

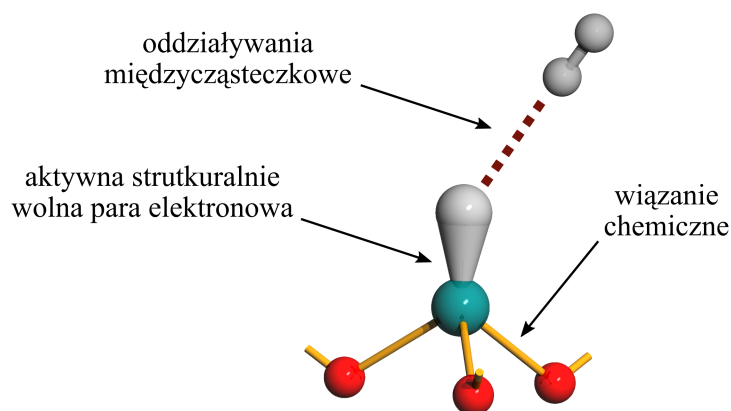
SterActLEP – badania strukturalne związków arsenu i antymonu zawierających aktywne strukturalnie wolne pary elektronowe

STRESZCZENIE POPULARNONAUKOWE

Za powstawanie związków chemicznych odpowiedzialne są elektrony walencyjne. Ich wymiana oraz współlnianie pomiędzy atomami prowadzi do powstawania różnych wiązań chemicznych – wiązań jonowych, metalicznych i kowalencyjnych. Czasami zdarza się, że pary elektronowe nie tworzą wiązań chemicznych, ale znajdują się w pobliżu atomu i wpływają na przestrzenne rozmieszczenie wiązań chemicznych wokół niego (patrz Rysunek 1). Mówimy wtedy o aktywnych strukturalnie wolnych parach elektronowych.

Niniejszy projekt obejmuje otrzymywanie i krystalizację związków chemicznych, zbudowanych z cząsteczek zawierających takie wolne pary elektronowe. Związkami modelowymi będą związki inkluzyjne i interkalaty tlenku arsenu(III) oraz odmiany polimorficzne tlenku antymonu(III). Planowane jest otrzymanie tych substancji, określenie ich struktury krystalicznej w warunkach normalnego ciśnienia i pod zwiększonym ciśnieniem rzędu kilkudziesięciu tysięcy atmosfer. Na tej podstawie w ramach modelu wektorowej walencyjności wiązań określona zostanie w sposób ilościowy aktywność strukturalna wolnych par elektronowych oraz wpływ ciśnienia na nią. Następnie przebadane zostaną oddziaływania wolnych par elektronowych z innymi cząsteczkami, takimi jak cząsteczka wodoru, występującymi w związkach inkluzyjnych i interkalatach. Podjęta zostanie próba zrozumienia wpływu wolnych par elektronowych na oddziaływania międzycząsteczkowe, a zdobyta w ten sposób wiedza może przyczynić się do zaprojektowania lepszych materiałów do magazynowania wodoru, a także do efektywniejszego projektowania materiałów o pożądanych właściwościach termoelektrycznych, optoelektrycznych czy multiferroicznych.

Realizacja projektu przyczyni się w znacznym stopniu do głębszego poznania i zrozumienia chemii tlenowych związków arsenu(III) i antymonu(III), a w konsekwencji do rozwoju chemii nieorganicznej. Przeprowadzona analiza aktywności strukturalnej wolnej pary elektronowej w tych związkach w oparciu o model wektorowej walencyjności wiązań spowoduje jego popularyzację. Projekt obejmuje badania podstawowe, ale ich rezultaty będą miały również wspomniane wyżej implikacje praktyczne dla projektowania materiałów.



Rysunek 1. Podstawowa jednostka strukturalna obecna w tlenkach arsenu(III) i antymonu(III). Zielona i czerwone kulki oznaczają odpowiednio atom arsenu lub antymonu i atomy tlenu.