

Универзитет у Београду

Факултет за физичку хемију

Nove fizičkohemiske metode

# NEKOVALENTNE INTERAKCIJE

Milena Petković

**predmet: Nove fizičkohemische metode  
predavanje: Nekovalentne interakcije**

?

# Luisova kiselina i Luisova baza

---



A – Luisova kiselina (akceptor elektrona)

B – Luisova baza (donor elektrona)

AB – jedinjenje sa kovalentnom vezom ili **kompleksno jedinjenje**

# Nekovalentne interakcije (NI)

---

Sistemi sa nekovalentnim interakcijama:  
kompleksna jedinjenja koja formira bar jedan par Luisove kiseline i Luisove baze.

poreklo informacija o NI:

- eksperiment (kristalne strukture, spektroskopija)
- teorijski proračuni → kooperativnost

Analizirani sistemi u čvrstom i gasovitom stanju.

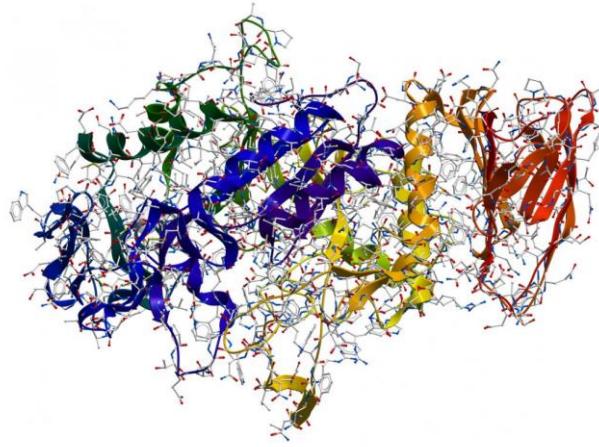
Problem: rastvori

Najpoznatiji predstavnici NI:

- vodonične veze
- steking interakcije

# Vodonične veze: značaj

---



# Vodonične veze: donori i akceptori

---

## donori vodonika

atomi velike elektronegativnosti: O, N i F

- svi halogeni elementi
- većina halkogenih elemenata
- većina pnikogenih elemenata
- atomi pojedinih metala

## akceptori vodonika

atomi sa slobodnim  $e^-$  parovima: O, N i F

- sistemi sa  $\pi e^-$
- pojedine  $\sigma$  veze
- ...



- 1) dokaz da je formirana veza;
- 2) dokaz da se ova veza ostvaruje preko H koji je već vezan za D.

# Vodonične veze: uzroci stabilnosti

---

- elektrostatičke interakcije
  - perturbacija elektronske strukture dveju vrsta pri njihovom približavanju  
**(unutrašnja** – pomeraj naelektrisanja; **spoljašnja** – prenos naelektrisanja)
- 
- koalentni doprinos
- disperzije interakcije
  - sterna odbijanja (Paulijeve sile izmene)

# Primer: CH...O

---

## povećanje polarnosti C-H veze

- promena hibridizacije C atoma,  $sp^3 \rightarrow sp$  ( $HC\equiv CH$ ,  $N\equiv CH$ )
- supstituenti na C atomu koji privlače elektrone (peptidne grupe u proteinima)

kod pojedinih sistema – plavi pomeraj  $\nu_{CH}$

značaj:

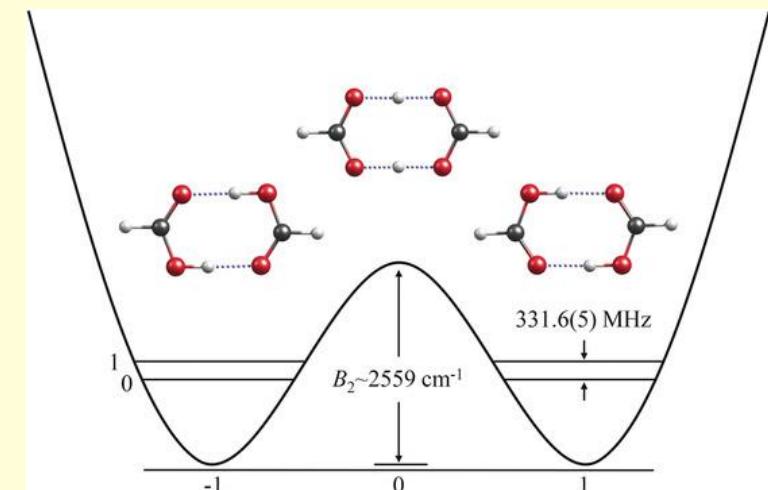
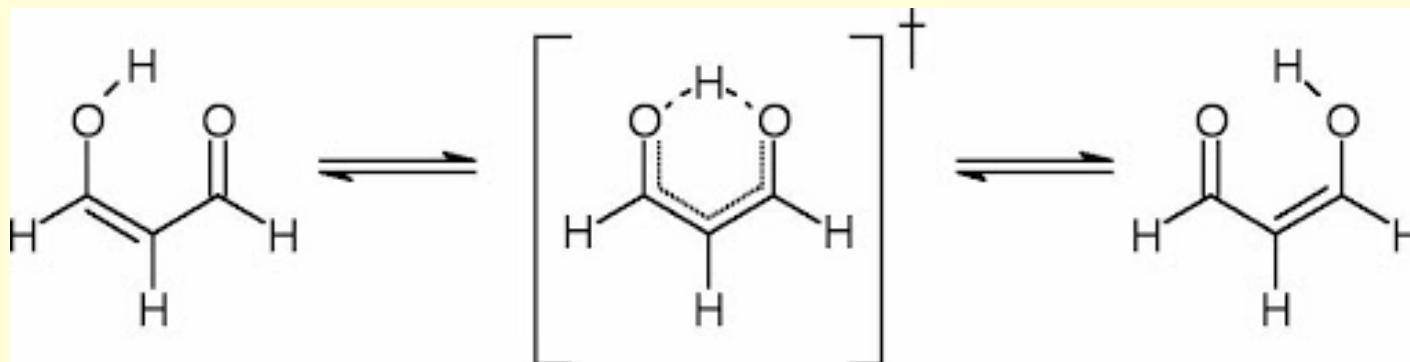
- struktura
- mehanizmi enzimskih reakcija
- ...

# Vodonične veze: prenos H

---

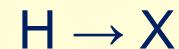
prenos:

- vodonika ili protona
- intramolekulski i intermolekulski
- u osnovnom i u pobuđenim elektronskim stanjima
- jednostruki ili dvostruki
- simetričan i asimetričan
- ...



# Nova definicija → nove interakcije

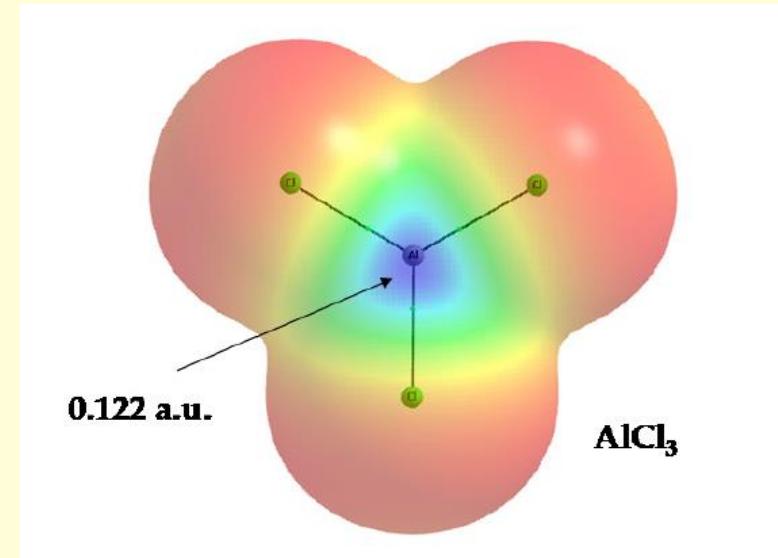
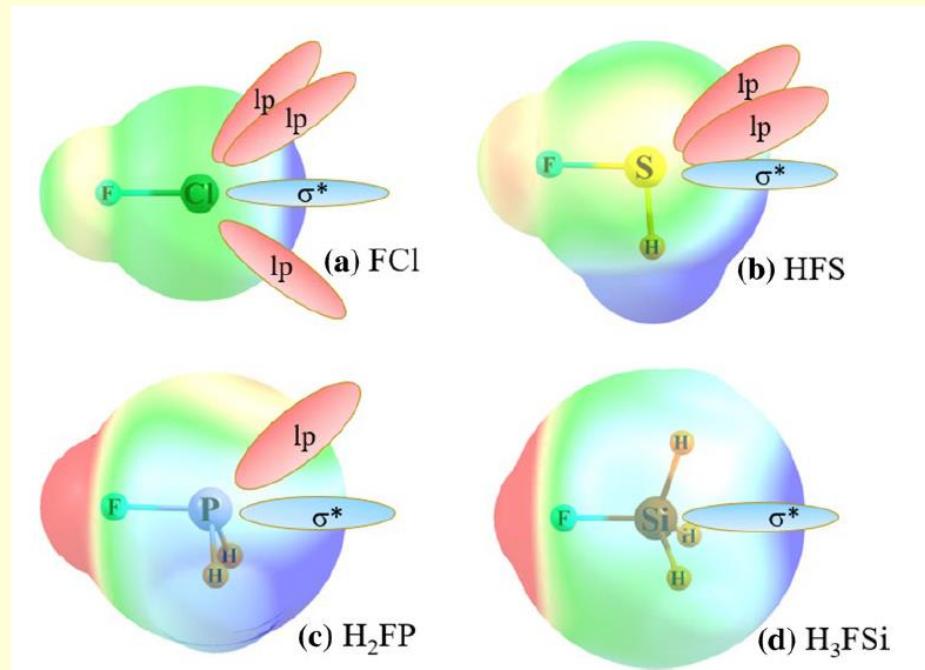
Vodonična veza: interakcija koja uključuje **premošćujući** atom vodonika.



X atom 14-18. (13) grupe periodnog sistema i ima anizotropnu raspodelu naelektrisanja

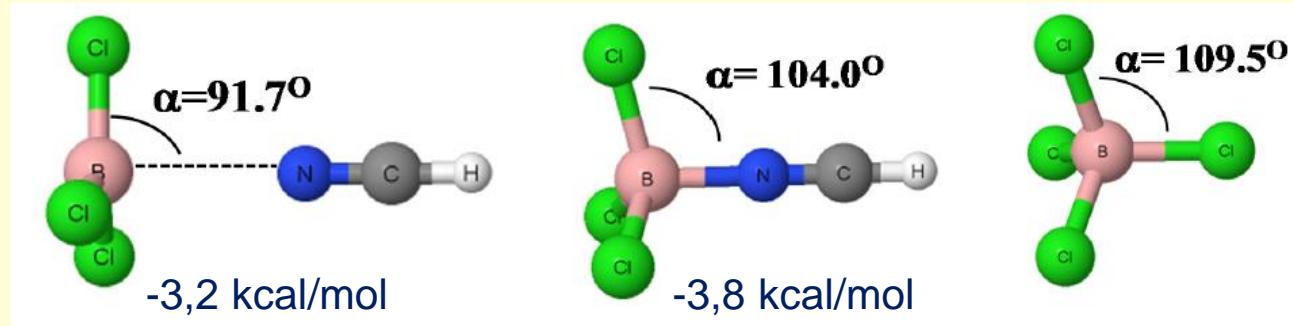


$\sigma$  ( $\pi$ ) šupljina



# Trielne veze

Triel bonds  
↑  
**13**

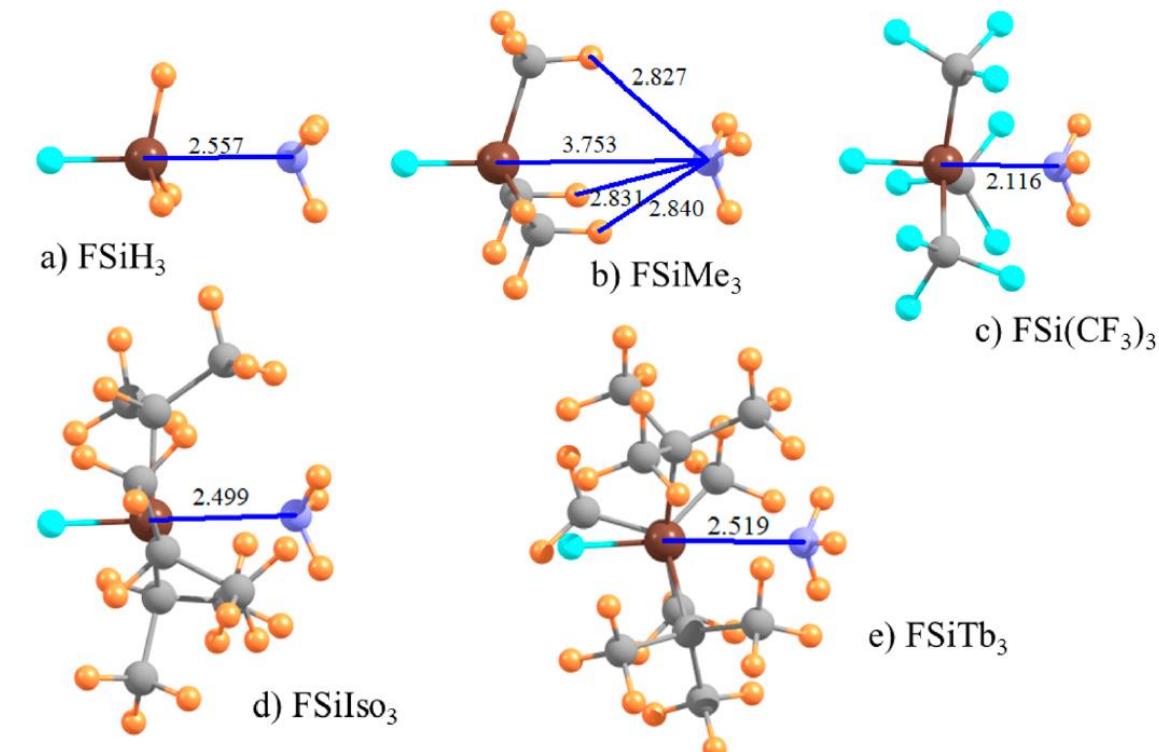


<b>B</b>
<b>Al</b>
<b>Ga</b>
<b>In</b>
<b>Tl</b>
<b>Nh</b>

Sistem	Energija veze kcal/mol
$\text{BCl}_3 \cdots \text{N}_2$	-1,5
$\text{AlH}_3 \cdots \text{NCH}$	-17,7
$\text{BH}_3 \cdots \text{NH}_3$	<b>-30,8</b>
$\text{AlCl}_3 \cdots \text{NH}_3$	<b>-38,8</b>
$\text{AlH}_3 \cdots \text{Cl}^-$	-52,2

# Tetrelne veze

Tetrel bonds	↑
14	
C	
Si	
Ge	
Sn	
Pb	
Fl	



Sistem	Energija veze sa $\text{NH}_3$ kcal/mol
$\text{FSiH}_3$	-5,5
$\text{FSiMe}_3$	-2,2
$\text{FSi}(\text{CF}_3)_3$	-18,2
$\text{FSiIso}_3$	+0,2
$\text{FSiTb}_3$	+10,8

uticaj:

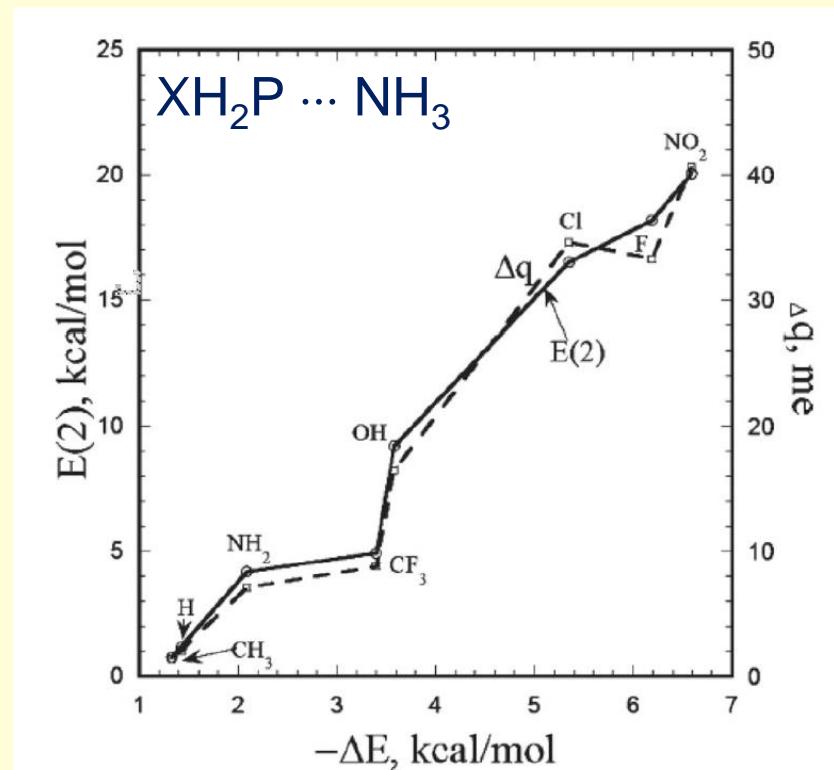
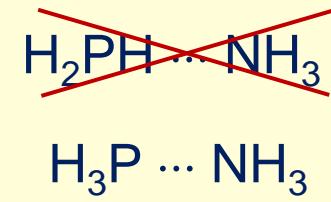
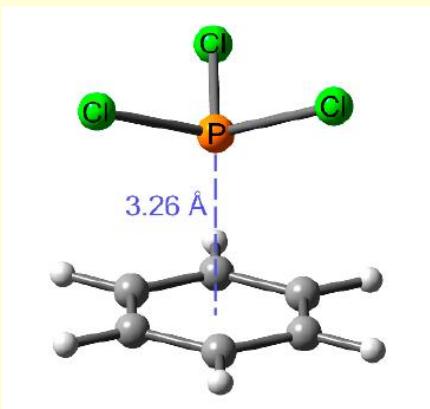
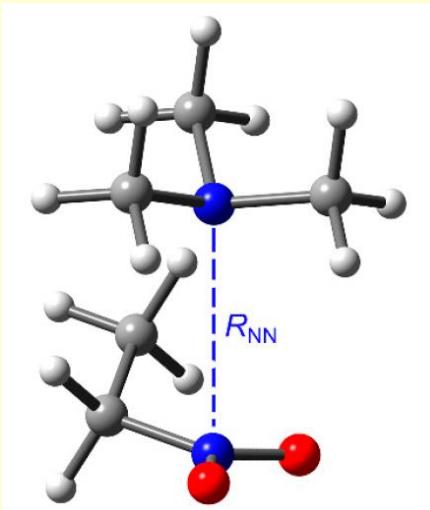
- veličine T atoma
- veličine supstituenta
- prirode supstituenta

# Pníkogene veze

Pníctogen bonds



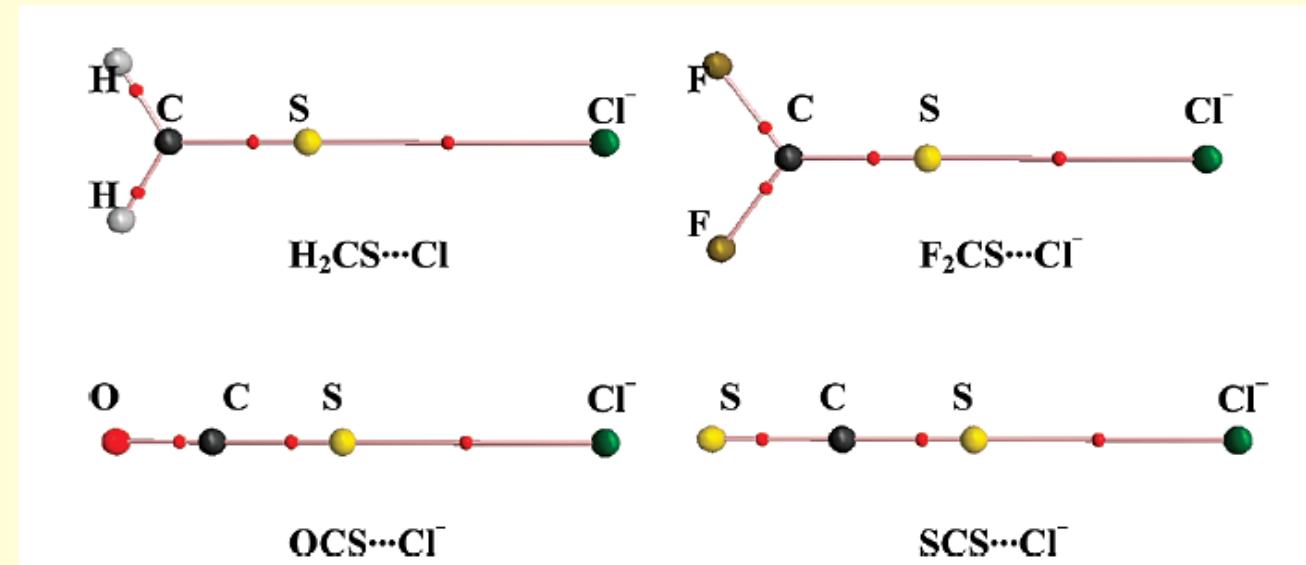
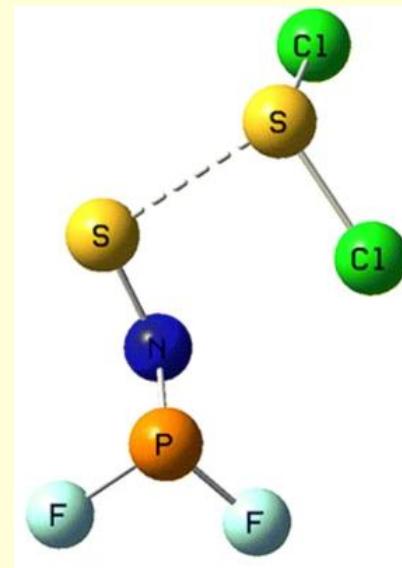
N
P
As
Sb
Bi
Mc



# Halkogene veze

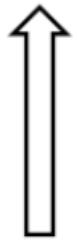
Chalcogen bonds

	16
O	
S	
Se	
Te	
Po	
Lv	



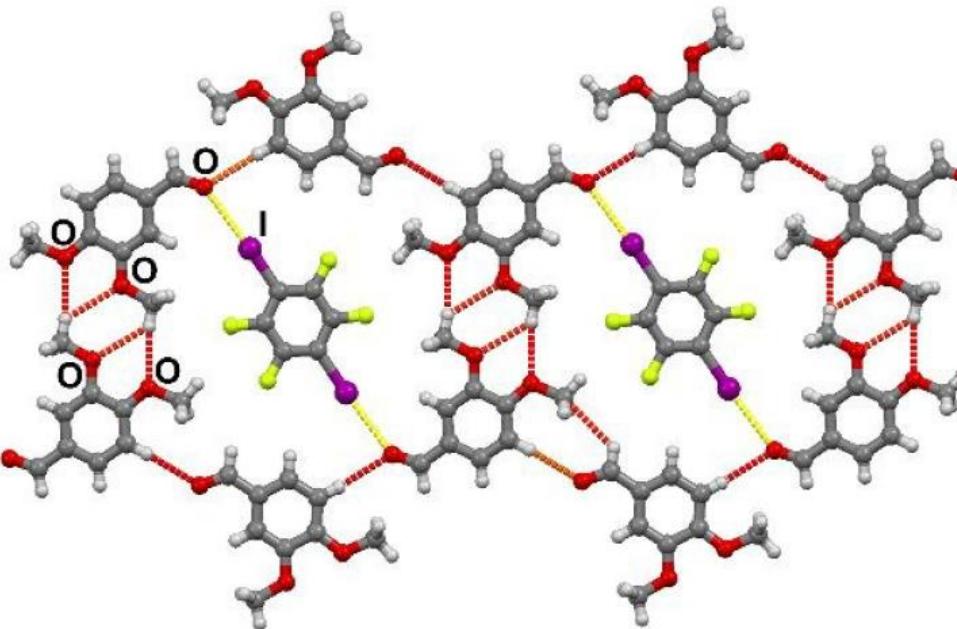
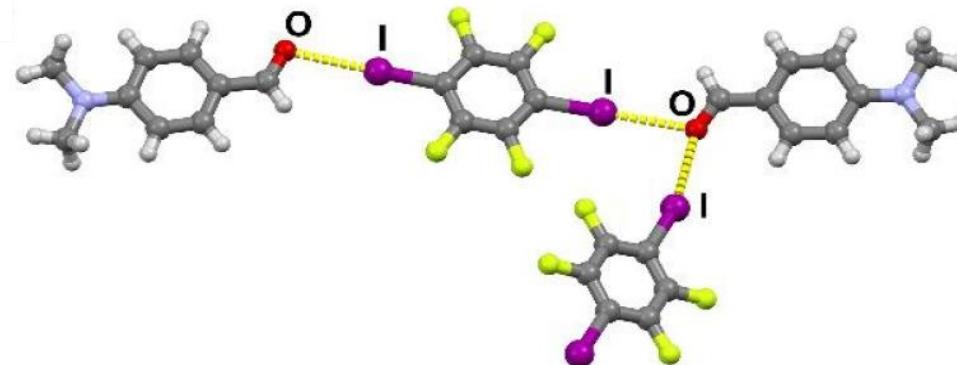
# Halogene veze

Halogen bonds



17

F
Cl
Br
I
At
Ts

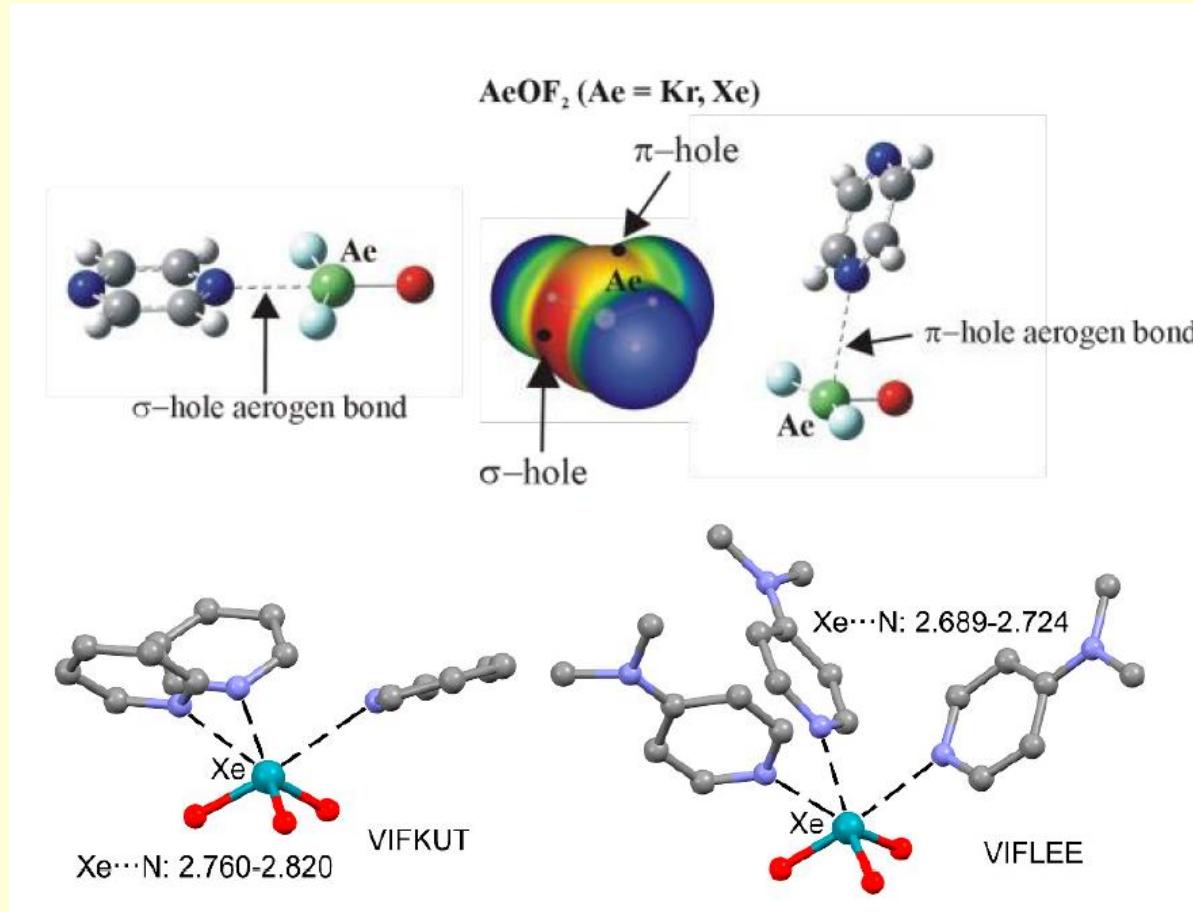


# Aerogene veze

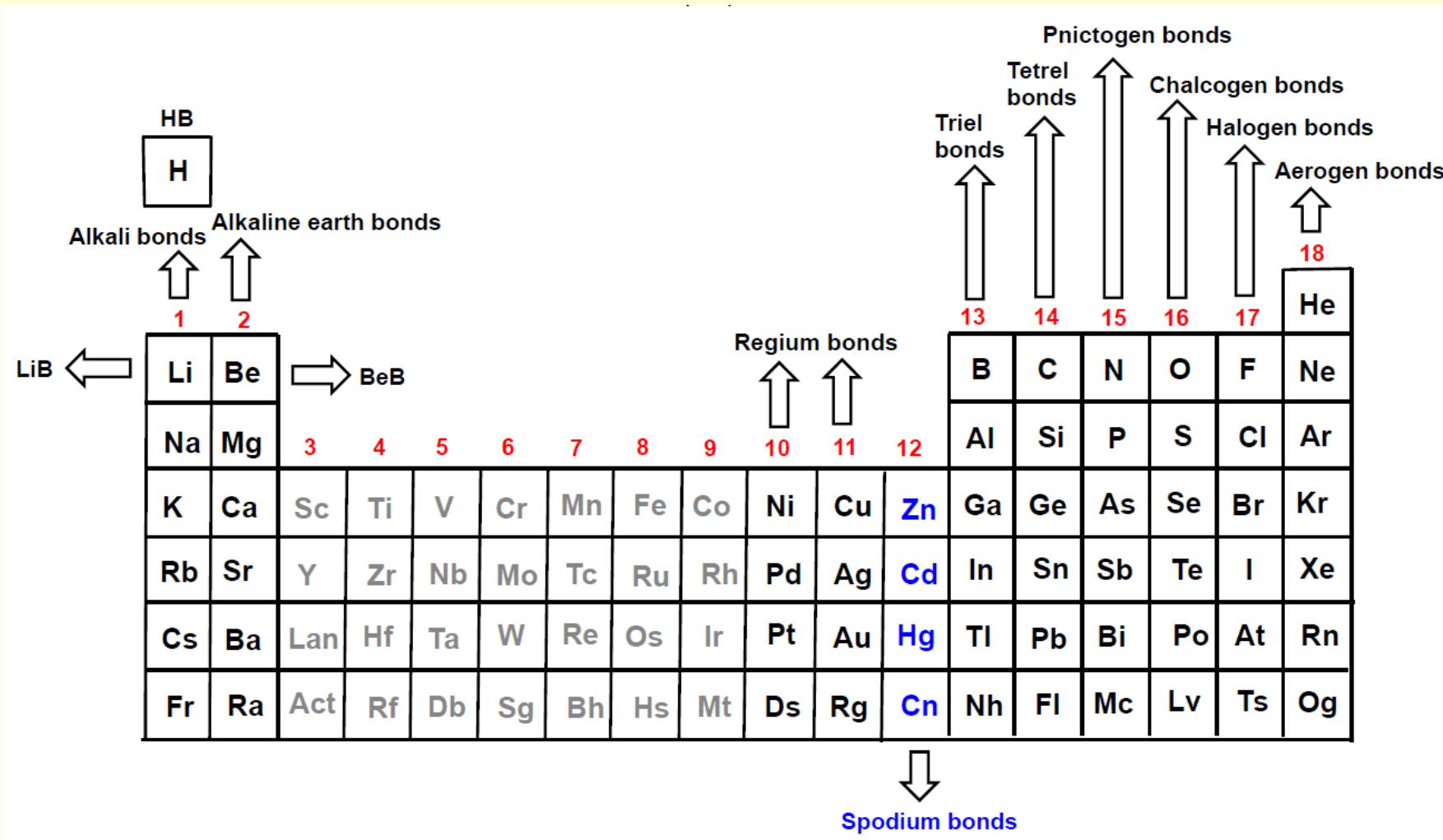
Aerogen bonds



He
Ne
Ar
Kr
Xe
Rn
Og

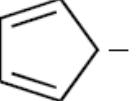
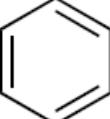
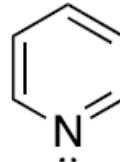


Naziv tipa NI potiče od Luisove kiseline



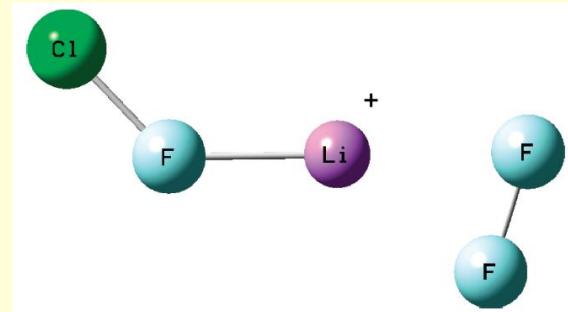
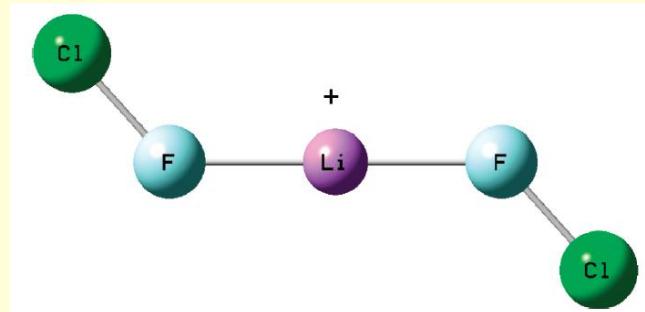
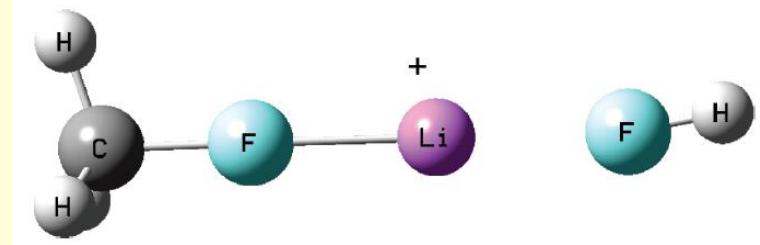
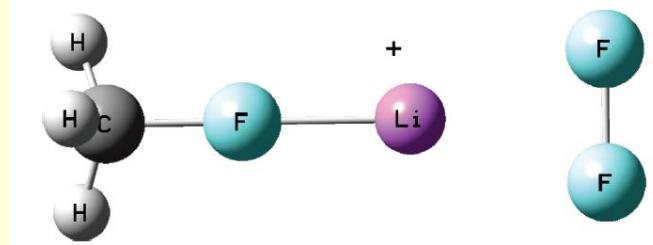
# Luisove baze

---

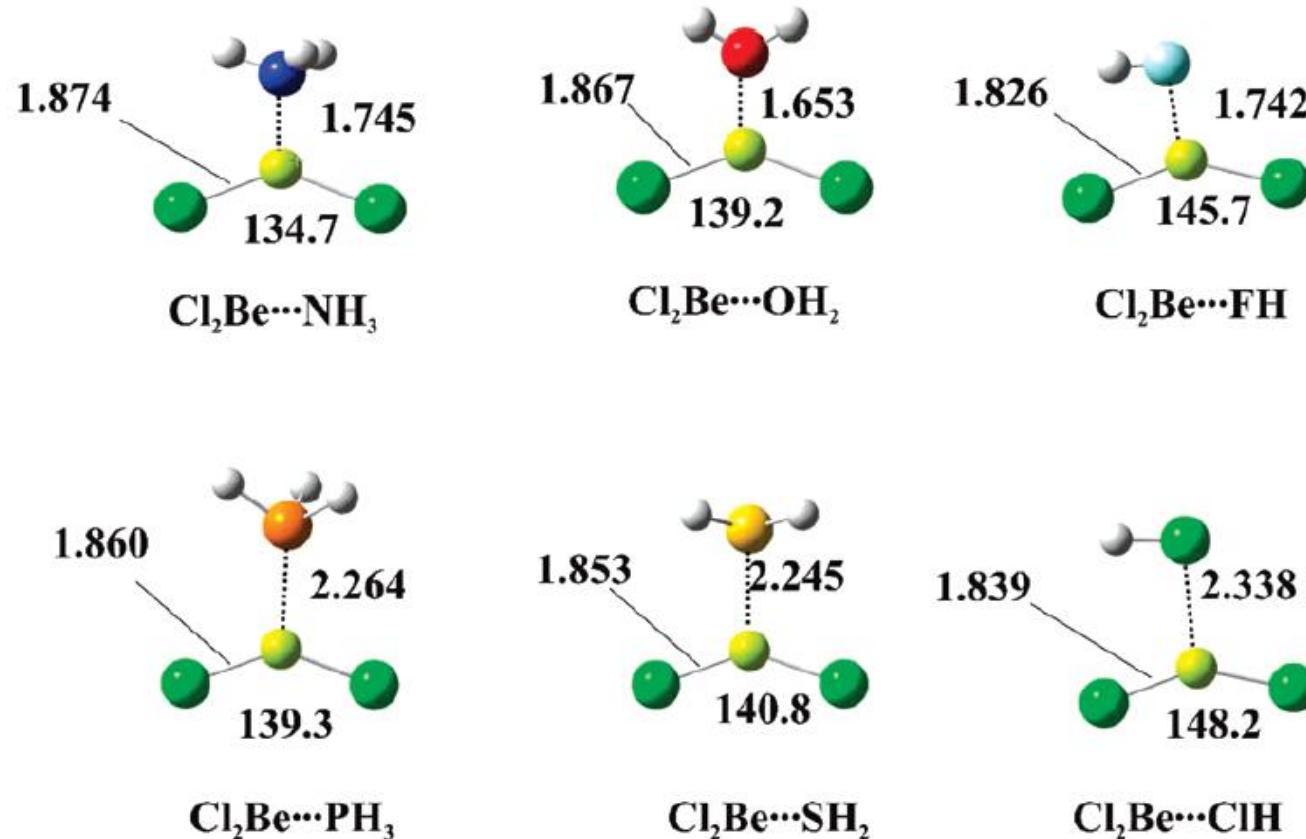
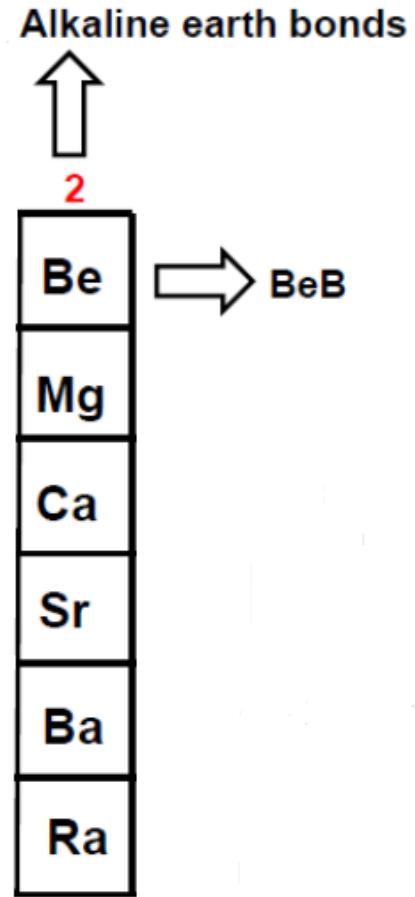
Anions	Neutral molecules			
	Atoms	Bonds	Rings	Groups
$\text{H}^-$ $\text{F}^-$ $\text{CN}^-$ 	$\text{He}$	$\text{H}\equiv\text{H}$ $\text{H}-\text{H}$		 $\text{BrCH}_3$

# Alkalne veze

Alkali bonds	
	↑ 1
LiB	←
Li	
Na	
K	
Rb	
Cs	
Fr	



# Zemnoalkalne veze

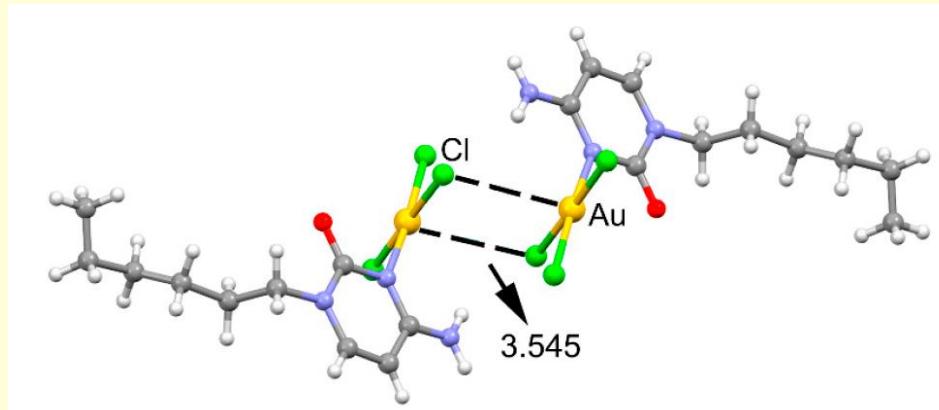
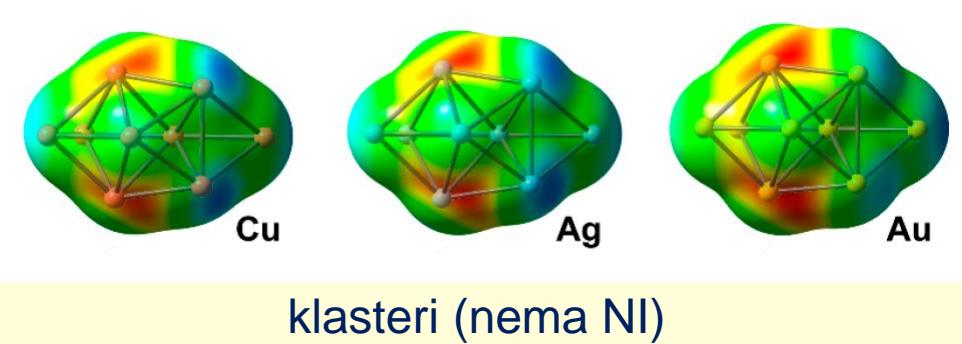


# Regijumske veze

Regium bonds



Ni	Cu
Pd	Ag
Pt	Au
Ds	Rg



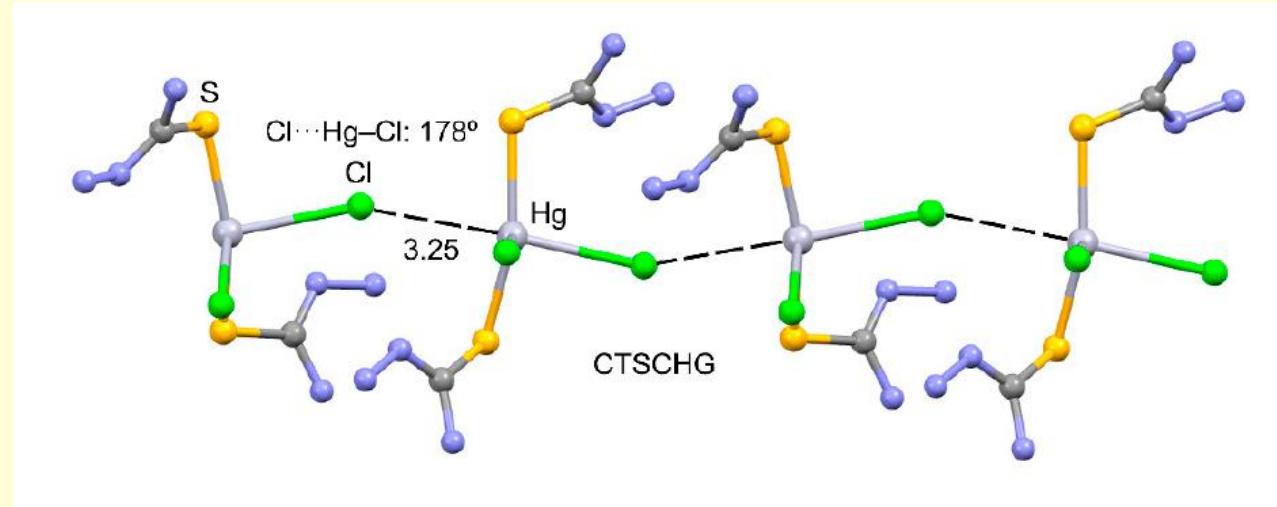
trihloro-(1-heksilcitozin)srebro(III) kompleks

# Spodiumske veze

12	Zn
	Cd
	Hg
	Cn

↓

Spodium bonds



ZnO – spodium (lat)

Hg-Cl veza:

- zbir van der Valsovih radijusa: 3,30 Å
- dužina Hg...Cl veze: 3,25 Å
- zbir kovalentnih radijusa: 2,39 Å

# 3-9. grupe periodnog sistema

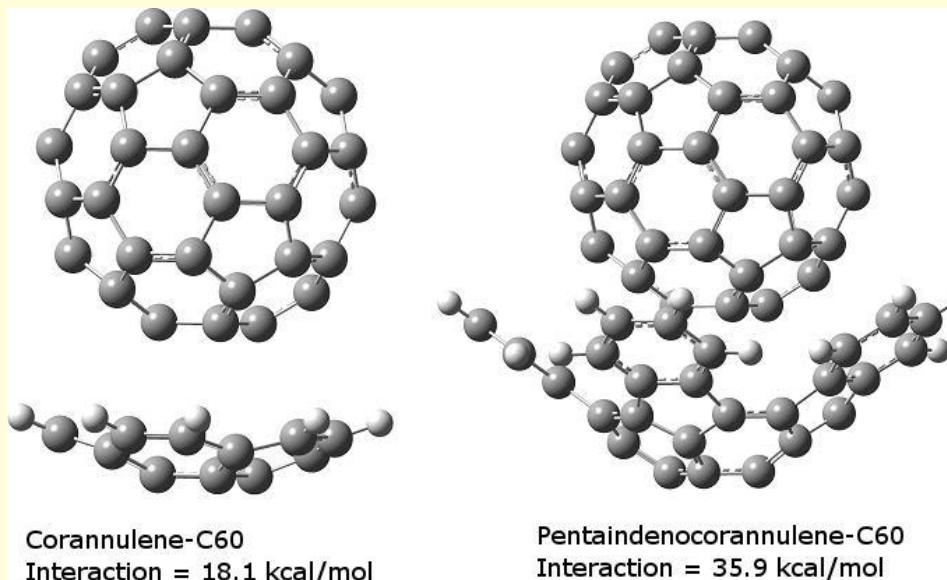
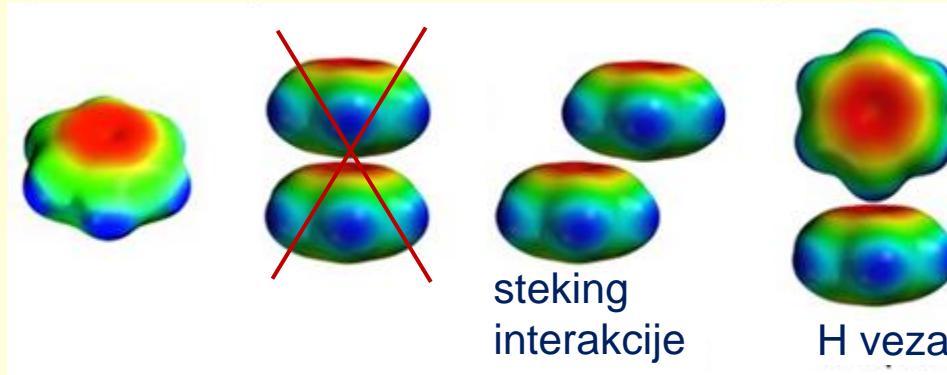
---

	3	4	5	6	7	8	9
	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co
	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh
	Lan	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir
	Act	Rf	Db	Sg	Bh	Hs	Mt

Jezgro zaklonjeno unutrašnjim elektronima → nema  $\sigma$  šupljine  
i zanemarljiva je polarizacija atoma

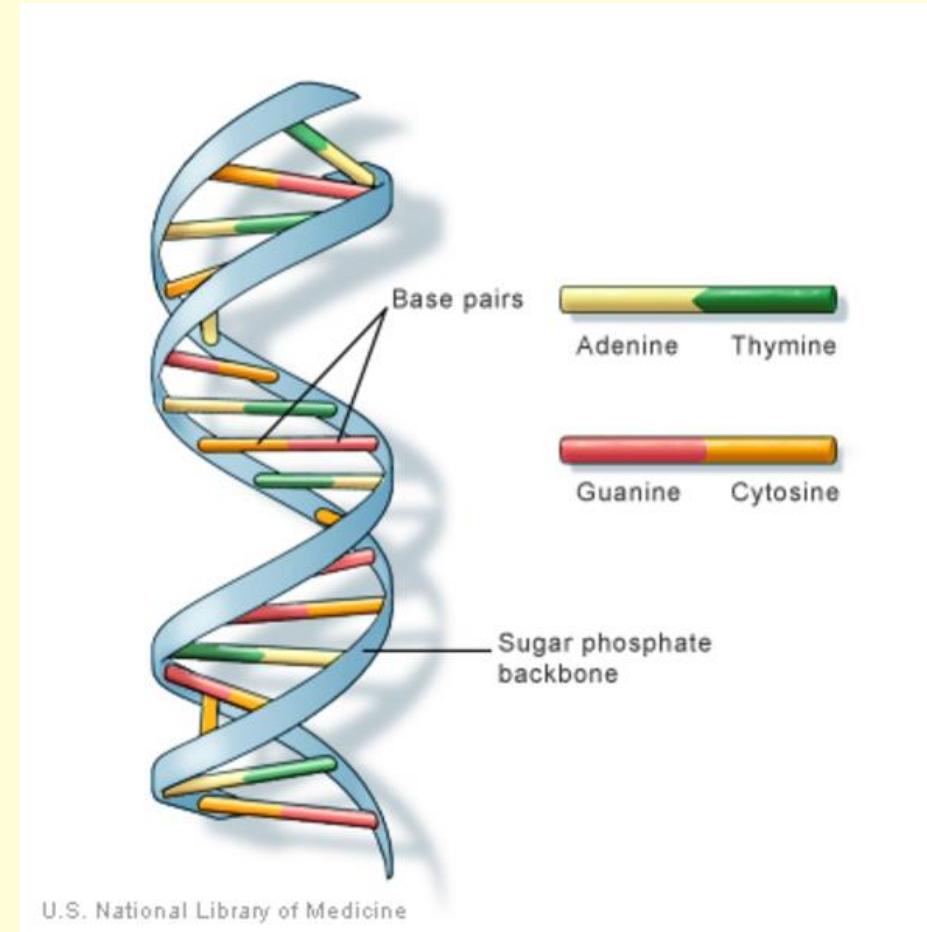
# Steking interakcije

---

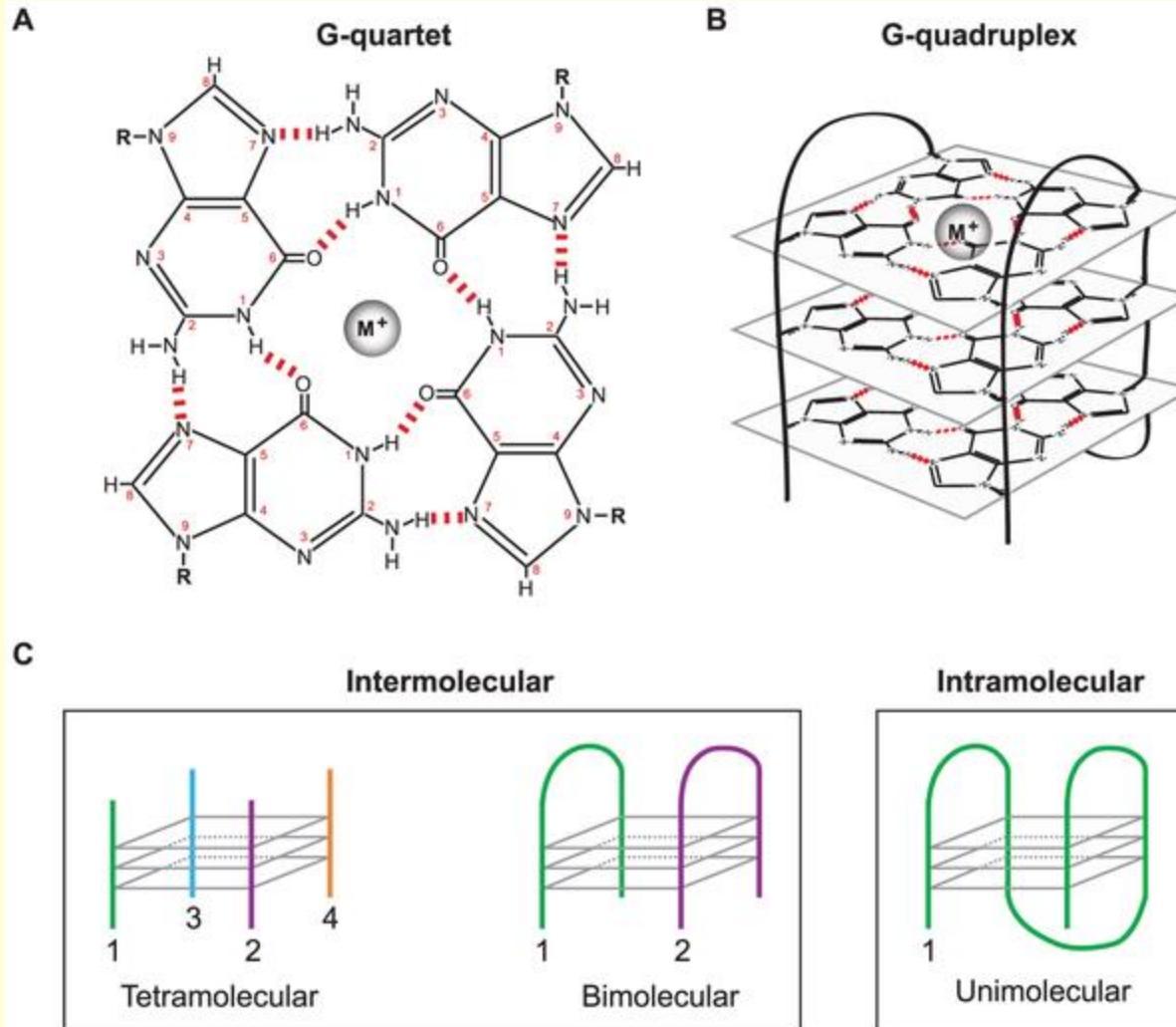


# Primer: DNK

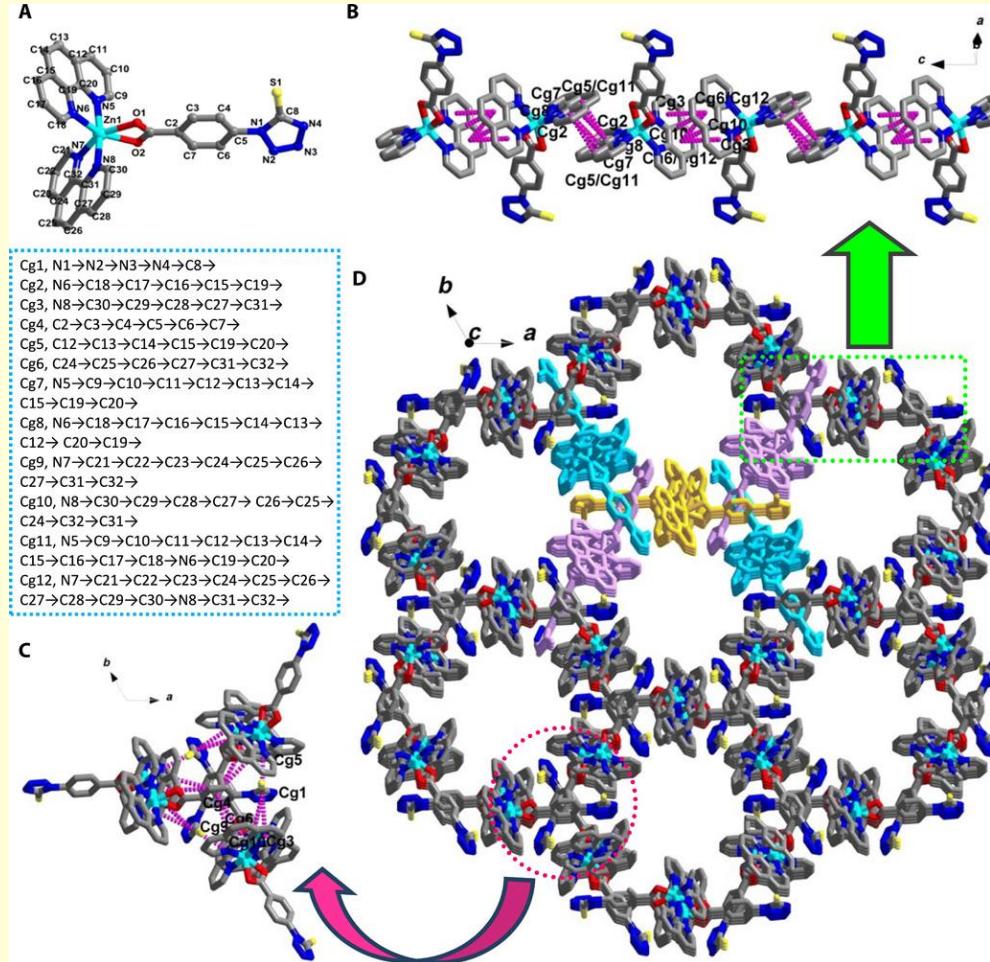
---



# Primer: kvadrupleks guanina

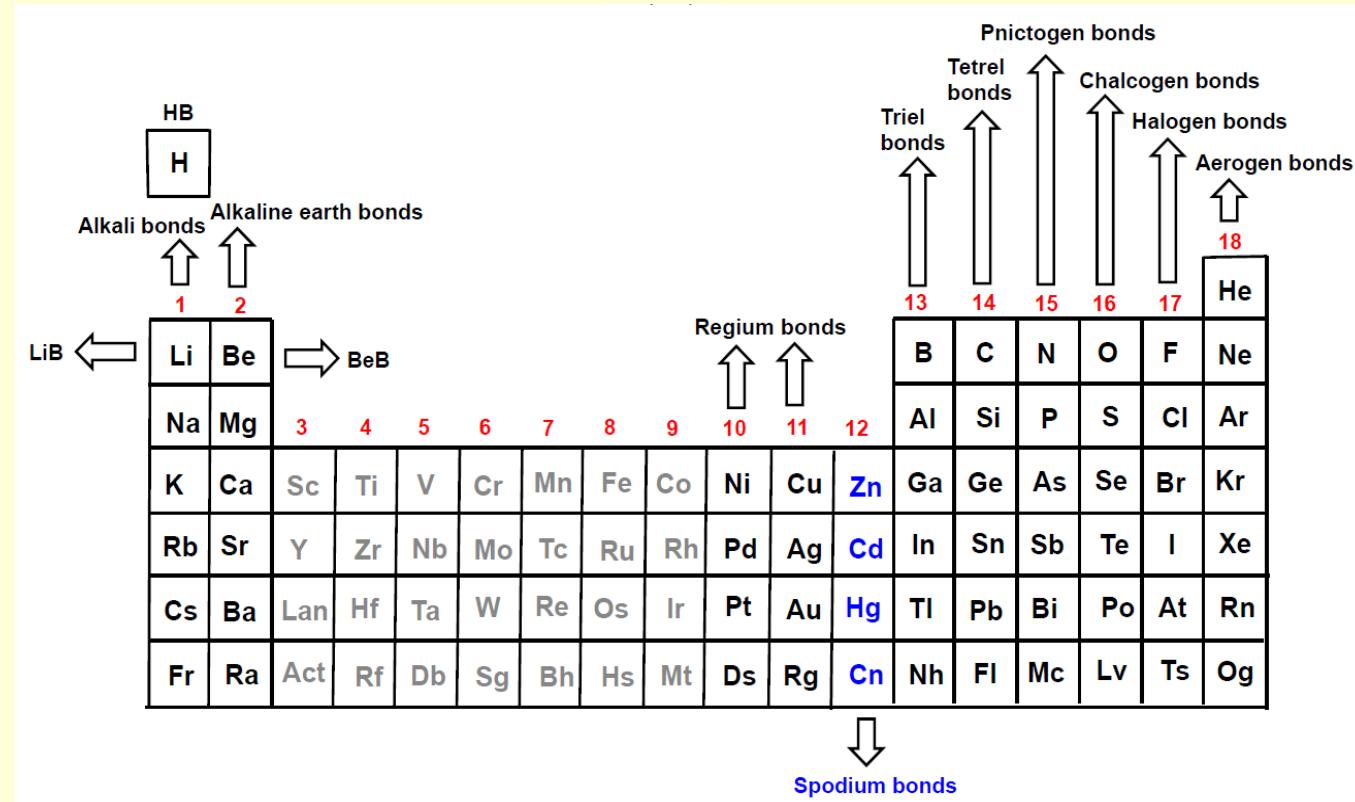


# Primer: porozne supramolekulske strukture



Deng et al. *Sci. Adv.* 6, 2020, eaax9976

# Rezime



## ➤ steking interakcije