

**NASTAVNO-NAUČNOM VEĆU
HEMIJSKOG FAKULTETA
UNIVERZITETA U BEOGRADU**

DEKANU HEMIJSKOG FAKULTETA

Na sednici Nastavno-naučnog veća Hemjskog fakulteta u Beogradu, održanoj 16. juna 2011. izabrani smo za Komisiju za pregled i ocenu doktorske disertacije mr Gorana V. Janjića, diplomiranog hemičara, prijavljene pod nazivom:

**„KRISTALOGRAFSKO I KVANTNO-HEMIJSKO ISPITIVANJE
INTERAKCIJA C₆-AROMATIČNIH PRSTENOVA. ANALIZA INTERAKCIJA
PARALELNO ORIJENTISANIH MOLEKULA NA VELIKIM
HORIZONTALNIM POMERANJIMA“**

Pošto smo pregledali disertaciju podnosimo sledeći

I Z V E Š T A J

A. PRIKAZ SADRŽAJA DISERTACIJE

Doktorska disertacija sadrži 143 strane (+ 9 starana) kucanog teksta u kome se nalaze 92 slike i 40 tabela. Rad sadrži sledeća poglavlja:

- IZVOD (1 strana),
- ABSTRACT (1 strana),
- Koncept Vodonične veze (19 strana),
- Koncept Aromatičnih interakcija (35 strana),
- Interakcije molekula vode i aril grupa sa međusobno paralelnom orijentacijom (37 strana),

- Interakcije molekula vode i fenil grupe u kristalnim strukturama (17 strana),
- Interakcije između molekula benzena sa međusobno paralelnom orijentacijom (11 strana),
- Zaključak (4 strane),
- Literatura (11 strane),
- Biografija (9 strana).

U poglavlju pod nazivom **Koncept Vodonične veze** dat je kratak istorijski uvid u nomenklaturu vodoničnih veza, kao i najnoviju definiciju vodonične veze. Navedena je i lista kriterijuma korisnih kao dokaz postojanja vodonične veze, sa osvrtom na neke njene osobine.

U delu pod nazivom **Koncept Aromatičnih interakcija** opisani su fenomeni koji su u vezi sa aromatičnim prstenovima, a javljaju se u hemijskim i biološkim sistemima. Ovde su sumirani rezultati dobijeni pretragom baza podataka; Kembričke kristalografske banke podataka (Cambridge Structural Database, skraćeno CSD) i Proteinske banke podataka (Proteina Data Bank, skraćeno PDB), kao i rezultati najnovijih teorijskih studija. Posebna pažnja usmerena je na aren-aren interakcije i vodonične veze π -sistema sa molekulom vode (OH/ π , CH/O i Paralelne interakcije).

U poglavlju u kojem su opisane **Interakcije molekula vode i aril grupa sa međusobno paralelnom orijentacijom** prikazani su rezultati kristalografske analize podataka, dobijenih pretragom Kembričke kristalografske banke podataka (CSD-a), kao i rezultati kvantno-mehaničkih proračuna za procenu jačine i prirode ovih interakcija, urađeni na model sistemima voda-benzen dimera sa međusobno paralelnom orijentacijom.

U delu pod nazivom **Interakcije molekula vode i fenil grupe u kristalnim strukturama** prikazani su rezultati ispitivanja orijentacija molekula vode u odnosu na fenil grupu, zasnovano na statističkoj analizi podataka, dobijenih pretraživanjem Kembričke kristalografske banke podataka (CSD) i Proteinske banke podataka (PDB), kao i rezultati *ab initio* proračunima energije, za nekoliko različitih model sistema voda-benzen dimera, sa ciljem određivanja zastupljenosti paralelnih interakcija i poređenja sa OH/ π i CH/O interakcijama.

U poglavlju pod nazivom **Interakcije između molekula benzena sa međusobno paralelnom orijentacijom** predstavljeni su rezultati ispitivanja interakcija zasnovanih na

geometrijskoj analizi kristalografskih podataka, dobijenih pretraživanjem Kembričke kristalografske banke podataka (CSD) i Proteinske banke podataka (PDB) i *ab initio* proračunima energije, za nekoliko različitih geometrija dimera benzena, sa paralelnom orijentacijom

B. KRATAK OPIS POSTIGNUTIH REZULTATA

U okviru doktorske disertacije kandidat je analizirao interakcije aromatičnih molekula, sa paralelnom orijentacijom interagujućih vrsta, zasnovanih na podacima dobijenih pretragom baza podataka (Kembričke kristalografske banke podataka i Proteinske banke podataka), kao i rezultati kvantno-mehaničkih proračuna, korišćenih za procenu jačine i prirode ovih interakcija. Ispitivana je i korelacija energije interakcije sa geometrijom, odnosno orijentacijom molekula (jona) u realnim sistemima.

Analizom kristalnih struktura, arhiviranih u Kembričkoj kristalografskoj banci podataka (CSD) utvrđeno je da postoji značajan broj interakcija između molekula vode i aromatične C₆-aril grupe, kod kojih je bar jedna O-H grupa vode paralelna sa ravni aril grupe. Pretragom CSD-a pronađeno je veći broj kontakata koji imaju samo jednu O-H grupu paralelnu sa ravni aromatičnog prstena (B set) od kontakata gde je ceo molekul vode paralelan sa ravni prstena (A set). Statistička analiza kristalografskih podataka pokazala je da, nezavisno od toga kom setu pripadaju, paralelne O-H grupe vode teže da budu izvan prstena, na normalnom rastojanju od 2.0–4.0 Å. Kod oba seta struktura javlja se i trend smanjenja normalnih rastojanja sa povećanjem ofset vrednosti. Rezultati kristalografske analize pokazali su dobra slaganja sa rezultatima proračuna urađenim na model sistemima voda-benzen dimera. Proračuni pokazuju da su orijentacije u kojima je samo jedna O-H grupa vode paralelna sa ravni benzenovog prstena, nešto stabilnije i da su energetski povoljniji položaji O-H grupe izvan nego iznad benzenovog prstena.

Analizirana je i zastupljenost pojedinih interakcija između molekula vode i fenil grupe (OH/ π , CH/O i paralelne interakcije) u kristalnim strukturama, korišćenjem podataka dobijenih pretragom Kembričke kristalografske banke podataka (CSD) i upoređeni su sa rezultatima dobijenih pretragom Proteinske banke podataka (PDB), za interakcije molekula vode i fenil grupe fenil-alaninskog ostatka (Phe). Najveći broj

kontakata ima O-H grupu vode usmerenu ka prstena i ona je najčešće paralelno orijentisani u odnosu na ravan prstena. Broj kontakata koji zadovoljavaju kriterijume za OH/ π interakcije je najmanji. I pored toga što su CH/O interakcije (-1,41 kcal/mol) slabije od OH/ π interakcije (-3,19 kcal/mol), kontakti sa CH/O interakcijama su brojniji u kristalnim strukturama. Proračunima za procenu energije pokazano je paralelna orijentacija nešto jača (-2,45 kcal/mol) od CH/O interakcija ali isto toliko slabija od OH/ π interakcija. Međutim, iako su slabije, interesantno je da se ove interakcije javljaju češće od OH/ π interakcija, ali ređe od CH/O interakcija, od kojih su jače. Pored pomenutih OH/ π , CH/O i paralelnih interakcija, postoji iznenađujuće veliki broj kontakata, koji geometrijski ne odgovara niti jednom od prethodno navedenih interakcija a nalaze se u blizini prstena. Proračunima energije pokazano je da je energija ovih kontakata uglavnom manja od -1,0 kcal/mol. Vizuelnom analizom kontakata utvrđeno je da kristalno pakovanje igra veoma važnu ulogu u zastupljenosti pojedinih vrsta interakcija molekula vode sa fenil grupom. Kako u kristalnim strukturama proteina, položaji vodonikovih atoma vode nisu određeni, statistička analiza kontakata, dobijena pretragom PDB-a, zasnovana je na kiseonikovom atomu vode, dok je fenil grupa deo fenilalaninskog ostatka. Analizom ovih podataka, pokazano je da postoji jako sličan trend u kristalnim strukturama proteina i kristalnih strukturama arhiviranim u Kembričkoj kristalografskoj banci podataka.

Ranija ispitivanja interakcija molekula benzena sa paralelnom orijentacijom bazirana su uglavnom na rezultatima *ab initio* prorača energije na model sistema dimera benzena kod kojih se javljaju steking interakcije. Geometrijskoj analiza benzen-benzen kontakata, zasnovano je na podacima dobijenih pretragom Kembričke kristalografske banke podataka (CSD) i Proteinske banke podataka (PDB), pokazala je neočekivano veliki broj kontakata koji imaju velika horizontalna pomeranja. Utvrđeno je da većina kontakata ima vrednost ovog parametra u intervalu od 4,5 do 5,5 Å (58,0 %), dok je udeo kontakata sa ofset vrednostima u intervalu do 2,5 Å, u kojem postoji preklapanje prstenova, iznenađujuće mali, s obzirom na to da se u ovoj oblasti javljaju steking interakcije sa najstabilnijom geometrijom. Ovakvi rezultati su ipak razumljivi i posledica su uticaja okruženja u kristalnim strukturama, ali i znatnih vrednosti energija interakcije, kod kontakata sa jako smaknutim prstenovima. Proračuni energije interakcija pokazali su da

je najjača paralelna interakcija oko 2,8 kcal/mol, na offset vrednostima u intervalu od 1,5 do 2,0 Å, dok je na velikim offsetima (4,0 –5,0 Å), interakcija je još uvek značajno jaka, i iznosi oko 2,0 kcal/mol. Pretragom Proteinske Banke Podataka pokazano je da 52 % od ukupnog broja kontakata sa paralelnom orijentacijom, ima offset vrednost veću od 4,0 Å, potvrđujući tako očekivanje da su paralelne interakcije sa velikim ofsetima, jako zastupljene i u kristalnim strukturama proteina.

C. UPOREDNA ANALIZA REZULTATA KANDIDATA SA REZULATATIMA IZ LITERATURE

Sve je veće interesovanje istraživača za nekovalentne interakcije zbog njihovog uloge u strukturi, funkciji i dinamici velikog broja hemijskih sistema. One su prožete kroz sve oblasti hemije, a naročito su ispitivane u oblastima supramolekulske hemije, kristalnog inženjeringa, biohemije i hemije materijala. Proučavanja nekovalentnih interakcija imaju veliki značaj za fundamentalne nauke, ali su takođe važne u oblastima praktične primene. Kontrolom procesa, koji su odgovorni za prepoznavanje i pakovanje, mogu se dobiti materijala željenih hemijskih i fizičkih osobina.

U ovom radu stavljen je akcenat na kristalografska ispitivanja paralelnih interakcija u koje su uključeni aromatični molekuli, kao i na metode koje se koriste za procenu jačine ovih interakcija. Geometrijska analiza kontakata sa paralelnom orijentacijom, zasnovana na podacima dobijenih pretragama kristalografskih baza, pokazala je neočekivanu frekventnost kontakata koji imaju velika horizontalna pomeranja. Ovakvi rezultati posledica su uticaja okruženja u kristalnim strukturama, ali i znatnih vrednosti energija interakcije.

Rezultati predložene doktorske disertacije daju originalni naučni doprinos ispitivanju nekovalentnih interakcija i razumevanju pakovanja u kristalnim strukturama. Naši rezultati su šrvi rezultati koji su ukazali na značaj paralelnih interakcija aromatičnih prstenova sa velikim horiontalnim pomeranjima. Prikazani rezultati su valorizovani odgovarajućim naučnim publikacijama u časopisima koji su bitni za ovu naučnu oblast (na primer: Chemical Communications, Crystal Growth & Design i ChemPhysChem).

D. OBJAVLJENI I SAOPŠTENI REZULTATI KOJI ČINE DEO TEZE

Kandidat je rezultate svojih istraživanja objavio u 9 naučnih radova publikovanih u međunarodnim časopisima (7 radova u vrhunskim međunarodnim časopisima (M21)), i 45 saopštenja na domaćim i međunarodnim naučnim skupovima (PRILOG). Rezultati ove doktorske disertacije su publikovani u dva rada, koja su objavljena u vrhunskim međunarodnim časopisima:

1. **G. V. Janjić**, D. Veljković, S. D. Zarić, *Water/Aromatic Parallel Alignment Interactions. Significant 2 Interactions at Large Horizontal Displacements*, Crystal Growth & Design, 2011, 11 (7), 2680-2683 (impakt faktor- 4.389).

2. D. B. Ninković, **G. V. Janjić**, D. Ž. Veljković, D. N. Sredojević, S. D. Zarić, *What Are the Preferred Horizontal Displacements in Parallel Aromatic-Aromatic Interactions? Significant Interactions at Large Displacements*, CHEMPHYSICHEM, 2011, 12 (18), 3511-3514. (impakt faktor- 3.340).

E. ZAKLJUČAK

U ovoj doktorskoj disertaciji kandidat mr Goran V. Janjić je sistematski ispitao interakcije C₆-aromatičnih prstenova, sa paralelnom orijentacijom interagujućih vrsta. Analize kristalnih struktura, arhiviranih u Kembričkoj banci kristalografskih podataka (CSD) i Proteinskoj banci podataka (PDB), ukazale su na izuzetan značaj paralelnih interakcija između dve aromatične grupe i između aromatičnih grupa i molekula vode. Posebno pažnja je usmerena na korelaciju izračunate energije interakcije sa geometrijom, odnosno orijentacijom molekula u realnim sistemima, dobijenom analizom kristalnih struktura. Kristalografska analiza pokazala je i neočekivanu brojnost kontakata koji imaju velika horizontalna pomeranja, a koja su posledica ne samo uticaja okruženja u kristalnim strukturama, nego i znatnih vrednosti energija interakcije. Naši rezultati su prvi rezultati koji su ukazali na značaj paralelnih interakcija aroamtičnih prstenova sa velikim horizontalnim pomeranjem.

Kandidat je u doktorskoj disertaciji citirao četiri od devet svojih radova. Pored toga, kandidat ima 45 naučnih saopštenja, od toga 24 saopštenje na skupovima međunarodnog značaja i 21 saopštenje na domaćim skupovima. Na osnovu svega izloženog, Komisija je mišljenja da kandidat mr Goran Janjić, dipl. hemičar, ispunjava sve uslove za odbranu doktorske disertacije za sticanje akademskog zvanja DOKTOR HEMIJSKIH NAUKA.

Svi elementi izloženi u ovom Izveštaju, Komisiji daju za pravo da predloži Naučno-nastavnom veću Hemijskog fakulteta da podneti rad kandidata mr Gorana V. Janjića, dipl. hemičara pod naslovom: **„KRISTALOGRAFSKO I KVANTNO-HEMIJSKO ISPITIVANJE INTERAKCIJA C₆-AROMATIČNIH PRSTENOVA. ANALIZA INTERAKCIJA PARALELNO ORIJENTISANIH MOLEKULA NA VELIKIM HORIZONTALNIM POMERANJIMA“** prihvati kao doktorsku tezu za sticanje akademskog stepena doktora hemijskih nauka u naučnoj oblasti teorijska hemija, kao naučno opravdane.

ČLANOVI KOMISIJE:

Mentor:

dr Snežana Zarić, redovni profesor
Hemijskog fakulteta, Univerziteta u Beogradu

Komisija:

dr Ljiljana Došen-Mićović, redovni profesor
Hemijskog fakulteta, Univerziteta u Beogradu

dr Agneš Kapor, redovni profesor
PMF-a, Univerziteta u Novom Sadu

Dr Miloš Milčić, docent
Hemijskog fakulteta, Univerziteta u Beogradu

Beograd,
02. 04. 2012. godine

PRILOG:

Radovi u vrhunskim međunarodnim časopisima (M21)

1. B. D. Ostojić, **G. V. Janjić**, S. D. Zarić, *Parallel Alignment of Water and Aryl Rings-Crystallographic and Theoretical Evidence for the Interaction*, Chemical Communications, 2008, (48), 6546-6548 (impakt faktor- 5.787).
2. **G. V. Janjić**, J. M. Andrić, A. Kapor, Ž. D. Bugarčić, S. D. Zarić, *Classification of Stacking Interaction Geometries of Terpyridyl Square-Planar Complexes in Crystal Structures*, CrystEngComm, 2010, 12 (11), 3773-3779 (impakt faktor- 4.006).
3. **G. V. Janjić**, P. V. Petrović, D. B. Ninković, S. D. Zarić, *Geometries of Stacking Interactions Between Phenanthroline Ligands in Crystal Structures of Square-Planar Metal Complexes*, Journal of Molecular Modeling, 2011, 17 (8), 2083-2092 (impakt faktor- 1.871).
4. **G. V. Janjić**, D. Veljković, S. D. Zarić, *Water/Aromatic Parallel Alignment Interactions. Significant 2 Interactions at Large Horizontal Displacements*, Crystal Growth & Design, 2011, 11 (7), 2680-2683 (impakt faktor- 4.389).
5. D. Veljković, **G. V. Janjić**, S. D. Zarić, *Are C–H/O Interactions Linear? The Case of Aromatic CH Donors*, CrystEngComm, 2011, 13 (15), 5005-5010 (impakt faktor- 4.006).
6. D. B. Ninković, **G. V. Janjić**, D. Ž. Veljković, D. N. Sredojević, S. D. Zarić, *What Are the Preferred Horizontal Displacements in Parallel Aromatic-Aromatic Interactions? Significant Interactions at Large Displacements*, CHEMPHYSCHEM, 2011, 12 (18), 3511-3514. (impakt faktor- 3.340).
7. D. B. Ninković, **G. V. Janjić**, S. D. Zarić, *Crystallographic and ab Initio Study of Pyridine Stacking Interactions. Local Nature of Hydrogen Bond Effect in Stacking Interactions*, Crystal Growth & Design, 2012, 12 (3), 1060–1063 (impakt faktor- 4.389).

Radovi u međunarodnim časopisima (M23)

8. **G. V. Janjić**, M. K. Milčić, S. D. Zarić, *Intramolecular MLOH/ π and MLNH/ π Interactions in Crystal Structures of Metal Complexes*, Chemical Papers, 2009, 63(3), 298-305 (impakt faktor- 0.754).

9. **G. V. Janjić**, P. V. Petrović, D. B. Ninković, D. Ž. Veljković, A. Kapor, S. D. Zarić, *Stacking Interactions Between Pyridine Fragments in Crystal Structures of Terpyridyl Complexes*, *Studia Universitatis Babes-Bolyai Chemia*, 2010, 55 (3), 165-176 (impakt faktor- 0.231).

Saopštenje sa međunarodnog skupa štampano u celini (M33)

Usmena prezentacija:

1. **G. Janjić**, M. Milčić, S. Zarić, *Study on interactions of coordinated water with phenyl group in crystal structures of metal complexes*. Physical Chemistry 2006, Proceedings of the International Conference on Fundamental and Applied Aspects of Physical Chemistry, 8th, Belgrade, Serbia, Sept. 26-29, 2006.

Prezentacija u vidu postera:

2. **G. Janjić**, B. Ostojić, S. Zarić, *Evidence for the Existence of interactions between water molecule and aryl rings in mutual parallel alignment*, Physical Chemistry 2006, Proceedings of the International Conference on Fundamental and Applied Aspects of Physical Chemistry, 9th, Belgrade, Serbia, Sept. 24-26, 2008.

3. M. Cizler, D. Veljković, **G. Janjić**, S. Zarić, *Study of C-H $\cdots$ O interactions between coordinated water molecule and C₆- aromatic group*, 9th International Symposium on Metal Elements in Environment, Medicine and Biology, Cluj-Napoca, October, 2009.

4. **G. V. Janjić**, P. Petrović, D. Ninković, S. D. Zarić, *Stacking interactions between phenantroline ligands in crystal structures of square-planar metal*

complexes, 10th International Symposium on Metal Elements in Environment, Medicine and Biology, Timisoara, Romania, November, 2010.

5. D. Ninković, J. Dragelj, **G. V. Janjić**, S. D. Zarić, *Study of stacking interactions between coordinated pyridines in square-planar metal complexes*, 10th International Symposium on Metal Elements in Environment, Medicine and Biology, Timisoara, Romania, November, 2010.

Saopštenja sa međunarodnog skupa štampana u izvodu (M₃₄)

Prezentacija u vidu postera:

1. **G. Janjić**, A. Veličković, S. Zarić, *Theoretical study of interactions between ammin ligand and aryl group in crystal structures of metal complexes*, Supramolecular chemistry from design to applicatios, Cluj-Napoca 12-15 April 2007.

2. J. Andrić, **G. Janjić**, Z. Tomić, Z. Bugarčić, S. Zarić, *Stacking interactions between terpyridyl ligands in crystal structures of square-planar metal complexes*, Humbolt conference on noncovalent interactions, Vršac, Serbia, 15-18 nov 2007.

3. **G. Janjić**, B. Ostojić, S. Zarić, *Theoretical study of interactions between water molecule and aryl group in crystal structures*, Humbolt conference on noncovalent interactions, Vršac, Serbia, 15-18 nov 2007.

4. D. Ninković, P. Petrović, **G. Janjić**, *Stacking interaction between 1, 10-phenanthroline ligands in crystal structures of metal complexes*, Humbolt conference on noncovalent interactions, Vršac, Serbia, 15-18 nov 2007.

5. B. Ostojić, M. Milčić, **G. Janjić**, V. Medaković, S. Zarić, *Theoretical study of XH/ π hydrogen bonds in transition metal complexes*, Humbolt conference on noncovalent interactions, Vršac, Serbia, 15-18 nov 2007.

6. S. Stajić, Lj. Rusić, **G. Janjić**, *Stacking interaction of coordinated bipyridyl in crystal structures of square planar and tetrahedral metal complexes*, Humbolt conference on noncovalent interactions, Vršac, Serbia, 15-18 nov 2007.

7. I. Milovanović, M. Bukorović, **G. Janjić**, A. Kapor, *Study of stacking interactions between bipyridyl ligands in crystal structures of octahedral metal complexes*, Humbolt conference on noncovalent interactions, Vršac, Serbia, 15-18 nov 2007.

8. M. Wedel, **G. Janjić**, D. Sredojević, M. Ferbinteanu, S. Zarić and Horst Borrmann, *Significant consequences of subtle changes within two Mn(III) complexes with naften ligands*, Second Humbolt conference on noncovalent interactions, Vrsac, Serbia, October, 2009.

9. D. Sredojević, C. D. Marinescu, M. Ferbinteanu, **G. Janjić**, H. Borrmann, *Noncovalent interactions revealed from crystal structures of two Ni (II) mixed ligand complexes with demen and dibm*, Second Humbolt conference on noncovalent interactions, Vrsac, Serbia, October, 2009.

10. M. Cizler, **G. Janjić**, S. Zarić, *Interactions of coordinated water molecule with C-aromatic group*, Second Humbolt conference on noncovalent interactions, Vrsac, Serbia, October, 2009.

11. D. Veljković, **G. Janjić**, S. Zarić, *Theoretical study of C-H O interactions between water molecules and C-aromatic groups*, Second Humbolt conference on noncovalent interactions, Vrsac, Serbia, October, 2009.

12. S. Milić, **G. Janjić**, S. Zarić, *Parallel alignment of water molecule and C – aromatic rings – evidence for the interactions*, Second Humbolt conference on noncovalent interactions, Vrsac, Serbia, October, 2009.

13. **G. Janjić**, J. Andrić, A. Kapor, Ž. Bugarčić, S. Zarić, *Classification of stacking interactions geometry between terpyridyl square-planar complexes in crystal structures*, Second Humbolt conference on noncovalent interactions, Vrsac, Serbia, October, 2009.

14. **G. V. Janjić**, D. Ž. Veljković, J. M. Andrić, S. D. Zarić, *Propensity for stacking interactions of terpiridine complexes in crystal structures*, Eurobic10, Thessaloniki, Greece, June, 2010.

15. **G. V. Janjić**, D. Ž. Veljković, S. D. Zarić, *Parallel alignment of water molecule and aromatic rings at large offsets*, Fourth Humbolt conference on Computational chemistry, Varna, Bulgaria, July, 2010.

16. J. Dragelj, **G. V. Janjić**, S. D. Zarić, *Crystallographic study of interactions between mono-substituted pyridines and water molecule*, Fourth Humbolt conference on Computational chemistry, Varna, Bulgaria, July, 2010.

17. D. Malenov, **G. V. Janjić**, S. D. Zarić, *Study of π - π stacking interactions between coordinated pyridines in crystal structures*, Fourth Humbolt conference on Computational chemistry, Varna, Bulgaria, July, 2010.

18. A. Kapor, **G. V. Janjić**, J. Andrić, Ž. Bugarčić, S. D. Zarić, *Crystallographic overview of stacking interactions between terpyridyl ligands of square-planar metal complexes*, Fourth Humbolt conference on Computational chemistry, Varna, Bulgaria, July, 2010.

19. D. B. Ninković, **J. Dragelj**, G. V. Janjić, S. D. Zarić, *Study of Stacking Interactions Between Coordinated Pyridines in Square-Planar Complexes*, 10th International Symposium on Metal Elements in Environment, Medicine and Biology, Timisoara, November 2010.

Saopštenja sa skupa nacionalnog značaja štampana u izvodu (M64)

Usmena prezentacija:

1. **G. Janjić**, M. Miličić, S. Zarić, *Theoretical Study of Interactions Between Coordinated Water Molecule and Phehyl Group*, XIII Conference of the Serbian Crystallographic Society, Novi Sad, Serbia and Montenegro, 1-3. Jun 2006.

Prezentacija u vidu postera:

2. M. Miličić, V. Medaković, **G. Janjić**, S. Zarić, *Study of Metal Ligand Aromaticcatio- π Interactions of Aqua Complexes with Phehyl Ring*. XII Conference of the Serbian Crystallographic Society, Kragujevac, Serbia and Montenegro, 16-18. Sept. 2004.

3. **G. Janjić**, B. Ostojić, S. Zarić, *Comparasion of OH/ π interactions of coordinated and noncoordinated water molecule*, XIV conference of the serbian crystallographic society, Vršac, Serbia, 28-30 june 2007.

4. S. Stajić, **G. Janjić**, S. Zarić, *Stacking interactions in crystal structures of bipyridil metal complexes*, XIV conference of the serbian crystallographic society, Vršac, Serbia, 28-30 june 2007.

5. **G. Janjić**, B. Ostojić, S. Zarić, *Crystalografic and theoretical investigation of O-H $\cdots$ π (aryl) interactions of water molecules*, XIV conference of the serbian crystallographic society, Vršac, Serbia, 28-30 june 2007.

6. J. Andrić, **G. Janjić**, Z. Bugarčić, S. Zarić, *Studies of crystal packing in strctures of square-planar metal complexes with terpyridyl ligands*, 46th Meeting of Serbian Chemical Society, Beograd, Serbia, 21. feb. 2008.

7. **G. Janjić**, B. Ostojić, S. Zarić, *Theoretical investigation of OH/ π interactions of water molecule in crystal structures*, 46th Meeting of Serbian Chemical Society, Beograd, Serbia, 21. feb. 2008.

8. I. Milovanović, M. Bukorović, **G. Janjić**, S. Zarić, *Study of crystal packing in crystal structures of octahedral metal complexes with bipiridyl*, 46th Meeting of Serbian Chemical Society, Beograd, Serbia, 21. feb. 2008.

9. D. Ninković, P. Petrović, **G. Janjić**, S. Zarić, *Crystal packing in crystal structures of metal complexes with 1,10-phenanthroline ligands*, 46th Meeting of Serbian Chemical Society, Beograd, Serbia, 21. feb. 2008.

10. I. Milovanović, M. Bukorović, **G. Janjić**, S. Zarić, *Noncovalent Interactions Between Bipyridyl Ligands in Crystal Structures in Square-planar, Tetrahedral and Octahedral Metal Complexes*, XV Konferencija Srpskog Kristalogrfskog Društva, Donji Milanovac, Serbia, July 2008.

11. D. Ninković, P. Petrović, **G. Janjić**, S. Zarić, *Study of Stacking Interactions in Crystal Structures in Square-planar and Tetrahedral Metal Complexes With Phenanthroline Ligands*, XV Konferencija Srpskog Kristalogrfskog Društva, Donji Milanovac, jul 2008.

12. D. Veljković, **G. Janjić**, S. Zarić, *Theoretical research of C-H...O interactions between C6-aryl group and water molecule in crystal structures*, 47th Meeting of Serbian Chemical Society, Beograd, Serbia, mart 2009.

13. D. Veljković, **G. Janjić**, S. Zarić, *Crystallographic and quantum chemical investigations of C-H...O interactions between water molecule and C6-aromatic group*, XVI Konferencija Srpskog Kristalografskog Društva, Divčibare, septembar, 2009.

14. M. Cizler, **G. Janjić**, S. Zarić, *Crystallographic investigation of C-H...O interactions between coordinated water molecule and C6-aromatic group*, XVI Konferencija Srpskog Kristalografskog Društva, Divčibare, septembar, 2009.

15. S. Milić, **G. Janjić**, S. Zarić, *Theoretical study of interactions between water molecule and C6- aromatic rings in mutually parallel alignment*, XVI Konferencija Srpskog Kristalografskog Društva, Divčibare, septembar, 2009.

16. D. Z. Vojislavljević, J. Blagojević, **G. V. Janjić**, D. Ž. Veljković, S. D. Zarić, *Theoretical study of O-H/ π interactions between coordinated and non-coordinated water molecule with C6-aromatic ring*, 49th Meeting of Serbian Chemical Society, Kragujevac, Serbia, may 2011.

17. D. Z. Vojislavljević, **G. V. Janjić**, S. D. Zarić, *Study of MLOH/ π interactions between coordinated water molecule and C₆-aromatic ring*, XVIII Konferencija Srpskog Kristalografskog Društva, Fruška Gora, jun, 2011.

18. **G. V. Janjić**, D. Ž. Veljković, S. D. Zarić, *PARALLEL WATER/AROMATIC INTERACTIONS WITH LARGE OFFSET DISTANCES*, XVIII Konferencija Srpskog Kristalografskog Društva, Fruška Gora, jun, 2011.

19. D. Ž. Veljković, **G. V. Janjić**, S. D. Zarić, *Influence of C₆-aryl group substituents on geometry of C-H...O interactions*, XVIII Konferencija Srpskog Kristalografskog Društva, Fruška Gora, jun, 2011.

20. D. B. Ninković, **G. V. Janjić**, D. Ž. Veljković, D. N. Sredojević, S. D. Zarić, *Crystallographic and quantum-chemistry analysis of the interactions between benzene molecules with mutual parallel alignment*, XVIII Konferencija Srpskog Kristalografskog Društva, Fruška Gora, jun, 2011.

21. J. M. Andrić, D. B. Ninković, **G. V. Janjić**, S. D. Zarić, *Study of interactions between non-coordinated pyridine molecules*, XVIII Konferencija Srpskog Kristalografskog Društva, Fruška Gora, jun, 2011.