开始明显增加.

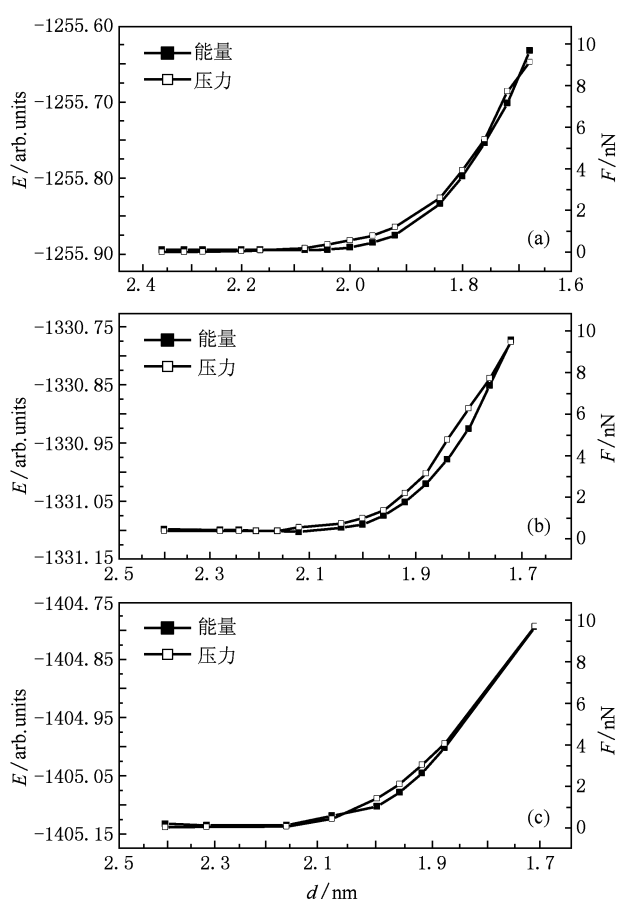


图2 三种扩展分子的能量和外力随电极距离的变化 (a) $C_{11}S$; (b) $C_{11}SOH$; (c) $C_{10}SCOOH$

表1 三种分子结在不同电极距离下的部分几何结构参数和外力(长度的单位为 $\text{\AA}$, 力的单位是 nN, 其中 d_{S-Au} 和 d_{H-Au} 分别为 S 和 H 原子到金平面的距离)

$C_{11}S$					$C_{11}SOH$				$C_{10}SCOOH$			
d_{Au-Au}	d_{S-Au}	d_{H-Au}	$d_{\text{分子}}$	F	d_{S-Au}	d_{H-Au}	$d_{\text{分子}}$	F	d_{S-Au}	d_{H-Au}	$d_{\text{分子}}$	F
17.2	1.84	1.20	14.00	7.7	1.67	0.92	14.60	10	1.67	0.96	14.56	10
17.6	1.89	1.37	14.21	5.4	1.73	1.03	14.84	8.1	1.74	1.07	14.80	8.0
18.0	1.94	1.61	14.43	4.0	1.82	1.11	15.07	6.5	1.82	1.14	15.02	6.8
18.4	2.01	1.74	14.65	2.6	1.88	1.22	15.30	4.8	1.87	1.27	15.36	5.4
18.8	2.08	1.88	14.83	1.8	1.95	1.32	15.54	3.9	1.94	1.38	15.54	4.2
19.2	2.20	1.83	15.01	1.2	2.02	1.44	15.74	2.7	2.01	1.50	15.68	3.1
19.6	2.21	2.23	15.15	0.8	2.09	1.57	15.94	1.1	2.08	1.63	15.87	2.2

子结来说,其分子结的长度基本相等,但末端为醇基($-\text{CH}_2\text{OH}$)的分子的 d_{H-Au} 小于末端为羧基($-\text{COOH}$)的分子的 d_{H-Au} ,故前面的分子更有利于电子的隧穿,从而, $C_{11}SOH$ 分子比 $C_{10}SCOOH$ 分子的导电能力强. 另外通过分析各原子所带的电荷量可

在不同的电极距离下,这三种分子体系的部分几何结构参数以及外加压力的大小由表1给出. 当施加相同的外力时,对于这三种分子体系来说,其两电极的距离取不同的值,或者说,要使这三种分子体系具有相同的电极间距离,需要施加不同的外力. 如,当电极间距离为 $d_{Au-Au} = 1.8 \text{ nm}$ 时, $C_{11}S$, $C_{11}SOH$ 和 $C_{10}SCOOH$ 分子结对应的外力分别为 4.0, 6.5 和 6.8 nN.

通过计算分子结结构与外力的关系,不仅可以了解分子结形成的微观信息,而且能够得到在相同的外力下,不同分子结的几何结构,从而为模拟实验结果打下基础.

3.2. 末端基团和压力对分子伏安特性的影响

为了研究不同末端基团对分子伏安特性的影响,我们选取外加压力为 $F = 4.0 \text{ nN}$,此时,三种分子结的部分结构参数在表2中列出. 三种分子结的伏安特性由图3给出. 由图可见,在相同的外加压力下,三种不同末端基团分子的导电能力不同,末端为甲基($-\text{CH}_3$)的分子的导电能力最强,其次是末端为醇基($-\text{CH}_2\text{OH}$)的分子,末端为羧基($-\text{COOH}$)的分子导电能力最差. 理论给出的三种分子导电能力的变化趋势与实验结果相一致. 分析这三种分子结的几何结构,可以发现,末端为甲基($-\text{CH}_3$)的分子结的长度最短,电子隧穿距离最短,因此,该分子的导电能力最强. 而对于另外两个分

以发现,由于 O 原子的电负性很强,因此 $C_{11}SOH$ 分子中 O 原子得到了约 $-0.38 e$ 的净电荷,而且导致与之相邻的 C 原子比 $C_{11}S$ 分子中相同位置上的 C 原子多贡献出 $-0.31 e$ 电荷,而 $C_{10}SCOOH$ 分子 $-\text{OH}$ 中的 O 原子带约 $-0.39 e$ 的净电量,另一个 O

原子带 $-0.26 e$ 的净电量,与之相邻的 C 原子比 C_{11} S 分子中相同位置上的 C 原子多贡献出 $-0.83 e$ 电荷,因此从电荷分布可以看出,三种分子末端基团对电子输运的阻碍作用为 $C_{10}SCOOH > C_{11}SOH > C_{11}S$. 为了说明分子末端基团和电极间的电荷分布情况,我们给出了分子接触电极附近的电子密度分布图(见图4). 由图4可见, $C_{10}SCOOH$ 的 $-OH$ 基团和 $C_{11}SOH$ 的 $-OH$ 基团所带电荷相当,但 $C_{10}SCOOH$ 分子的另一个 O 原子也带有较多的电荷. 进一步看出,这两个分子末端基团所带电荷都比 $C_{11}S$ 的末端基团所带的电荷多. 通过比较末端基团 $-CH_3$, $-CH_2OH$, $-COOH$ 中 C 原子的 $1s$ 轨道也可以发现,由于 O 原子影响, $-CH_2OH$ 中 C 原子的 $1s$ 轨道比 $-CH_3$ 的低 $2.0 eV$, $-COOH$ 的比 $-CH_3$ 低 $4.5 eV$,这与实验所测的 $2.0 eV$ 和 $4.8 eV$ 是一致的^[8]. 而其他 C 原子的 $1s$ 轨道差别很小,这也反映出由于末端基团的不同使三种分子导电有较大差别.

表2 在 $F = 4.0 nN$ 时三种分子结的部分几何结构参数
(长度的单位为 $\text{\AA}$,其中 d_{S-Au} 和 d_{H-Au} 分别为
S 和 H 原子到金平面的距离)

分子	d_{Au-Au}	d_{S-Au}	d_{H-Au}	$d_{分子}$
$C_{11}S$	18.0	1.94	1.61	14.43
$C_{11}SOH$	18.8	1.95	1.32	15.54
$C_{10}SCOOH$	18.9	1.95	1.39	15.55

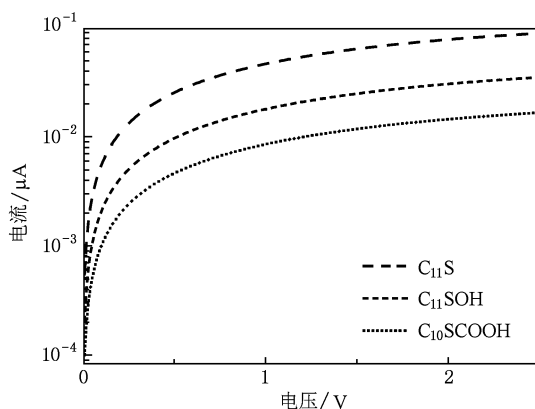


图3 4 nN 下三种分子结的伏-安曲线

为了进一步研究末端基团和外加压力对分子结的电输运性质的影响,我们给出了三种分子结电导随外加压力的变化(如图5所示). 选择的外加偏压为 $0.25 V$. 由图5可见,随着外加压力的增加,每个分子结的电导均显著增加,即分子结的导电能力

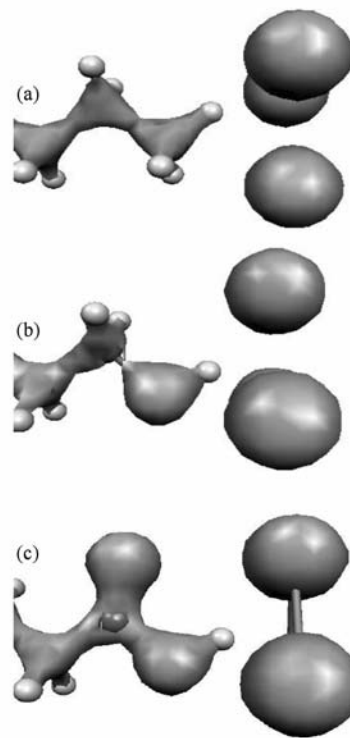


图4 三种分子接触电极附近的电子密度分布 (a) $C_{11}S$; (b) $C_{11}SOH$; (c) $C_{10}SCOOH$

随着压力增加而增加. 如,对于末端基团为甲基($-CH_3$)的硫醇分子,当外加压力为 $2.0 nN$ 时,分子结的电导为 $3 \times 10^{-3} \mu S$,而当外加压力增大到 $10.0 nN$ 时,其电导增大到 $1 \mu S$,分子结的电导增加近三个量级. 压力不同导致分子结的电输运能力不同的原因是外加压力使两个金电极间的距离变小,使分子同金电极之间的耦合变强,从而引起电子的隧穿几率增加.

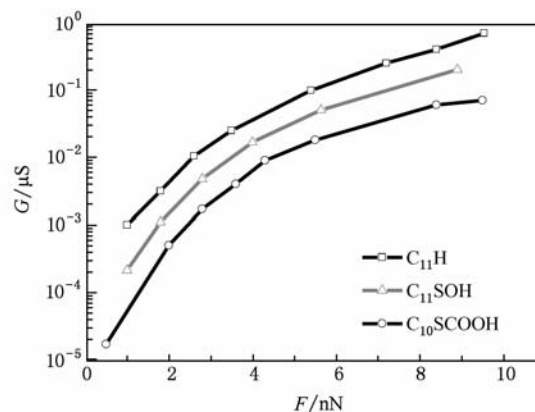


图5 三种分子结的电导值随压力的变化(外加偏压为 $0.25 V$)

由图5我们还可以看到,在任意外加压力下,三

种分子的导电能力始终是 $C_{11}S > C_{11}SOH > C_{10}SCOOH$. 仍可以由不同压力下分子结的几何结构来定性分析该结果. 由表 1 可见, 在相同压力下, 三种分子结的电极间的距离有所差别. 对于 $C_{11}S$ 来说, 其电极间的距离最小, 故导电能力最强. 而对 $C_{11}SOH$ 和 $C_{10}SCOOH$ 来说, 电极间的距离 d_{Au-Au} 基本相等, 但 $C_{11}SOH$ 分子结的 d_{H-Au} 小于 $C_{10}SCOOH$ 分子结的, 故 $C_{11}SOH$ 分子结有利于电子的隧穿. 理论模拟给出的压力对三种分子导电能力的影响定性解释了实验结果.

3. 结 论

在第一性原理的水平上, 通过计算不同电极距离下分子结的能量, 得到了由原子力显微镜针尖施加到分子上的外力, 从而建立了在 CAFM 测量过程中分子结的几何结构与外力的关系. 这为研究相同外力下, 分子结的电输运性质打下了基础. 研究结果表明, 以

甲基、醇基、羧基为末端基团的烷烃硫醇分子形成分子结的电极临界距离是不同的. 在相同外力下, 以甲基、醇基、羧基为末端基团的烷烃硫醇分子的导电能力依次为 $C_{11}S > C_{11}SOH > C_{10}SCOOH$, 说明了分子末端基团对其导电能力具有明显地影响. 分子结的导电能力随着外力的增加而增加. 理论计算结果和实验结果定性符合. 理论工作有助于人们理解在不同条件下烷烃硫醇系列分子的电输运性质.

实验采用的针尖曲率半径为 50 nm 的探针对分子膜进行测量, 即测量结果对应于多个分子. 而我们只对单分子结的形成做了计算, 特别是只考虑了分子垂直地电极表面, 因此理论计算结果只能和实验结果做定性比较. 要想改善理论计算结果, 需要同时考虑多个分子, 以及考虑分子相对于电极表面的倾角. 另外, 在计算分子结的电输运性质时采用了平衡格林函数方法, 该方法在低偏压范围内能够较好地描述电荷输运过程. 在本文基础上的进一步工作在进行中.

-
- [1] Tao N J 2006 *Nat. Nanotechnol.* **1** 173
 - [2] Thijssen W H A, Djukic D, Otte A F, Bremmer R H, van Ruitenbeek J M 2006 *Phys. Rev. Lett.* **97** 226806
 - [3] Djukic D, Thygesen K S, Untiedt C, Smit R H M, Jacobsen K W, van Ruitenbeek J M 2005 *Phys. Rev. B* **71** 161402
 - [4] Jeremy M B, Moore H J, Lee TR, Kushmerick J G 2007 *Nano Lett.* **7** 1364
 - [5] Cui X D, Primak A, Zarate X, Tomfohr J, Sankey O F, Moore A L, Moore T A, Gust D, Harris G, Lindsay S M 2001 *Science* **294** 571
 - [6] Dadosh T, Gordin Y, Krahne R, Khivrich I, Mahalu D, Frydman V, Sperling J, Yacoby A, Israel B J 2005 *Nature* **436** 677
 - [7] Hu H L, Zhang K, Wang Z X, Wang X P 2006 *Acta Phys. Sin.* **55** 1430 (in Chinese) [胡海龙、张 琨、王振兴、王晓平 2006 物理学报 **55** 1430]
 - [8] Hu H L, Zhang K, Wang Z X, Kong T, Hu Y, Wang X P 2007 *Acta Phys. Sin.* **56** 1674 (in Chinese) [胡海龙、张 琨、王振兴、孔 涛、胡 颖、王晓平 2007 物理学报 **56** 1674]
 - [9] Wang L G, Chen L, Yu D W, Li Y, Terence K S W 2007 *Acta Phys. Sin.* **56** 6526 (in Chinese) [王利光、陈 蕾、郁鼎文、李 勇、Terence K. S. W. 2007 物理学报 **56** 6526]
 - [10] Chen Z J, Huang K, Long Y Z, Wan M X, Yin Z H 2009 *Chin. Phys. B* **18** 298
 - [11] Tian X Y, Xu X R, Xu Z, Yuan G C, Zhang F J, Zhao S L 2009 *Chin. Phys. B* **18** 3568
 - [12] Li Z L, Zou B, Yan X W, Wang C K 2007 *Chin. Phys.* **16** 1434
 - [13] Xia C J, Fang C F, Hu G C, Li D M, Liu D S, Xie S J, Zhao M W 2008 *Acta Phys. Sin.* **57** 3148 (in Chinese) [夏蔡娟、房常峰、胡贵超、李冬梅、刘德胜、解士杰、赵明文 2008 物理学报 **57** 3148]
 - [14] Chen Y J, Zhao R G, Yang W S 2005 *Acta Phys. Sin.* **54** 284 (in Chinese) [陈永军、赵汝光、杨威生 2005 物理学报 **54** 284]
 - [15] Venkataraman L, Klare J E, Tam I W, Nuckolis C, Hybertsen M S, Steigerwald M L 2006 *Nano Lett.* **6** 458
 - [16] Chen F, Li X, Hihath J, Huang Z, Tao N J 2006 *J. Am. Chem. Soc.* **128** 15874
 - [17] Hihath J, Tao N J 2008 *Nanotechnology* **19** 265204
 - [18] Li C, Pobelov I, Wandlowski T, Bagrets A, Arnold A, Evers F 2008 *J. Am. Chem. Soc.* **130** 318
 - [19] Li X, He J, Hihath J, Xu B, Lindsay S M, Tao N J 2006 *J. Am. Chem. Soc.* **128** 2135
 - [20] González M T, Wu S, Huber R, van der Molen S J, Schönenberger C, Calame M 2006 *Nano Lett.* **6** 2238
 - [21] Ulrich J, Esrail D, Pontius W, Venkataraman L, Millar D, Doerr L H 2006 *J. Phys. Chem. B* **110** 2462
 - [22] Hybertsen M S, Venkataraman L, Klare J E, Whalley A C, Steigerwald M L, Nuckolls C 2008 *J. Phys. : Condens. Matter* **20** 374115
 - [23] Li X, He J, Hihath J, Xu B, Lindsay S M, Tao N J 2006 *J. Am. Chem. Soc.* **128** 2135

- [24] Li H H, Li Y D, Wang C K 2002 *Acta Phys. Sin.* **51** 1239 (in Chinese) [李红海、李英德、王传奎 2002 物理学报 **51** 1239]
- [25] Cui X D, Zarate X, Tomfohr J, Sankey O F, Primak A, Moore A L, Moore T A, Gust D, Harris G, Lindsay S M 2002 *Nanotechnology* **13** 5
- [26] Qiu M, Zhang Z H 2010 *Acta Phys. Sin.* **59** 4162 (in Chinese) [邱明、张振华 2010 物理学报 **59** 4162]
- [27] Park Y S, Whalley A C, Kamenetska M, Steigerwald M L, Hybertsen M S, Nuckolls C, Venkataraman L 2007 *J. Am. Chem. Soc.* **129** 15768
- [28] Wang C K, Fu Y, Luo Y 2001 *Phys. Chem. Chem. Phys.* **3** 5017
- [29] Frisch M J, Trucks G N, Schlegel H B 2003 Gaussian 03, Revision D.1, Gaussian, Inc., Pittsburgh, PA
- [30] Jiang J, Wang C K, Luo Y 2005 QCME-V1.0 (Quantum Chemistry for Molecular Electronics), Royal Institute of Technology, Sweden

Geometric structure and electronic transport property of single alkanemonothiol molecule junction: external force effect and terminal group effect^{*}

Hu Wei¹⁾ Li Zong-Liang¹⁾ Ma Yong¹⁾ Li Ying-De¹⁾²⁾ Wang Chuan-Kui^{1)†}

1) (College of Physics and Electronics, Shandong Normal University, Jinan 250014, China)

2) (College of Physics and Electronics, Weifang University, Weifang 261061, China)

(Received 1 March 2010; revised manuscript received 11 May 2010)

Abstract

The hybrid density functional theory is used to study formation of the junction of alkanemonothiol molecules with different terminal groups. The relationship between geometric structures of the molecular junction and the external force is obtained. On the basis of the relationship, the electronic transport properties of the molecular junctions under different external forces are investigated using the elastic-scattering Green's function method. The results show that the C₁₁S molecular junction is broken when the distance of the two electrodes is larger than 2.1 nm. While for C₁₁SOH and C₁₀SCOOH molecular junctions, their critical distances are similarly 2.15 nm. Taking the same external force, we find that the C₁₁S molecule has the largest conducting ability, and the C₁₀SCOOH molecule has the smallest conducting ability. Furthermore, the conductance of the three molecular junctions is monotonically enhanced with the increase of the external force. The numerical results are consistent with the experimental findings qualitatively.

Keywords: external force, terminal group, electronic transport property, alkanemonothiol molecule

PACS: 73.63.-b, 31.15.A, 85.65.+h

^{*} Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 10804064, 10974121).

[†] Corresponding author. E-mail: ckwang@sdu.edu.cn