

# Putovanje kroz koordinacionu hemiju - razumevanje metal-ligand veza

**Matija Zlatar**

Univerzitet u Beogradu – Institut za hemiju, tehnologiju i metalurgiju,  
Njegoševa 12, Beograd

Primarna težnja modernih hemijskih istraživanja je proširenje znanja koja se tiču svojstava jednog molekula i primene tih osobina za postizanje željene funkcije. Elektronska struktura molekula primarno određuje sve njegove osobine. U slučaju kompleksa prelaznih metala, elektronska struktura zavisi od broja, geometrije i karaktera metal-ligand veza [1]. Potrebno je razumeti veliki broj mogućih uticaja, kao što su uticaj koordinacionog broja, simetrije, jačine ligandnog polja, spin-orbitalne sprege, spinskog i oksidacionog stanja, redoks potencijala, lokalizacije naelektrisanja i spina, elektronske degeneracije, itd. [1-3]. Konačno, potpuno razumevanje elektronske struktura kompleksa zahteva istraživanja koja prevazilaze samo osnovna elektronska stanja, tj. razmatranje i ekscitovanih stanja [4]. U ovom predavanju će biti predstavljeni naši napori u razumevanju i kontroli metal-ligand veza na osnovu proračuna zasnovanih na teoriji funkcionalne gustine (DFT). Pored toga, biće prikazan niz primera koji pokazuju kako se eksperimentalni rezultati i osobine koordinacionih jedinjenja mogu racionalizovati korišćenjem DFT proračuna.

*Autor se zahvaljuje na podršci Fondu za nauku Republike Srbije, #7750288, Tailoring Molecular Magnets and Catalysts Based on Transition Metal Complexes – TMMagCat.*

## Reference:

- [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).