

Chemia zajmuje się tworzeniem i charakteryzowaniem nowych związków. Obecnie znanych jest 118 pierwiastków chemicznych, ale jedynie około 2/3 z nich jest wystarczająco stabilnych by mogły służyć do syntezy użytecznych związków. Związki chemiczne tworzone są z różnych kombinacji pierwiastków, np. woda składa się z wodoru i tlenu w stosunku 2 do 1. Istotne że większość pierwiastków przyjmuje kilka różnych „stopni utlenienia” tj. postaci, które mają formalnie odmienną liczbę elektronów przypisanych do danego atomu. Umożliwia to tworzenie większej liczby związków przez te same pierwiastki, np. zmiana stopnia utlenienia tlenu w wodzie daje wodę utlenioną (nadtlenek wodoru), której zarówno wzór strukturalny H_2O_2 , inny od H_2O , oraz fizyczne i chemiczne właściwości są różne.

Stopnie utlenienia mogą być zarówno ujemne jak i dodatnie, jednak w większości przypadków występują w granicach od -4 do +4 rzadziej +5,+6,+7 oraz +8. Obecnie tylko jeden wyjątek jest znany w niedawno odkrytym kationie czterotlenku irydu IrO_4^+ , w którym iryd występuje na +9 stopniu (Wang et al., Nature 2014). Możliwość istnienia kilku innych przypadków spekulowana była przez teoretyków. Nie ma jednak obecnie znanych układów obojętnych elektrycznie (bez ładunku), w których pierwiastek byłby na stopniu wyższym od +8.

Niniejszy projekt ma na celu teoretyczne zbadanie nowych związków, które mogłyby zawierać ciężkie pierwiastki przejściowe 6-tego okresu na stopniach utlenienia od +9 do +12 oraz wybrane lantanowce utlenione do +5 lub +6 stopnia. W tym celu wybrane zostały pierwiastki, które mogą spełnić tzw. regułę oktetu, co zwiększa szansę na otrzymanie stabilnych związków. W izolowanych cząsteczkach wokół jonu centralnego, który ma formalnie wysoki ładunek można zgromadzić bardzo niewielką liczbą atomów niemetalu ze względu na mały promień takiego jonu i duże siły odpychania między niemetalami. Ze względu na ograniczenia koodynacyjne niezbędne będzie sięgnięcie po najbardziej elektroujemne ligandy trójujemne, t.j. N^{3-} . W związku z tym by osiągnąć tak wysokie stopnie utlenienia należy skupiać wokół centrów metalicznych atomy niemetalu, w małej przestrzeni, stąd modelowane będą także warunki wysokich ciśnień. W tych warunkach atomy zmuszane są do zmniejszenia odległości ich dzielącej i tworzenia wiązań. W przypadku obecności metalu i niemetalu możliwe są wtedy do osiągnięcia nowe wysokie stopnie utlenienia metalu.

Badania będą polegać na systematycznym studiowaniu związków irydu, platyny, złota i rtęci, oraz wybranych lantanowców ponieważ te metale mają potencjał osiągnięcia nieznanych jeszcze tak wysokich stopni utlenienia. Różne kombinacje tych metali z niemetalami zostaną ściśnięte *in silico* w sieci krystalicznej z użyciem najwyższej klasy metod teoretycznych dla periodycznych kryształów. Przetestowany zostanie szeroki zakres ciśnień dla znalezienia warunków stabilizujących te układy na wysokich stopniach utlenienia. Po znalezieniu odpowiednich warunków szczegółowe właściwości takiego związku zostaną policzone metodami teoretycznymi.

W wyniku badań liczymy na znalezienie odpowiedzi na trzy fundamentalne pytania:

1. Czy jest możliwe zwiększenie stopnia utlenienia ponad +8 w obojętnych elektrycznie układach?
2. Czy wymagane do tego wysokie ciśnienia mogłyby zostać osiągnięte w eksperymencie?
3. Jakie byłyby kluczowe właściwości takich związków?

Mamy także nadzieję zainspirować eksperymentatorów sugerując prawdopodobne związki i warunki niezbędne do ich poszukiwania.