

Jarosław Zaklika

Praktyczna metoda obliczania chemicznych indeksów reaktywności
stosowanych w konceptualnej teorii DFT

Streszczenie pracy doktorskiej

Praca opisuje realizację celu badawczego skupiającego się na znalezieniu metody obliczeniowej dla miar reaktywności, takich jak lokalna miękkość, funkcja Fukui i globalna twardość, na podstawie funkcji gęstości elektronowej, poza przybliżeniem różnic skończonych. Została podjęta próba wykorzystania tej wiedzy w celu przewidywania zmian funkcji termodynamicznych w wyniku reakcji. Wykorzystano teoremat gradientowy umożliwiający bezpośrednie powiązanie między funkcją gęstości elektronowej badanego obiektu, a lokalną miękkością, bez potrzeby wykonywania różniczkowania po liczbie elektronów N . Przedstawiono roboczy wzór prowadzący do lokalnej miękkości stanowiący racjonalne przybliżenie, uzasadnione na podstawie zasady krótkiego zasięgu dla materii elektronowej, NEM. Stosując powyższą metodę do atomów, wykazano jej przydatność w łatwym dostępie do nieosiągalnych w inny sposób danych ilościowych dotyczących miękkości (lokalnej i globalnej) dla atomów i jonów. Podstawowe wyniki prognozy przedstawiono w postaci radialnych rozkładów lokalnej miękkości i funkcji Fukui. To otworzyło drogę do obliczeń kolejnych pochodnych gęstości elektronowej, a tym samym wskaźników reaktywności. Wypracowaną metodę wykorzystano także do analizy pochodnych gęstości opisywanych przez orbitale wodoropodobne, co pozwoliło m. in. ujawnić zależność miękkości globalnej od liczby atomowej jądra. Pokazano wyniki dla pierwszej i drugiej pochodnej gęstości elektronowej po N (liczbie elektronów) i po μ (potencjale chemicznym). Wyniki zastosowano do obliczenia zmian funkcji stanu ΔN , ΔE i $\Delta\mu$ zaburzanych przez zmianę potencjału zewnętrznego $\Delta v(\mathbf{r})$. Udowodniono, że lokalna miękkość oraz lokalna hipermiękkość dostarczają kluczowych informacji chemicznych na temat wrażliwości gęstości orbitalnej na zaburzenie potencjału zewnętrznego $\Delta v(\mathbf{r})$, prowadzące do wymiany elektronów ΔN oraz odpowiadających im zmianom funkcji stanu ΔE , $\Delta\mu$.