

Aniony superhalogenowe to związki chemiczne o wyjątkowych właściwościach, które można opisać prostym wzorem ogólnym MX_{k+1}^- (M oznacza centralny atom metalu, X to atom z grupy fluorowców, a k to maksymalna wartościowość atomu M). Charakteryzują się one niezwykle dużymi wartościami wertykalnej energii odrywania elektronu (VDE), czyli wielkości, która określa jak mocno dana cząsteczka wiąże nadmiarowy elektron. Powinowactwo elektronowe obojętnych superhalogenów znacznie przewyższa analogiczne wielkości wyznaczone dla najbardziej elektroujemnych pierwiastków z układu okresowego – fluoru i chloru. Z tego właśnie powodu superhalogeny tak chętnie i mocno wiążą nadmiarowy elektron i potrafią „wyrwać” go z niemal każdej cząsteczki chemicznej, która znajdzie się w ich otoczeniu (nawet tak stabilnych i słabo reaktywnych związków jak woda, benzen i niektóre gazy szlachetne, takie jak ksenon i krypton). Dotychczas poznano już wiele rodzajów anionów superhalogenowych, na przykład: aniony jednocentrowe (zawierające jeden atom centralny) i wielocentrowe (wiele atomów centralnych), alternatywne aniony superhalogenowe (w roli atomu centralnego występuje niemetal), czy też hiperhalogeny (rolę podstawników pełnią inne superhalogeny). Ze względu na dalszy rozwój chemii gazów szlachetnych i pozostałych niemal biernych chemicznie cząsteczek (na przykład metanu), uzasadnione jest poszukiwanie kolejnych superhalogenów, których powinowactwo elektronowe będzie jeszcze wyższe niż wartości odkryte dla dotychczas poznanych związków.

Celem projektu jest zaprojektowanie i opisanie nowych anionów superhalogenowych (w tym anionów nano-superhalogenowych oraz anionów mieszanych), których wartości wertykalnej energii odrywania elektronu mogą być wyższe niż 13,87 eV (najwyższa do tej pory oszacowana energia VDE). Odkrycie tak silnie związanych anionów może umożliwić jonizację kolejnych gazów szlachetnych, takich jak argon i neon. Ze względu na swój nietypowy kształt (puste w środku przestrzenne struktury) i rozmiar, aniony nano-superhalogenowe będą mogły także pełnić rolę pułapek molekularnych i nośników zdolnych do transportu innych związków chemicznych w swoim wnętrzu.

Badania zaplanowane w projekcie zostaną wykonane za pomocą metod chemii teoretycznej – obliczeń komputerowych. Nowe aniony superhalogenowe zostaną zaprojektowane przy użyciu odpowiedniego programu graficznego, następnie ich geometria zostanie zoptymalizowana w celu znalezienia minimum energetycznego (najbardziej stabilnej struktury). Analiza otrzymanych wyników pozwoli na dokładne opisanie właściwości otrzymanych związków oraz ich potencjalnych zastosowań. Uzyskane dane teoretyczne będą mogły także stanowić inspirację do dalszych badań eksperymentalnych tego typu anionów.