

НЕКОВАЛЕНТНЕ ИНТЕРАКЦИЈЕ КОМПЛЕКСА МЕТАЛА И АРОМАТИЧНИХ МОЛЕКУЛА

Д. Б. Нинковић ^а, Д. Вељковић ^б, Д. Маленов ^в, М. Р. Миловановића ^а, Ј. М. Живковић ^а, И. Станковић ^б, И. Вељковић ^б, В. Медаковић ^в, Ј. Благојевић Филиповић ^а, Д. Војислављевић Васиљев ^а, С. Д. Зарић ^{в,г}

^а Иновациони центар Хемијског факултета, Студентски трг, 12-16, 11000 Београд, Србија; ^б Институт за Хемију, Технологију и Металургију, Универзитет у Београду, Његошева 12, 11000 Београд, Србија; ^в Хемијски факултет, Универзитет у Београду, Студентски трг, 12-16, 11000 Београд, Србија; ^г Департман за хемију, Тексас A&M Универзитет у Катару, Поштански фах 23874, Доха, Катар
e-mail: szaric@chem.bg.ac.rs

Наше истраживање се заснива на анализи података у кристалним структурама из Кембичке базе структурних података (CSD) и на квантно хемијским прорачунима. Анализа података из CSD-а омогућава да се препознају интеракције у кристалним структурама и да се опишу геометрије ових интеракција, док помоћу квантно-хемијских прорачуна можемо проценити интеракционе енергије и пронаћи најстабилније геометрије интеракција. Користећи ову методологију успели смо да препознамо и опишемо неколико нових типова интеракција.

Наше проучавање интеракција планарних метал-хелатних прстенова показало је могућност стекинг интеракција са органским ароматичним прстеновима и интеракције између два хелатна прстена. Израчунате енергије указују на јаке стекинг интеракције метал-хелатних прстенова; стекинг метал-хелатних прстенова је јачи од стекинга између два молекула бензена. Испитивања интеракција координираних молекула воде и амонијака указују на јаче водоничне везе и јаче ОН/π и NH/π интеракције координираних у односу на некоординоване молекуле воде и амонијака. Прорачуни ОН/М интеракција између металног јона у квадратно планарним комплексима и молекула воде указују да су ове интеракције међу најјачим водоничним везама у било ком молекулском систему.

Студије о ароматичним молекулима указују на стекинг интеракције са великим хоризонталним померањима између два ароматична молекула са значајно јаким интеракцијама, енергија је 70% најјаче стекинг интеракције. Наши подаци такође указују на то да су интеракције алифатичних прстенова са ароматичним прстеном јаче од интеракција између два ароматична молекула, док су алифатично/ароматичне интеракције веома честе у протеинским структурама.

[1] D.P. Malenov, G.V. Janjić, V.B. Medaković, M.B. Hall, S.D. Zarić, *Cood. Chem. Rev.*, **345** (2017) 318–341.

[2] D.B. Ninković, G.V. Janjić, D.Ž. Veljković, D.N. Sredojević, S.D. Zarić, *Chem-PhysChem*, **12** (2011) 3511–3514.

[3] D.B. Ninković, J.M. Andrić, S.N. Malkov, S.D. Zarić, *PhysChemChemPhys*, **16** (2014) 11173–11177.

NONCOVALENT INTERACTIONS OF METAL COMPLEXES AND AROMATIC MOLECULES

D. B. Ninković ^a, D. Veljković ^c, D. Malenov ^c, M. R. Milovanović ^a, J. M. Živković ^a, I. M. Stanković ^b, I. Veljković ^b, V. Medaković ^c, J. Blagojević Filipović ^a, D. Vojislavljević Vasilev ^a, **S. D. Zarić** ^{c,d}

^a Innovation center of the Faculty of Chemistry, Studentski trg 12-16, Belgrade, 11000, Serbia; ^b Institute of Chemistry, Technology and Metallurgy, University of Belgrade, Njegoševa 12, 11000 Belgrade, Serbia; ^c Faculty of Chemistry, University of Belgrade, Studentski trg 12-16, Belgrade, 11000, Serbia; ^d Texas A&M University at Qatar, Education City, PO Box 23874, Doha, Qatar
e-mail: szaric@chem.bg.ac.rs

Our research is based on analyzing data in crystal structures from the Cambridge Structural Database (CSD) and on quantum chemical calculations. The analysis of the data from the CSD enable to recognize interactions in crystal structures and to describe the geometries of these interactions, while by quantum chemical calculations we can evaluate interaction energies and find the most stable interaction geometries. Using this methodology we were able to recognize and describe several new types of noncovalent interactions.

Our study of planar metal-chelate rings interactions showed possibility of chelate ring stacking interactions with organic aromatic rings, and stacking interactions between two chelate rings. The calculated energies indicate strong stacking interactions of metal-chelate rings; the stacking of metal-chelate rings is stronger than stacking between two benzene molecules. Studies of interactions of coordinated water and ammonia indicate stronger hydrogen bonds and stronger OH/ π and NH/ π interactions of coordinated in comparison to noncoordinated water and ammonia. The calculations on OH/M interactions between metal ion in square-planar complexes and water molecule indicate that these interactions are among the strongest hydrogen bonds in any molecular system.

The studies on aromatic molecules indicate stacking interactions at large horizontal displacements between two aromatic molecules with significantly strong interactions, the energy is 70% of the strongest stacking geometry. Our data also indicate that stacking interactions of an aliphatic rings with an aromatic ring are stronger than interactions between two aromatic molecules, while aliphatic/aromatic interactions are very frequent in protein structures.

- [1] D.P. Malenov, G.V. Janjić, V.B. Medaković, M.B. Hall, S.D. Zarić, *Cood. Chem. Rev.*, **345** (2017) 318–341.
[2] D.B. Ninković, G.V. Janjić, D.Ž. Veljković, D.N. Sredojević, S.D. Zarić, *Chem-PhysChem*, **12** (2011) 3511–3514.
[3] D.B. Ninković, J.M. Andrić, S.N. Malkov, S.D. Zarić, *PhysChemChemPhys*, **16** (2014) 11173–11177.