

Streszczenie rozprawy doktorskiej

Natura wiązania kowalencyjnego jest przedmiotem wielu dyskusji we współczesnej chemii.

Chociaż wzór Lewisa został wprowadzony na długo przed erą chemii kwantowej, reprezentacja wielokrotnych wiązań kowalencyjnych (tj. $X-X$, $X=X$, $X\equiv X$) ze wspólnymi parami elektronów została szeroko zaakceptowana i stosowana we współczesnej chemii. Problem natury wiązań chemicznych polega na połączeniu wszystkich atomów w układzie okresowym, choćby w aspekcie czysto hipotetycznym.

Straub i wsp. badali wielokrotność wiązania $B-X$ ($X=N, O, F, P, S, Cl$) i opisali korelację między przewidywaną krotnością wiązania a jego długością, zakładając obecność ośmiu elektronów wokół boru. Interesujące okazało się zatem zbadanie natury wiązań tworzonych przez atom boru za pomocą nowoczesnej metody analizy wiązań wywodzącej się z topologii i chemii kwantowej - topologicznej analizy Funkcji Lokalizacji Elektronów (ELF).

Atom boru ma dwa puste orbitale $2p$, dlatego też można rozważyć istnienie podwójnych i potrójnych wiązań kowalencyjnych $B=X$, $B\equiv X$.

Przedstawione w pracy wyniki teoretyczne (obliczeniowe) dotyczą lokalnej natury elektronowej wiązań chemicznych utworzonych przez atom boru z atomami boru (BB), węgla (BC), azotu (BN), tlenu (BO), fluoru (BF) i chlor (BCl). Przebadano 124 cząsteczki zawierające wiązania $B-X$ ($X = B, C, N, O, F, Cl$) w różnych stanach elektronowych ($2S+1 = 1, 2, 3, 4$) oraz w zakresie ładunków formalnych ($q = -1, 0, +1$). Zbadano 72 małe cząsteczki, znane jedynie z rozważań teoretycznych, oraz 52 duże cząsteczki charakteryzujące się eksperymentalnie opisaną strukturą krystaliczną.

Dla wszystkich badanych wiązań BX ($X = B, C, N, O, F, Cl$), które zostały opisane jako kowalencyjne, analiza topologiczna ELF wykazała wiążący atraktor disynaptyczny $V(B,X)$.

Generalnie otrzymane wartości populacji basenowych są zbliżone do formalnych wartości 1, 2, 4 i 6e, natomiast istnieje wiele przypadków cząsteczek, dla których wartości wiązań BX nie mogą być łatwo zinterpretowane.

Populacje basenów dla wiązań BB , BC i BN wspierają formalną koncepcję potrójnego ($B\equiv B$, $B\equiv C$, $B\equiv N$), podwójnego ($B=B$, $B=C$, $B=N$) i pojedynczego wiązania ($B-B$, $B-N$, $B-C$). Możliwość wielokrotnych wiązań $B=O$, $B\equiv O$, $B=F$, $B\equiv F$ i $B=Cl$, $B\equiv Cl$ została dokładnie zbadana i sugestia ta nie została potwierdzona.