

Апстракт предавања:

Примарна тежња модерних хемијских истраживања је проширење знања која се тичу својстава једног молекула и примене тих особина за постизање жељене функције. Електронска структура молекула примарно одређује све његове особине. У случају комплекса прелазних метала, електронска структура зависи од броја, геометрије и карактера мезал-лиганд веза [1]. Потребно је разумети велики број могућих утицаја, као што су утицај координационог броја, симетрије, јачине лигандног поља, спин-орбиталне спреге, спинског и оксидационог стања, редокс потенцијала, локализације наелектрисања и спина, електронске дегенерације, итд. [1-3]. Коначно, потпуно разумевање електронске структура комплекса захтева истраживања која превазилазе само основна електронска стања, тј. разматрање и ексцитованих стања [4]. У овом предавању ће бити представљени наши напори у разумевању и контроли метал-лиганд веза на основу прорачуна заснованих на теорији функционалне густине (DFT). Поред тога, биће приказан низ примера који показују како се експериментални резултати и особине координационих једињења могу рационализовати коришћењем DFT прорачуна.

Аутор се захваљује на подршци Фонду за науку Републике Србије, #7750288, Tailoring Molecular Magnets and Catalysts Based on Transition Metal Complexes – TMMagCat.

Референце:

[1] M. Zlatar, M. Gruden in Practical Approaches to Biological Inorganic Chemistry, 2nd Edition, 17 (2020).

[2] M. Gruden, M. Zlatar, Theoretical Chemistry Accounts, 139, 7, 126 (2020).

[3] C. Daul, M. Zlatar, M. Gruden-Pavlović, M. Swart in Spin states in biochemistry and inorganic chemistry: influence on structure and reactivity, 7 (2016).

[4] M. Zlatar, M. Allan, J. Fedor, J. Phys. Chem. C, 120 10667 (2016).