



Zagreb, 8. siječnja 2019.

## Znanstvenici s Kemijskoga odsjeka PMF-a SuZ u suradnji s kolegama sa Sveučilišta McGill i Sveučilišta Birmingham otkrili nove akceptore halogenske veze i 'pomaknuli' granice supramolekulske kemije

Znanstvenici s Kemijskoga odsjeka Prirodoslovno-matematičkoga fakulteta Sveučilišta u Zagrebu **Katarina Lisac** i **Dominik Činčić** te studentica **Sara Cepić**, u suradnji s **Tomislavom Friščićem**, **Filipom Topićem**, **Mihailom Arhangeliskisom**, **Patrickom A. Julienom**, **Christopherom W. Nickelsom** sa Sveučilišta McGill (Montreal, Kanada) i **Andrewom J. Morrisom** sa Sveučilišta Birmingham (Birmingham, Ujedinjeno Kraljevstvo) **otkrili su nove akceptore halogenske veze te objavili rad *Halogen-bonded cocrystallization with phosphorus, arsenic and antimony acceptors* u vrhunskom časopisu *Nature Communications*.**

U radu se opisuju nove spoznaje ne samo o halogenskoj vezi nego i o supramolekularnoj kemiji općenito, uvode se nova tri elementa kao komponente u kokristalima temeljenima na halogenskim vezama te se 'pomiču' granice supramolekulske kemije arsena i antimona.

Riječ je o znanstvenom radu u kojem su objavljeni **znanstveni rezultati iz područja supramolekulske kemije, postignuti istraživanjem u okviru nekoliko znanstvenih projekata: *Kristalno inženjerstvo višekomponentnih metaloorganskih materijala povezanih halogenskom vezom: ususret supramolekulskom ugađanju strukture i svojstava (IP-2014-09-7367)***, koji financira Hrvatska zaklada za znanost, te *NSERC (RGPIN-2017-06467)* i *E. W. R. Steacie Memorial Fellowship (SMFSU 507347-17)*.

Halogenska veza intenzivno se proučava posljednjih nekoliko desetljeća u svim područjima kemije, a ponajviše u kristalnom inženjerstvu. Riječ je o privlačnoj interakciji koja se ostvaruje između elektrofilnoga dijela atoma halogena (donora halogenske veze) i nukleofilnoga područja druge (ili iste) molekule (akceptora halogenske veze). U posljednjih dvadesetak godina za istraživanje halogenskih veza najčešće su se primjenjivali organski sustavi s perfluoriranim spojevima kao donorima halogenske veze, a najčešće korišteni akceptori halogenskih veza bili su brojni organski spojevi koji sadrže različite funkcijske skupine s dušikom ili kisikom. Skupine s težim atomima kao akceptorima halogenske veze rjeđe su se izučavale, a uključuju najviše spojeve sa sumporom te halogenim elementima.

U radu *Halogen-bonded cocrystallization with phosphorus, arsenic and antimony acceptors* prvi je put opisano eksperimentalno i teorijsko izučavanje halogenskih veza s fosforom, arsenom i antimonom. Kokristalizacijom 1,3,5-trijodtrifluorbenzena s trifenilfosfinom, trifenilarsinom i trifenilstibinom dobiveni su kokristali u kojima su molekule povezane halogenskim vezama I...P, I...As i I...Sb. Riječ je o prvim izoliranim i strukturno karakteriziranim kokristalima u kojima atom joda tvori halogensku vezu s elementima 15. skupine, koji su teži od dušika. Za procjenu otkrivenih halogenskih

veza, kao i za objašnjenje nepostojanja kokristala 1,3,5-trijodtrifluorbenzena s trifenilaminom te trifenilbizmutinom, u radu je opisano teorijsko izučavanje metodom DFT pretpostavljenih molekulskih kompleksa u plinskoj fazi kao i kompleksa nađenih u kristalnim strukturama. Analiza dobivenih molekulskih i kristalnih struktura kokristala, zajedno s teorijskim izučavanjem, pokazala je da su fosfor, arsen i antimon relativno dobri akceptori halogenske veze. Udaljenosti I · · · E (E = P, As, Sb) u rasponu su od 3,31 Å do 3,57 Å, što je 11 % do 12 % kraće od sume van der Waalsovih radijusa, a računane energije interakcije u rasponu su od 12 do 17 kJ/mol.

Za daljnje informacije o ovom velikom postignuću istraživača s Kemijskoga odsjeka Prirodoslovno-matematičkoga fakulteta Sveučilišta u Zagrebu ljubazno molim da se javite prof. dr. sc. Dominiku Cinčiću (mob. 091 5699 564, e-mail: [dominik@chem.pmf.hr](mailto:dominik@chem.pmf.hr)).

Unaprijed zahvaljujem što ćete javnost izvijestiti o ovom velikom postignuću istraživača Sveučilišta u Zagrebu.

S poštovanjem,

dr. sc. Tamara Dagen  
mob. 099 4564 443