

СРПСКО КРИСТАЛОГРАФСКО ДРУШТВО
SERBIAN CRYSTALLOGRAPHIC SOCIETY

XXVI КОНФЕРЕНЦИЈА
СРПСКОГ КРИСТАЛОГРАФСКОГ ДРУШТВА

Изводи радова

26th CONFERENCE OF THE
SERBIAN CRYSTALLOGRAPHIC SOCIETY

Abstracts

Сребрно језеро – Silver Lake
2019.

XXVI КОНФЕРЕНЦИЈА СРПСКОГ КРИСТАЛОГРАФСКОГ ДРУШТВА
Изводи радова

26th CONFERENCE OF THE SERBIAN CRYSTALLOGRAPHIC SOCIETY
Abstracts

Издавач - Publisher:

– Српско кристалографско друштво
Ђушина 7, 11000 Београд, Србија, тел. 011-3336-701
– Serbian Crystallographic Society
Đušina 7, 11 000 Belgrade, Serbia, phone: +381 11 3336 701

За издавача – For the publisher:

Јелена Роган – Jelena Rogan

Уредник – Editor:

Александра Дапчевић – Aleksandra Dapčević

Технички уредник – Technical editor:

Лидија Радовановић – Lidija Radovanović

Издавање ове публикације омогућено је финансијском помоћи Министарства просвете, науке и технолошког развоја Републике Србије
The publication is financially supported by Ministry of Education, Science and Technological development, Republic of Serbia

© Српско кристалографско друштво – Serbian Crystallographic Society
ISBN 978-86-912959-5-0
ISSN 0354-5741

Штампа – Printing:

Технолошко-металуршки факултет, Развојно-истраживачки центар Графичког инжењерства, Карнегијева 4, Београд, Србија
Faculty of Technology and Metallurgy, Research and Development Centre of Printing Technology, Karnegijeva 4, Belgrade, Serbia

Тираж – Copies: 100
Београд – Belgrade
2019.

**XXVI КОНФЕРЕНЦИЈА
СРПСКОГ КРИСТАЛОГРАФСКОГ ДРУШТВА**

**26th CONFERENCE OF THE
SERBIAN CRYSTALLOGRAPHIC SOCIETY**

НАУЧНИ ОДБОР / SCIENTIFIC COMMITTEE:

др Љиљана Карановић, РГФ Београд / dr Ljiljana Karanović, RGF Beograd
др Оливера Клисурић, ПМФ Нови Сад / dr Olivera Klisurić, PMF Novi Sad
др Марко Родић, ПМФ Нови Сад / dr Marko Rodić, PMF Novi Sad
др Срећко Трифуновић, ПМФ Крагујевац / dr Srećko Trifunović, PMF Kragujevac
др Јелена Роган, ТМФ Београд / dr Jelena Rogan, TMF Beograd
др Горан Богдановић, ИНН „ВИНЧА” / dr Goran Bogdanović, INN "Vinča"
др Наташа Јовић-Орсини, ИНН „ВИНЧА” / dr Nataša Jović-Osini, INN "Vinča"
др Снежана Зарић, ХФ Београд / dr Snežana Zarić, HF Beograd
др Катарина Анђелковић, ХФ Београд / dr Katarina Anđelković, HF Beograd
др Братислав Антић, ИНН „ВИНЧА” / dr Bratislav Antić, INN "Vinča"
др Мирјана Милић, ИНН „ВИНЧА” / dr Mirjana Milić, INN "Vinča"
др Александра Дапчевић, ТМФ Београд / dr Aleksandra Dapčević, TMF Beograd
др Предраг Вулић, РГФ Београд / dr Predrag Vulić, RGF Beograd
др Тамара Тодоровић, ХФ Београд / dr Tamara Todorović, HF Beograd
др Слађана Новаковић, ИНН „ВИНЧА” / dr Slađana Novaković, INN "Vinča"
др Сабина Ковач, РГФ Београд / dr Sabina Kovač, RGF Beograd
др Александар Кременовић, РГФ Београд / dr Aleksandar Kremenović, RGF Beograd

ОРГАНИЗАЦИОНИ ОДБОР / ORGANIZATION COMMITTEE:

др Александар Кременовић, РГФ Београд / dr Aleksandar Kremenović, RGF Beograd
др Предраг Вулић, РГФ Београд / dr Predrag Vulić, RGF Beograd
др Сабина Ковач, РГФ Београд / dr Sabina Kovač, RGF Beograd
маст. геол. Предраг Дабић, РГФ Београд / Predrag Dabić, RGF Beograd
др Јелена Роган, ТМФ Београд / dr Jelena Rogan, TMF Beograd
др Александра Дапчевић, ТМФ Београд / dr Aleksandra Dapčević, TMF Beograd
др Лидија Радовановић, ИЦ ТМФ Београд / dr Lidija Radovanović, IC TMF Beograd
Бојана Симовић, дипл. инж, ИМСИ Београд / Bojana Simović, IMSI Beograd

NONCOVALENT INTERACTIONS OF METAL COMPLEXES AND AROMATIC MOLECULES

D. B. Ninković ^a, D. Veljković ^c, D. Malenov ^c, M. R. Milovanović ^a, J. M. Živković ^a, I. M. Stanković ^b, I. Veljković ^b, V. Medaković ^c, J. Blagojević Filipović ^a, D. Vojislavljević Vasilev ^a, **S. D. Zarić** ^{c,d}

^a Innovation center of the Faculty of Chemistry, Studentski trg 12-16, Belgrade, 11000, Serbia; ^b Institute of Chemistry, Technology and Metallurgy, University of Belgrade, Njegoševa 12, 11000 Belgrade, Serbia; ^c Faculty of Chemistry, University of Belgrade, Studentski trg 12-16, Belgrade, 11000, Serbia; ^d Texas A&M University at Qatar, Education City, PO Box 23874, Doha, Qatar
e-mail: szaric@chem.bg.ac.rs

Our research is based on analyzing data in crystal structures from the Cambridge Structural Database (CSD) and on quantum chemical calculations. The analysis of the data from the CSD enable to recognize interactions in crystal structures and to describe the geometries of these interactions, while by quantum chemical calculations we can evaluate interaction energies and find the most stable interaction geometries. Using this methodology we were able to recognize and describe several new types of noncovalent interactions.

Our study of planar metal-chelate rings interactions showed possibility of chelate ring stacking interactions with organic aromatic rings, and stacking interactions between two chelate rings. The calculated energies indicate strong stacking interactions of metal-chelate rings; the stacking of metal-chelate rings is stronger than stacking between two benzene molecules. Studies of interactions of coordinated water and ammonia indicate stronger hydrogen bonds and stronger OH/ π and NH/ π interactions of coordinated in comparison to noncoordinated water and ammonia. The calculations on OH/M interactions between metal ion in square-planar complexes and water molecule indicate that these interactions are among the strongest hydrogen bonds in any molecular system.

The studies on aromatic molecules indicate stacking interactions at large horizontal displacements between two aromatic molecules with significantly strong interactions, the energy is 70% of the strongest stacking geometry. Our data also indicate that stacking interactions of an aliphatic rings with an aromatic ring are stronger than interactions between two aromatic molecules, while aliphatic/aromatic interactions are very frequent in protein structures.

[1] D.P. Malenov, G.V. Janjić, V.B. Medaković, M.B. Hall, S.D. Zarić, *Cood. Chem. Rev.*, **345** (2017) 318–341.

[2] D.B. Ninković, G.V. Janjić, D.Ž. Veljković, D.N. Sredojević, S.D. Zarić, *Chem-PhysChem*, **12** (2011) 3511–3514.

[3] D.B. Ninković, J.M. Andrić, S.N. Malkov, S.D. Zarić, *PhysChemChemPhys*, **16** (2014) 11173–11177.