

# Jake međumolekulske interakcije – prema kovalentnoj vezi

**Kemijski seminar I**

**Petra Stanić**



Poslijediplomski sveučilišni studij Anorganska i strukturna kemija

14. travnja 2021.

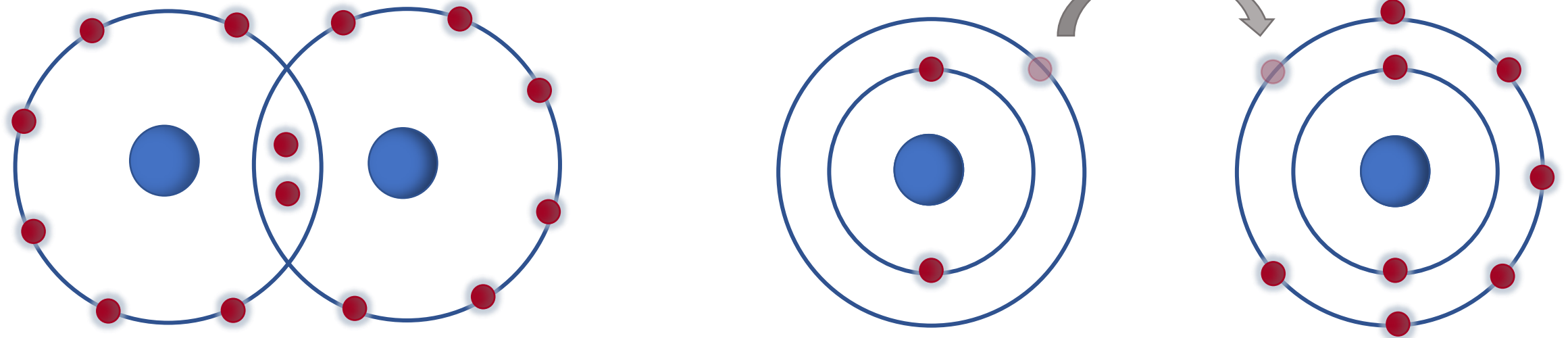
**Gutam R. Desiraju** : „Supramolecular chemistry has grown in importance because it goes beyond the molecule — the focus of classical chemistry. It also offers a fresh interface with biological and materials science.”



KEMIJSKE VEZE  
VS.  
MEĐUMOLEKULSKE INTERAKCIJE

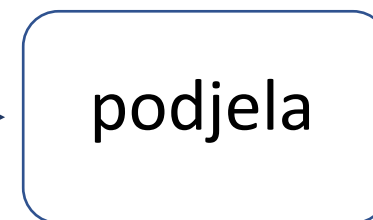
# KEMIJSKA VEZA

Kovalentna ili ionska veza?



- interakcija elektronskih gustoća

# MEĐUMOLEKULSKE INTERAKCIJE



izotropne

anizotropne

## IZOTROPNE

- neusmjerene
- gusto pakiranje

van der Waalsove sile  
ionske interakcije  
elektrostatske interakcije

## ANIZOTROPNE

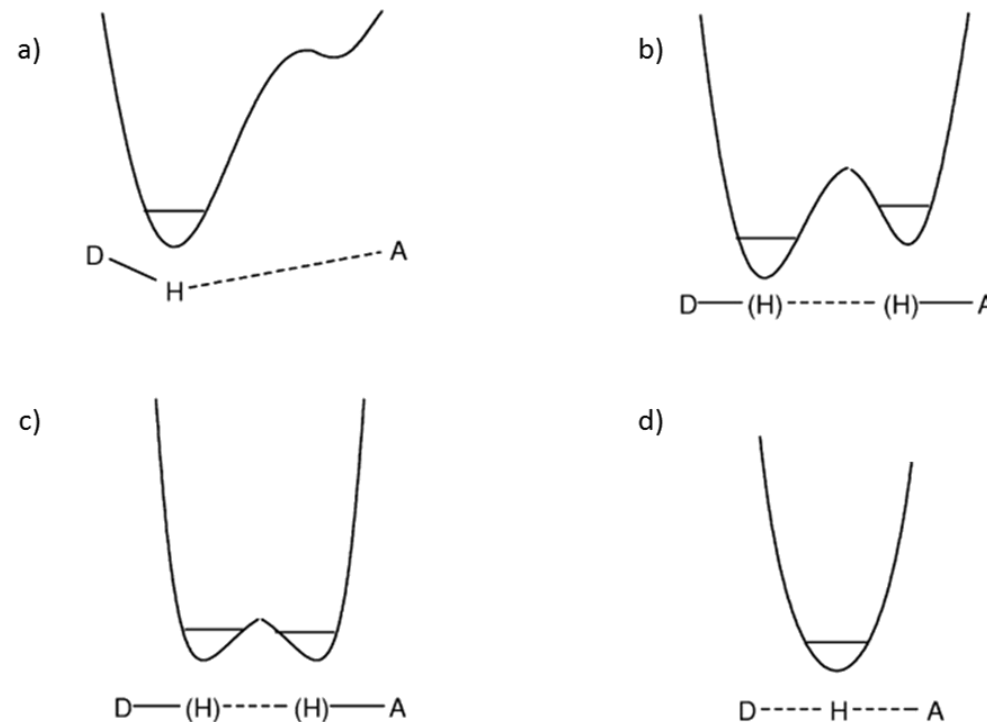
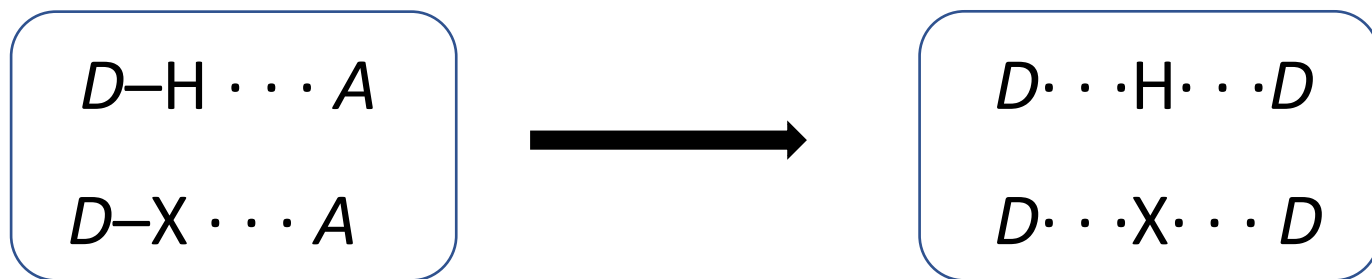
- usmjerene
- definirana geometrija

vodikova veza  
halogenska veza

Interakcija	E/kJ mol <sup>-1</sup>	Interakcija	E/kJ mol <sup>-1</sup>
ionska veza	400 – 4000	halogenska veza	5 – 150
kovalentna veza	150 – 1100	dipol-dipol	5 – 25
metalna veza	75 – 1000	ion-inducirani dipol	3 – 15
ion-dipol	40 – 600	dipol-inducirani dipol	2 – 10
vodikova veza	5 – 200	disperzijske sile	0,05 – 40

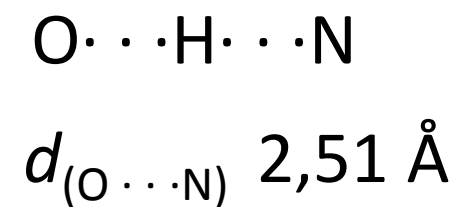
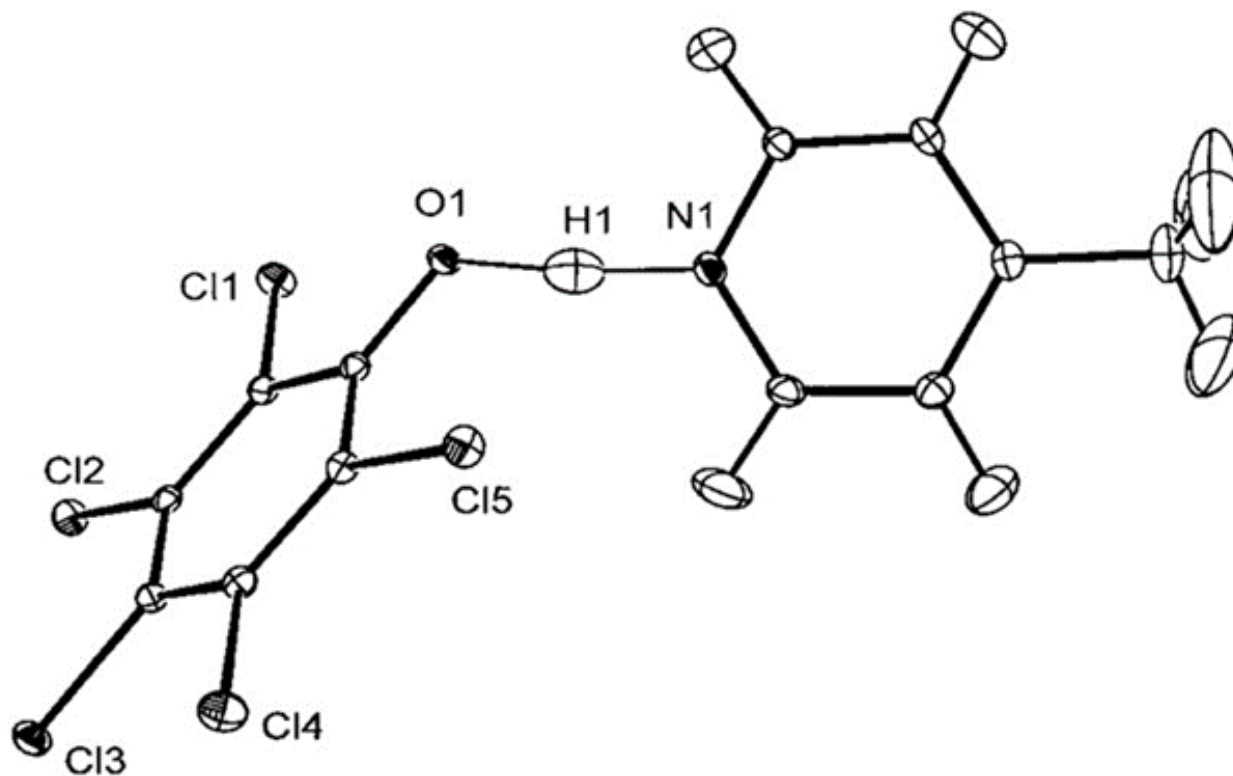
# Vodikova i halogenska veza

- širok raspon energija → raznolika priroda veze
- donorsko-akceptorske interakcije
- najjači tip interakcije – kratke, simetrične, linearne



# Jaka vodikova veza

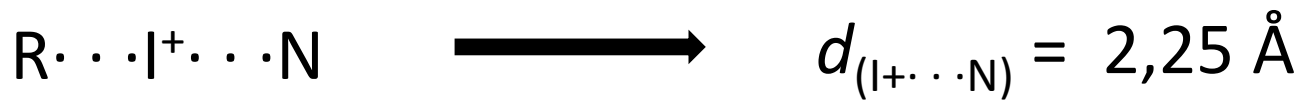
- u kristalnim strukturama  $O \cdots H \cdots O \longrightarrow d_{(O \cdots O)} < 2,5 \text{ \AA}$



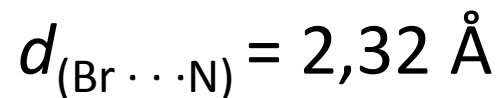


# Jaka halogenska veza

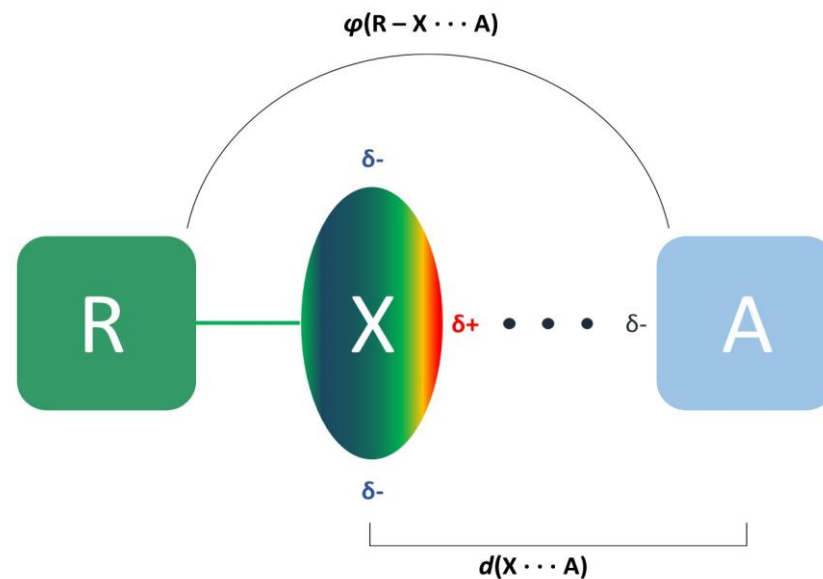
- jačina veze ovisi o izboru donora i akceptora
- N → najbolji akceptor



R. Puttreddy, O. Jurček, S. Bhowmik, T. Mäkelä, K. Rissanen, *Chem. Commun.* **52** (2016) 2338–2341.

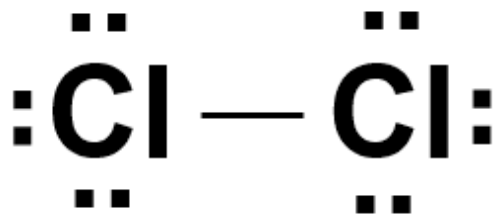


M. Eraković, D. Cinčić, K. Molčanov, V. Stilinović, *Angew. Chem. Int. Ed.* **58** (2019) 15702–15706



# KOVALENTNA VEZA

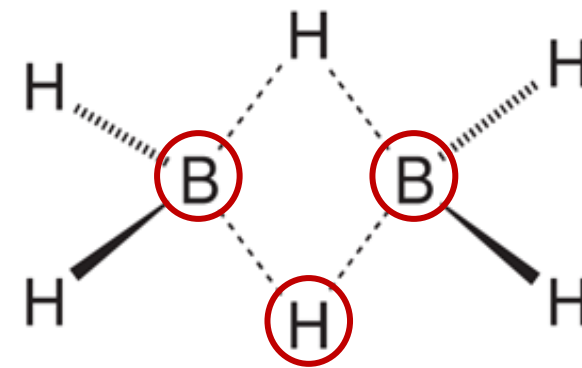
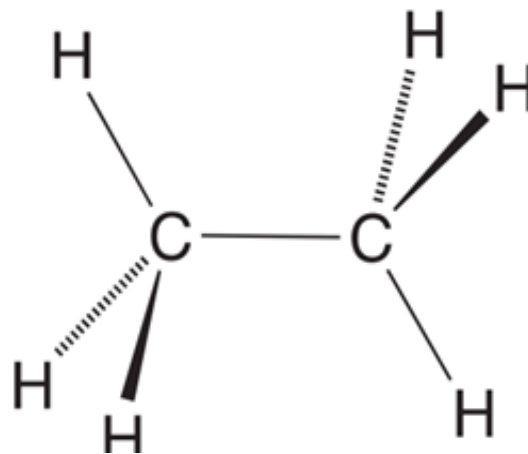
2c-2e



# MULTICENTRIČNA VEZA

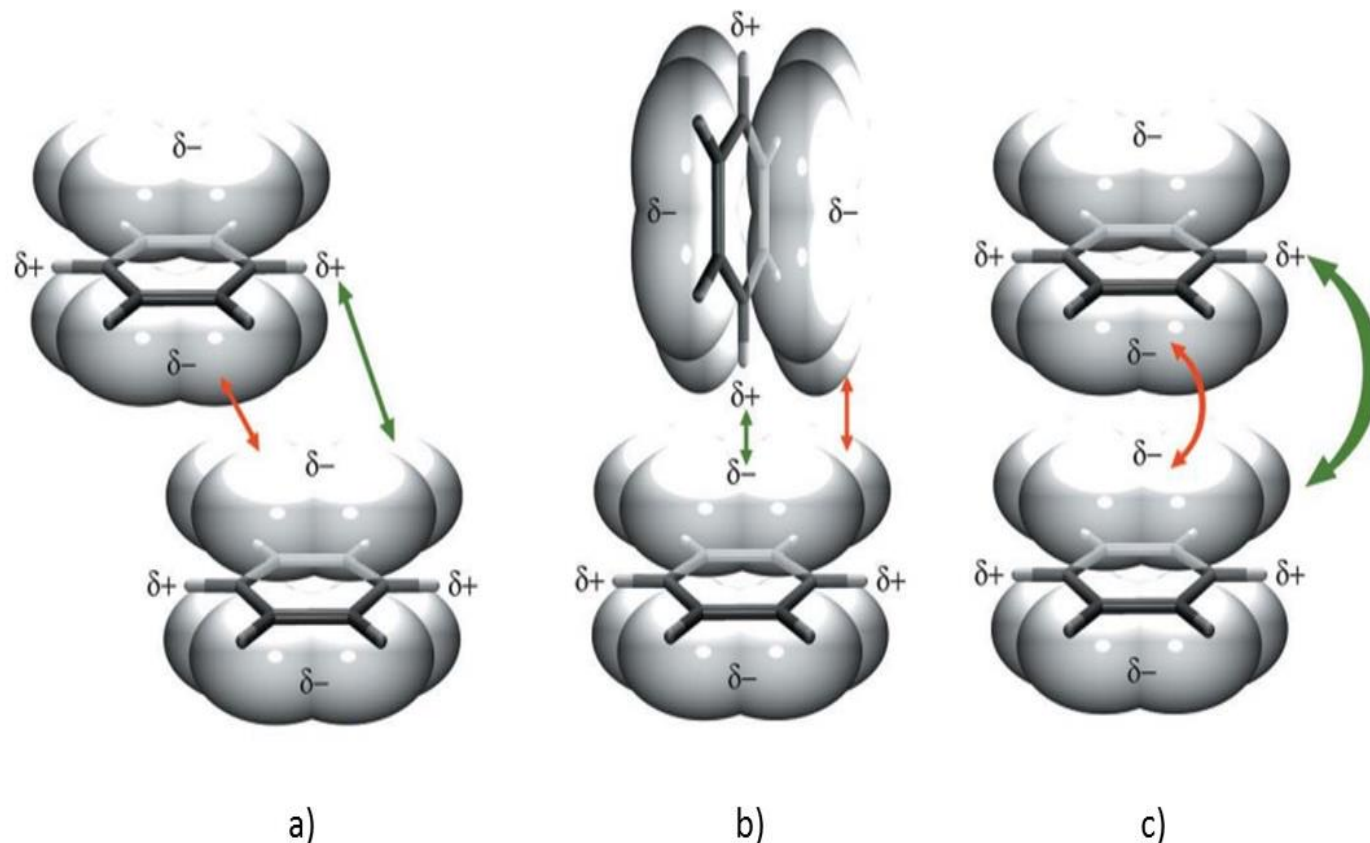
DIBORAN

3c-2e  
B-H-B



# $\pi$ -interakcije

- uglavnom slabe interakcije  
→ 1 kcal mol<sup>-1</sup>
- između aromatskih prstenova i aromatskih prstenova i nearomatskih partnera

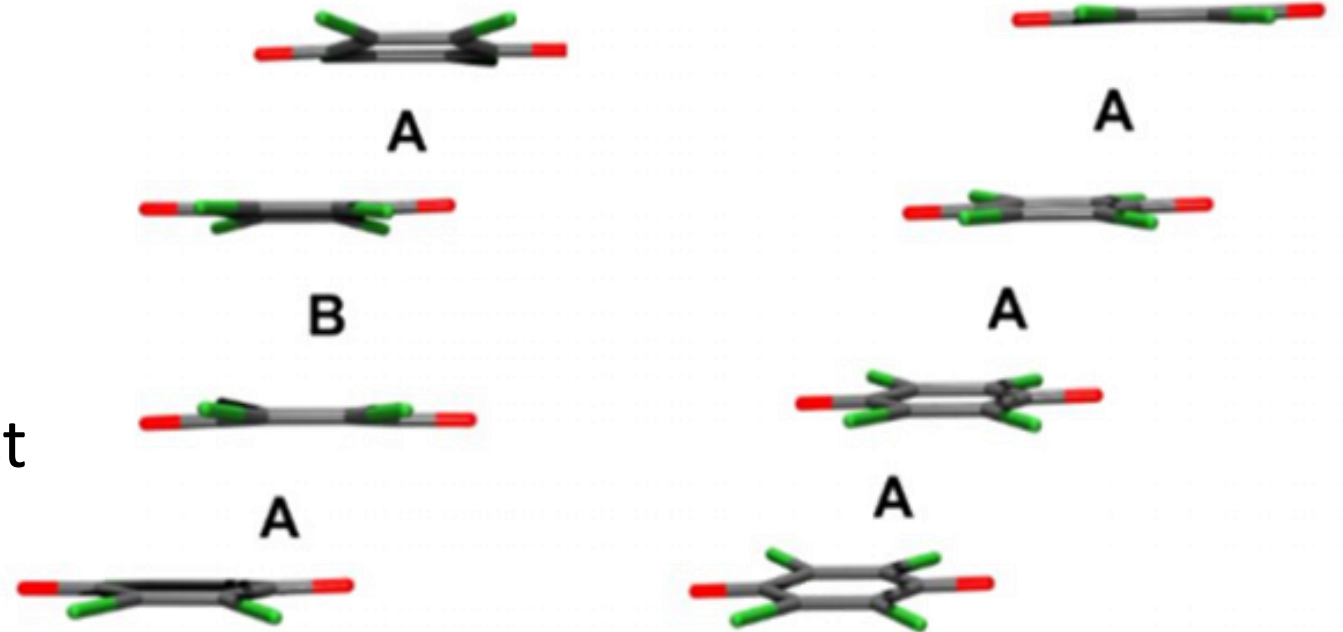


→ (a) paralelni i smaknuti , (b) „T“ oblik, (c) slaganje „licem u lice“

# Palačinka veze

- najjače  $\pi$ -interakcije  $\rightarrow$  između planarnih radikala  
(  $E = 8 - 20 \text{ kcal mol}^{-1}$  )

- slaganje radikala u stupce
- magnetska svojstva, vodljivost



# ZAKLJUČAK

- iznenađujuća snaga međumolekulskih interakcija
- sličnost jakih  $\pi$ -interakcija s jakim anizotropnim međumolekulskim interakcijama  $\rightarrow$  jačina i karakter
- jake međumolekulske interakcije pomiču definiciju kemijske veze

**Hvala na pažnji!**