Molekulární elektronika je oblast zkoumající transportní a transportem indukované jevy na možná nejmenších jednotkách elektrických obvodů - molekulách. V této práci prozkoumáváme vliv jevů elektronové struktury na vodivost a rotaci molekul ve spojích. Používáme teorii funkcionálu hustoty, přiblížení GW a jednoduché analytické modely k porozumnění experimentálním pozorováním a k varování před možnými nevýhodami při adaptaci GW pro výpočty vodivosti ve shlukovém (cluster) formalismu.