

# МЕТОДОЛОГИЈА ПРОУЧАВАЊА НЕКОВАЛЕНТНИХ ИНТЕРАКЦИЈА

проф. Снежана Д. Зарић

*Универзитет у Београду – Хемијски факултет*

Нековалентне интеракције се могу проучавати експерименталним и теоријским методама. Наша истраживачка група у Београду се бави нековалентним интеракцијама у дугом временском периоду и развила је специфичну методологију у којој се комбинују анализа кристалних структура и квантохемијски прорачуни. Анализом нековалентних интеракција које се налазе у кристалним структурама малих молекула у Кембричкој бази структурних података, као и у структурама протеина добијају се подаци о постојању и заступљености интеракција, типовима интерагујућих фрагмената, као и преовлађујућим геометријама одређених контаката. Упоредо са претрагом база података, интеракције се проучавају и квантохемијским прорачунима, чиме се добијају подаци о оптималним геометријама, енергијама интеракција и природи интеракција применом прорачуна декомпозиције енергије. Квантохемијским методама се добијају и мапе електростатичког потенцијала, које могу да објасне интеракције код којих је електростатика важна. Ова методологија омогућава успешно проучавање различитих типова нековалентних интеракција, као што су водоничне везе, различите интеракције  $\pi$ -система и антипаралелне интеракције, а омогућава и препознавање нових типова нековалентних интеракција.

## БИОГРАФИЈА

**Проф. Снежана Зарић** је стекла звање дипломираног хемичара и доктора хемијских наука на Хемијском факултету Универзитета у Београду, где је тренутно запослена као редовни професор. На постдокторским студијама била је на Универзитету Тексас А&М у групи проф. Мајкла Б. Хола. Године 2001. добила је стипендију Александер фон Хумболт и радила на Слободном универзитету у Берлину. Била је гостујући професор на Универзитету Луј Пастер у Стразбуру 2004. године и гостујући професор на Универзитету Тексас А&М у Катару од 2012. до 2017. године. Њено истраживачко интересовање обухвата теоријско проучавање нековалентних интеракција, комплекса прелазних метала, протеина и механизма органометалних реакција. Одржала је преко 30 предавања по позиву на међународним скуповима. Проф. Зарић је објавила преко 150 радова који су цитирани преко 3800 пута, са  $H$  индексом 37, и један је од 2% најутицајнијих научника у области неорганске хемије на Станфордској листи за 2020, 2021. и 2022. годину.