

**СРПСКО КРИСТАЛОГРАФСКО ДРУШТВО
SERBIAN CRYSTALLOGRAPHIC SOCIETY**

**XXV КОНФЕРЕНЦИЈА
СРПСКОГ КРИСТАЛОГРАФСКОГ ДРУШТВА**

Изводи радова

**25th CONFERENCE OF THE
SERBIAN CRYSTALLOGRAPHIC SOCIETY**

Abstracts

Бајина Башта – Вајина Вашта
2018.

ДОКАЗ О ЈАКИМ МЕТАЛ-ВОДОНИК ИНТЕРАКЦИЈАМА У КРИСТАЛНИМ СТРУКТУРАМА КОМПЛЕКСА ПРЕЛАЗНИХ МЕТАЛА

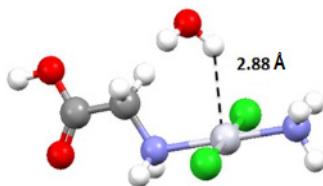
Д. Ж. Вељковић^a, А. Ђуновић^a, Д. Кретић^a, С. Д. Зарић^a

^aУниверзитет у Београду - Хемијски факултет, Студентски трг 12-16, Београд
e-mail: vdusan@chem.bg.ac.rs

Прва истраживања о метал-водоник интеракцијама појавила су се пре четири деценије и углавном су се фокусирали на платина (II) једињења [1]. Иако се метали обично не сматрају акцепторима у водоничним везама, доказано је да они могу играти важну улогу у овом типу нековалентних интеракција. Овде су приказани квантохемијски и кристалографски докази о постојању веома јаким водоничних веза између молекула воде и различитих Ir, Rh, Pt и Pd комплекса [2].

Геометрије и енергије О-Н/М интеракција су израчунате за модел системе који садрже молекула воде и квадратно-планарне ацетилацетонато комплексе Ir, Rh, Pt и Pd. Проучавани су како неутрални тако и негативно наелектрисани ацетилацетонато комплекси који садрже en, H₂O, CO, CN⁻ и OH⁻ лиганде. Резултати квантохемијских прорачуна су показали да [Ir(acac)(en)] комплекс гради најјаче О-Н/М интеракције са водом (-9,83 kcal/mol).

На основу резултата квантохемијских прорачуна претражена је Кембричка база кристалографских података да би се издвојиле све кристалне структуре које садрже О-Н/М интеракције између комплекса Ir, Rh, Pd и Pt и О-Н фрагмента.



Кристална структура SSAPGC11 у којој се јавља О-Н/Pt интеракција.

Резултати квантохемијских прорачуна и анализа кристалних структура указују да О-Н/М интеракције између неутралних комплекса и молекула воде које су проучаване у овом раду спадају међу најјаче водоничне везе између неутралних врста. Израчунате О-Н/М интеракције између [Ir(acac)(en)] комплекса и молекула воде (-9,83 kcal/mol) су знатно јаче од конвенционалне водоничне везе између два молекула воде (-4,84 kcal/mol).

Захвалница:

Овај рад је подржан од стране Министарства просвете, науке и технолошког развоја Републике Србије [пројекат бр. 172065]. Д. Ж. Вељковић се захваљује IUCr за финансијску подршку.

[1] E. R. T. Tiekink, *Coordination Chemistry Reviews*, **345** (2017) 209–228.

[2] G. V. Janjić, M. D. Milosavljević, D. Ž. Veljković, S. D. Zarić, *Physical Chemistry Chemical Physics*, **19** (2017) 8657-8660.

EVIDENCE OF STRONG METAL-HYDROGEN INTERACTIONS IN CRYSTAL STRUCTURES OF TRANSITION METAL COMPLEXES

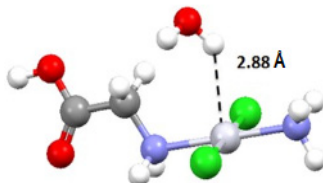
D. Ž. Veljković^a, A. Đurđević^a, D. Kretić^a, S. D. Zarić^a

^a *University of Belgrade - Faculty of Chemistry, Studentski trg 12-16, 11000 Belgrade*
e-mail: vdusan@chem.bg.ac.rs

First studies of metal-hydrogen interactions were reported four decades ago and were mainly focused on platinum (II) compounds [1]. Although metals are not usually recognized as acceptors in hydrogen bonding, evidence showed that they can play important role in this type of noncovalent interactions. Here we present quantum chemical and crystallographic evidence of very strong hydrogen bonds between water molecule and different Ir, Rh, Pt and Pd complexes [2].

Geometries and energies of O-H/M interactions were calculated on model systems containing water molecule and square-planar acetylacetonato complexes of Ir, Rh, Pt and Pd atoms. Both neutral and negatively charged acetylacetonato complexes containing en, H₂O, CO, CN⁻ and OH⁻ ligands were studied. Results of quantum chemical calculations revealed that [Ir(acac)(en)] complex forms the strongest O-H/M interactions with water (− 9.83 kcal/mol).

Based on the results of quantum chemical calculations, Cambridge Structural Database was searched to find all crystal structures containing O-H/M interactions between complexes of Ir, Rh, Pd and Pt and O-H fragments.



Crystal structure CCAPGC11 containing O-H/Pt interaction.

Results of quantum chemical calculations and analysis of crystal structures suggest that O-H/M interactions between neutral complexes and water molecule studied in this work are among the strongest hydrogen bonds between neutral species. Calculated O-H/M interaction between [Ir(acac)(en)] complex and water molecule (− 9.83 kcal/mol) is considerably stronger than conventional hydrogen bond between two water molecules (− 4.84 kcal/mol).

Acknowledgements:

This work was supported by the Serbian Ministry of Education, Science and Technological Development [grant number 172065]. D. Ž. Veljković would like to thank IUCr for financial support.

[1] E. R.T. Tiekink, *Coordination Chemistry Reviews*, **345** (2017) 209–228.

[2] G. V. Janjić, M. D. Milosavljević, D. Ž. Veljković, S. D. Zarić, *Physical Chemistry Chemical Physics*, **19** (2017) 8657-8660.