

Streszczenie

W niniejszej rozprawie doktorskiej przedstawiono rozważania dotyczące funkcjonalizacji układów chemicznych, jak i zmierzono przy użyciu metod obliczeniowych chemii kwantowej wybrane właściwości fizykochemiczne badanych cząsteczek. Funkcjonalizacja tlenków metali przejściowych (FeO, NiO, CoO) o właściwościach magnetycznych z atomami metali alkalicznych (Li, Na oraz Li₂, Na₂), prowadzi do utworzenia zmodyfikowanych tlenków charakteryzujących się bardzo niskimi wartościami potencjału jonizacji (4,85–3,96 eV) z zachowaniem ich własności magnetycznych (lokalny spinowy moment magnetyczny zlokalizowany na atomach metali przejściowych mieści się w zakresie 0,8–4,9 μ_B). Modyfikacja tlenków metali ziem alkalicznych (BeO, MgO i CaO) tlenkami metali alkalicznych (Li₂O, Na₂O and K₂O), prowadzi do utworzenia stabilnych mieszanych tlenków, których właściwości kwasowo-zasadowe zostały oszacowane przy użyciu powinowactwa do protonu (PA), zasadowości w fazie gazowej (GPB), powinowactwa do anionu wodorowego (HA) i elektrofilowości w fazie gazowej (GPE). Zasadowość, tak zaprojektowanych układów zwiększa się wraz ze wzrostem liczby atomowej metalu alkalicznego (w szeregu MOLi₂O < MONa₂O < MOK₂O (gdzie M=Be, Mg, Ca)). Natomiast kwasowość w myśl teorii Lewisa, określona przez zdolność do przyłączenia anionu wodorowego przez [MON₂O]H⁺ wskazuje na spadek kwasowości, wraz ze wzrostem zasadowości odpowiednich tlenków. Funkcjonalizacja BH₃, AlH₃ i GaH₃ przez pierwiastki metali ziem alkalicznych (M' = Mg, Ca) skutkuje uformowaniem stabilnych układów, w wyniku utworzenia wiązania koordynacyjnego w którym donorem pary elektronowej opisywanej orbitalem *s* jest atom Mg lub Ca, natomiast akceptorem atom borowca (który posiada nieobsadzony orbital *p*). Dodatkowo, przanalizowano stabilność powstałych układów anionowych, w wyniku przyłączenia nadmiarowego elektronu do odpowiadających im obojętnych cząsteczek.