

Универзитет у Крагујевцу
ПРИРОДНО-МАТЕМАТИЧКИ ФАКУЛТЕТ

Број: 6/56
24. 02. 2023. године
Крагујевац

На основу члана 82 став 2 Закона о науци и истраживањима и члана 114 став 2, 152 став 1 и 158 Статута Факултета по поднетом извештају комисије ради спровођења поступка за избор у научно звање број 03-38/6-1 од 24. 02.2023. године, Декан Факултета дана 24. 02. 2023. године, донео је следећу

О Д Л У К У

Ставља се на увид јавности у трајању од 30 дана објављивањем у PDF формату на интернет страници Факултета електронска верзија Извештаја комисије о утврђивању предлога за избор кандидата др Душана Ђоћића у научно звање **Научни сарадник**.

За реализацију ове одлуке задужују се Продекан за наставу и техничко-информатичка служба Факултета.


ДЕКАН
Проф. др Марија Станић
Проф. др Марија Станић

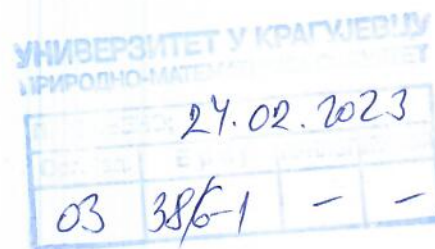
Д-но:

- продекану за наставу,
- ННВ-у Факултета,
- архиви.

НАСТАВНО-НАУЧНОМ ВЕЋУ ПРИРОДНО-МАТЕМАТИЧКОГ ФАКУЛТЕТА У КРАГУЈЕВЦУ

На седници Наставно-научног већа Природно-математичког факултета у Крагујевцу одржаној 25.01.2023 године (одлука број: 90/V-1) одређени смо у Комисију за писање извештаја о испуњености услова др Душана Тоћића за стицање звања *научни сарадник*, за научну област Хемија. На основу приложене документације о научно-истраживачком раду кандидата, сагласно критеријумима за стицање научних звања утврђеним *Правилником о поступку и начину вредновања и квантитативном исказивању научно-истраживачких резултата истраживача* надлежног Министарства, а у складу са *Законом о научноистраживачкој делатности* („Службени гласник РС”, бр. 110/05 и 50/06-исправка), подносимо Наставно-научном већу следећи

ИЗВЕШТАЈ



А. Биографски подаци

Др Душан Тоћић рођен је 06. 04. 1991. године у Крушевцу. Завршио је Гимназију Свети Трифун, општи смер, у Александровцу 2010. године. Природно-математички факултет у Крагујевцу, студијски програм хемија, смер истраживање и развој, уписао је 2010/2011. године у Крагујевцу, где је одбранио завршни рад на основним академским студијама 2015. године. Мастер академске студије, студијски програм хемија, смер истраживање и развој, уписао је 2015/2016. године на истом факултету, а мастер рад под називом „Испитивање интеракција повних биметалских комплекса Pt(II) И Pd(II) са ДНК и серум албумином“ одбранио је 2016. године. Докторске академске студије на Природно-математичком факултету у Крагујевцу уписао је школске 2016/2017. године, смер неорганска хемија. Докторску дисертацију под насловом „Синтеза, карактеризација и биолошка активност динуклеарних платина(II) и паладијум(II) комплекса са азот-донорским мостним лигандима“ одбранио је 16.12.2022. године на Природно-математичком факултету у Крагујевцу.

Др Душан Тоћић се бави научно-истраживачким радом из области неорганске хемије. Предмет научних истраживања на којима је ангажован на Институту за хемију у Крагујевцу је синтеза динуклеарних комплекса платине(II) и паладијума(II), њихова карактеризација, као и интеракције комплекса са малим биомолекулима. Такође бави се супрамолекулском хемијом, истраживањем интеракција комплекса јона метала са различитим биомолекулима молекулском докинг методом, као и истраживањем механизма хемијских реакција компјутерском техником. До сада је објавио двадесет и седам научних радова у часописима од међународног значаја.

Др Душан Тоћић активно учествује у извођењу вежби из предмета: Неорганска хемија 2, Хемија атмосфере, Неорганске синтезе и методе карактеризације, Индустијска хемија 1 и Механизми неорганских реакција. Активно је учествовао и на фестивалима науке.

До сада има објављених двадесет и седам научних радова (један из категорије M21a, десет из категорије M21, девет из категорије M22 и седам из категорије M23), три рада у часопису од националног значаја (M53), дванаест саопштења на

међународним научним конференцијама штампана у изводу (M34) и десет саопштења на националним научним конференцијама штампана у изводу (M64).

Б. Библиографија

Др Душан Ћоћић се активно бави научно-истраживачким радом у области неорганске и компјутерске хемије. Предмет његове докторске дисертације био је синтеза и карактеризација нових динуклеарних Pd(II) и Pt(II) комплекса са азот-донорским мостним и инертним лигандима. Дисертација је обухватила и испитивање стабилности поменутих комплекса у физиолошким условима и испитивање интеракција комплекса са различитим биолошки релевантним једињењима. У оквиру дисертације приказани су и резултати испитивања цитотоксичности комплекса на различитим ћелијским линијама.

1. Докторска дисертација (M71)

Др Душан Ћоћић

„Синтеза, карактеризација и биолошка активност динуклеарних платина(II) и паладијум(II) комплекса са азот-донорским мостним лигандима ”

Природно-математички факултет, Универзитет у Крагујевцу, Крагујевац, 2022.

6 бодова

2. Списак научних радова

1. Списак научних радова публикованих у часописима од међународног значаја (M20):

- 2.1.1. **Dušan Ćočić**, Snežana Jovanović, Marija Nišavić, Dejan Baskić, Danijela Todorović, Suzana Popović, Živadin D. Bugarčić, Biljana Petrović, “*New dinuclear palladium(II) complexes: Studies of the nucleophilic substitution reactions, DNA/BSA interactions and cytotoxic activity*”, Journal of Inorganic Biochemistry, 2017, 175, 67–79. **M21**
DOI: <http://dx.doi.org/10.1016/j.jinorgbio.2017.07.009>
- 2.1.2. **Dušan Ćočić**, Snežana Jovanović, Snežana Rajković, Biljana Petrović, “*Kinetics and mechanism of the substitution reactions of dinuclear platinum(II) complexes with important bio-molecules*”, Inorganica Chimica Acta-Elsevier, 2017, 482, 635-642. **M22**
DOI: <https://doi.org/10.1016/j.ica.2018.07.004>
- 2.1.3. **Dušan Ćočić**, Snežana Jovanović, Snežana Radisavljević, Jana Korzekwa, Andreas Scheurer, Ralph Puchta, Dejan Baskić, Danijela Todorović, Suzana Popović, Sanja Matić, Biljana Petrović, “*New monofunctional platinum(II) and palladium(II) complexes: Studies of the nucleophilic substitution reactions, DNA/BSA interaction, and cytotoxic activity*”, Journal of Inorganic Biochemistry - Elsevier, 2018, 189, 91-102. **M21**
DOI: <https://doi.org/10.1016/j.jinorgbio.2018.09.005>
- 2.1.4. Ralph Puchta, **Dušan Ćočić**, Martin Michela and Rudi van Eldik “*Host-guest complexes of the Beer-Can-cryptand: prediction of ion selectivity by quantum chemical calculations XI*” Journal of Coordination Chemistry, 2019, 72, 2106-2114. **M23**
DOI: <https://doi.org/10.1080/00958972.2019.1636975>

- 2.1.5. Andjela A. Franich, Marija D. Živković, **Dušan Čočić**, Biljana Petrović, Marija Milovanović, Aleksandar Arsenijević, Jelena Milovanović, Dragana Arsenijević, Bojana Stojanović, Miloš I. Djuran, Snežana Rajković, “*New dinuclear palladium(II) complexes with benzodiazines as bridging ligands: interactions with CT-DNA and BSA, and cytotoxic activity*” *Journal of Biological Inorganic Chemistry*, 2019, 24, 1009–1022. **M21**
DOI: <https://doi.org/10.1007/s00775-019-01695-w>
- 2.1.6. Snežana Radisavljević, **Dušan Čočić**, Snežana Jovanović, Biljana Šmit, Marijana Petković, Nevena Milivojević, Nevena Planojević, Snežana Marković, Biljana Petrović, “*Synthesis, characterization, DFT study, DNA/BSA-binding affinity, and cytotoxicity of some dinuclear and trinuclear gold(III) complexes*” *Journal of Biological Inorganic Chemistry*, 2019, 24, 1057-1076. **M21**
DOI: <https://doi.org/10.1007/s00775-019-01716-8>
- 2.1.7. Mohamed M. Shoukry, Mohamed R. Shehata, Mona S. Ragab, **Dušan Čočić**, Ralph Puchta, Rudi van Eldik, “*Kinetics, mechanism and density functional theory calculations on base hydrolysis of α -amino acid esters catalyzed by $[Pd(AEMP)(H_2O)_2]^{2+}$ ($AEMP = 2-(2-aminoethyl)-1-methylpyrrolidine$)*” *Reaction Kinetics, Mechanisms and Catalysis*, 2020, 129, 613–626 **M23**
DOI: <https://doi.org/10.1007/s11144-020-01734-7>
- 2.1.8. Milica Međedović, Ana Rilak Simović, **Dušan Čočić**, Milan Milutinović, Laura Senft, Stefan Blagojević, Nevena Milivojević, Biljana Petrović, “*Dinuclear ruthenium(II) polypyridyl complexes: Mechanistic study with biomolecules, DNA/BSA interactions and cytotoxic activity*” *Polyhedron*, 2020, 178, 114334-114344. **M22**
DOI: <https://doi.org/10.1016/j.poly.2019.114334>
- 2.1.9. Angelina Petrović, Marko Živanović, Ralph Puchta, **Dušan Čočić**, Andreas Scheurer, Nevena Milivojević, Jovana Bogojeski, “*Experimental and quantum chemical study on the DNA/protein binding and the biological activity of a rhodium(III) complex with 1,2,4-triazole as an inert ligand*” *Dalton Trans.*, 2020, 49, 9070-9085. **M21**
DOI: 10.1039/d0dt01343a
- 2.1.10. Snežana Radisavljević, Ana Đeković Kesić, **Dušan Čočić**, Ralph Puchta, Laura Senft, Milena Milutinović, Nevena Milivojević, Biljana Petrović, “*Studies of the stability, nucleophilic substitution reactions, DNA/BSA interactions, cytotoxic activity, DFT and molecular docking of some tetra- and penta-coordinated gold(III) complexes*” *New J. Chem.*, 2020, 44, 11172-11187. **M22**
DOI: 10.1039/d0nj02037k
- 4.1.11. Jelena Balović, **Dušan Čočić**, Ralph Puchta, Andreas Scheurer, Rudi van Eldik “*The influence of the bridgehead in Saalfrank-type cryptands: prediction of ion selectivity by quantum chemical calculations*” *Journal of Coordination Chemistry*, 2020, 73, 1701-1711. (Cover page). **M22**
DOI: <https://doi.org/10.1080/00958972.2020.1792455>
- 2.1.12. **Dušan Čočić**, Ralph Puchta, Rudi van Eldik “*Noble guests in organic cages—encapsulation of noble gases by cryptophane*” *Journal of Coordination Chemistry*, 2020, 73, 2602-2612. **M22**
DOI: <https://doi.org/10.1080/00958972.2020.1820494>
- 2.1.13. **Dušan Čočić**, Snežana Jovanović-Stević, Ratomir Jelić, Sanja Matic, Suzana Popović, Predrag Djurdjević, Dejan Baskić, Biljana Petrović “*Homo- and hetero-dinuclear Pt(II)/Pd(II) complexes: studies of hydrolysis, nucleophilic substitution reactions, DNA/BSA interactions, DFT calculations, molecular docking and cytotoxic activity*” *Dalton Trans.*, 2020, 49, 14411-14431. **M21**
DOI: 10.1039/d0dt02906h

- 2.1.14. **Dušan Čočić**, Selina Siegl, Aliya Manaa, Svetlana Begel, Colin D. Hubbard, Ralph Puchta, "Host-Guest Complexes of Two Isomeric 2,2'-Bioxazole Based {2}-Lehn-Type Cryptands. Prediction of Ion Selectivity by Quantum Chemical Calculations. Part XIV" *Macrocyclics*, 2020, 13, 215-222. **M23**
DOI: [10.6060/mhc200603p](https://doi.org/10.6060/mhc200603p)
- 2.1.15. **Dušan Čočić**, Marta Chrzanowska, Anna Katafias, Ralph Puchta, Rudi van Eldik, "Tuning the lability of a series of Ru(II) polypyridyl complexes: a comparison of experimental-kinetic and DFT-predicted reaction mechanisms" *Journal of Coordination Chemistry*, 2021, 74, 433-443. **M23**
DOI: <https://doi.org/10.1080/00958972.2021.1874369>
- 2.1.16. **Dušan Čočić**, Aliya Manaa, Selina Siegl, Ralph Puchta, Rudi van Eldik, "[3.2.1] and [4.1.1] isomers of Lehn's [2.2.2] Cryptand: Prediction of ion selectivity by quantum chemical calculations XV" *Z. Anorg. Allg. Chem.* 2021, 647, 915-921. **M23**
DOI: <https://doi.org/10.1002/zaac.202000452>
- 2.1.17. Angelina Z. Petrović, **Dušan C. Čočić**, Dirk Bockfeld, Marko Živanović, Nevena Milivojević, Katarina Virijević, Nenad Janković, Andreas Scheurer, Milan Vraneš, Jovana V. Bogojeski, "Biological activity of bis(pyrazolylpyridine) and terpyridine Os(II) complexes in the presence of biocompatible ionic liquids", *Inorg. Chem. Front.*, 2021, 8, 2749-2770. **M21a**
DOI: <https://doi.org/10.1039/D0QI01540G>
- 2.1.18. Dejan Lazić, Andreas Scheurer, **Dušan Čočić**, Jelena Milovanović, Aleksandar Arsenijević, Bojana Stojanović, Nebojša Arsenijević, Marija Milovanović, Ana Rilak Simović, "A new bis-pyrazolylpyridine ruthenium(III) complex as a potential anticancer drug: in vitro and in vivo activity in murine colon cancer" *Dalton Trans.*, 2021, 50, 7686-7704. **M21**
DOI: <https://doi.org/10.1039/D1DT00185J>
- 2.1.19. Snežana Jovanović-Stević, Snežana Radisavljević, Andreas Scheurer, **Dušan Čočić**, Biljana Šmit, Marijana Petković, Marko N. Živanović, Katarina Virijević, Biljana Petrović, "Bis(triazinyl)pyridine complexes of Pt(II) and Pd(II): studies of the nucleophilic substitution reactions, DNA/HSA interactions, molecular docking and biological activity" *J. Biol. Inorg. Chem.*, 2021, 26, 625-637. **M21**
DOI: <https://doi.org/10.1007/s00775-021-01879-3>
- 2.1.20. Nenad Joksimović, Jelena Petronijević, **Dušan Čočić**, Nenad Janković, Emilija Milović, Marijana Kosanić, Nevena Petrović, "Synthesis, characterization, biological evaluation, BSA binding properties, density functional theory and molecular docking study of Schiffbases" *J. Mol. Struct.*, 2021, 1244, 130952-130966. **M22**
DOI: <https://doi.org/10.1016/j.molstruc.2021.130952>
- 2.1.21. Snežana Radisavljević, Andreas Scheurer, Dirk Bockfeld, **Dušan Čočić**, Ralph Puchta, Laura Senft, Marko Pešić, Ivan Damljanović, Biljana, Petrović, "New mononuclear gold(III) complexes: Synthesis, characterization, kinetic, mechanistic, DNA/BSA/HSA binding, DFT and molecular docking studies" *Polyhedron*, 2021, 209, 115446-115457. **M22**
DOI: <https://doi.org/10.1016/j.poly.2021.115446>
- 2.1.22. Jelena Balović, **Dušan Čočić**, Slađana Đorđević, Slavko Radenković, Rudi van Eldik, Ralph Puchta, "A theoretical mechanistic study of $[K \subset [2.2.2]]^+$ enantiomerization" *J. Phys. Org. Chem.* 2021, 34. **M22**
DOI: <https://doi.org/10.1002/poc.4289>

- 2.1.23. Snežana Jovanović-Stević, **Dušan Čočić**, Ralph Puchta, Jovana Bogojeski, Milena Jurišević, Nevena Gajović, Slobodan Jakovljević, Nebojša Arsenijević, Ivan Jovanović, Biljana Petrović, “*Assessment of biological activity of the caffeine-derived Pt (II) and Pd (II) complexes*” Appl. Organomet. Chem. 2021, e6532, **M21**
DOI: <https://doi.org/10.1002/aoc.6532>
- 2.1.24. Basam M. Alzoubia, **Dušan Čočić**, Ralph Puchta, and Rudi van Eldika, “*Mechanistic insight on the water exchange mechanism of $[Zn(tren)H_2O]^{2+}$ and related complexes from a DFT study*” Journal of Coordination Chemistry, 2022, **M23**
DOI: <https://doi.org/10.1080/00958972.2022.2068415>
- 2.1.25. **Dušan Čočić**, Biljana Petrović, Ralph Puchta, Marta Chrzanowska, Anna Katafias, Rudi van Eldik, “*Investigation of water substitution at Ru^{II} complexes by conceptual density function theory approach*” J. Comput. Chem., 2022, **M22**
DOI: <https://doi.org/10.1002/jcc.26878>
- 2.1.26 Milan M. Milutinović, Angelina Z. Caković, **Dušan Čočić**, Eduard Raisa, Roland Schocha, Bojana Simović Marković, Nebojša Arsenijević, Vladislav Volarević, Snežana Jovanović-Stević, Jovana V. Bogojeski, and Rene Wilhelm, “*Unique enantiopure camphor-based neutral arene–ruthenium(II) complexes: DNA/BSA binding, kinetic and cytotoxic studies*” J. Coord. Chem., 2022, 75, 1636-1655. **M23**
DOI: <https://doi.org/10.1080/00958972.2022.2106562>
- 2.1.27. Ana S. Živanović, Andriana M. Bukonjić, Snežana Jovanović-Stević, Jovana Bogojeski, **Dušan Čočić**, Ana Popović Bijelić, Zoran R. Ratković, Vladislav Volarević, Dragana Miloradović, Dušan Lj. Tomović, Gordana P. Radić, “*Complexes of copper(II) with tetradentate S,O-ligands: Synthesis, characterization, DNA/albumin interactions, molecular docking simulations and antitumor activity*” J. Inorg. Bioch., 233, 111861. **M21**
DOI: <https://doi.org/10.1016/j.jinorgbio.2022.111861>

2. Spisak naučnih radova publikovanih u časopisima od nacionalnog značaja (M50):

- 2.2.1. **Dušan Ćočić**, Биљана Петровић, “*Честице у ваздуху – атмосферски загађивачи*” Хемијски преглед, 2017, 58, број 1, 9-15. **M53**
- 2.2.2. Snežana Jovanović-Stević, **Dušan Ćočić**, Биљана Петровић, “*Интеракције динуклеарних комплекса платине и паладијума са биолошки важним лигандима*” Хемијски преглед, 2017, 58, број 6, 110-118. **M53**
- 2.2.3 Ralph Puchta, Thomas Capponi, **Dušan Čočić**, Basam M. Alzoubi, Ilka Shook, “*Calculating stabilization energies for aromatic molecules in schools - quantum chemistry, a valuable tool for teaching and education*” Chemia Naissensis, 2022, 5, 1-15. **M53**

3. Spisak naučnih саопштења на међународним конференцијама штампаним у изводу (M34):

- 2.3.1. **Dušan Čočić**, Snežana Jovanović, Snežana Rajković, Ralph Puchta, Biljana Petrović “*Kinetic studies and determination of products of interactions between pyrazine-bridged dinuclear Pt(II) complexes and some biologically important molecules by HPLC and DFT calculation*” International meeting on medicinal and bio(in)organic chemistry, Vrnjačka Banja, Srbija, 26-31. Avgust, 2017. **M34**

- 2.3.2. Snežana Jovanović, **Dušan Čočić**, Andreas Scheurer, Ralph Puchta, Jovana Bogojeski, Biljana Petrović, “*The interaction of new platinum(II) complexes with CT-DNA and BSA*”, 25th Young Research Fellow’s Meeting, Orleans, France, 5-7 March, 2018, pp. P-31. **M34**
- 2.3.3. **Dušan Čočić**, Snežana Jovanović, Snežana Rajković, Ralph Puchta, Biljana Petrović “*Kinetic studies of the interaction between pyrazine-bridged dinuclear Pt(II) complexes and some bio-relevant nucleophiles*” 25th Young Research Fellow’s Meeting, Orleans, France, 5-7 March, 2018, pp. P-17. **M34**
- 2.3.4. **Dušan Čočić**, Snežana Jovanović, Ralph Puchta, Biljana Petrović “*Relative stability of homo- and hetero-bimetallic Pd(II) and Pt(II) complexes compared to their mononuclear analogues*” 33rd Molecular Modelling Workshop (MMWS), Erlangen, Germany, 8-10 April; 2019, pp P-05. **M34**
- 2.3.5. **Dušan Čočić**, Snežana Radisavljević, Biljana Petrović, “*In Silico investigation type of interaction between Au(III) complexes and DNA/SA molecules*” 27th SCT Young Research Fellows Meeting, Caen, France, 29–31 January, 2020, pp PO13. **M34**
- 2.3.6. Angelina Z. Petrović, **Dušan S. Čočić** Jovana V. Bogojeski, Olivera R. Klisurić “*Kinetic reactions of Rh(III) complexes in presence of an ionic liquid with biologically important ligands*” 27th SCT Young Research Fellows Meeting, Caen, France, 29–31 January, 2020, pp PO35. **M34**
- 2.3.7. Snežana Radisavljević, Milica Mededović, Ana Rilak, **Dušan Čočić**, Biljana Petrović, “*New mononuclear gold(III) complexes – Study of the DNA/HSA/BSA binding properties*” GP₂A 2021 – 29th Annual Conference, Online, 25th – 27th August. **M34**
- 2.3.8. T. Capponi, **D. Čočić**, J. Weigel, T. Basina, B. M. Alzoubi, Rudi van Eldik, R. Puchta, “*COMPUTATIONAL SUPRAMOLECULAR CHEMISTRY INVESTIGATED BY PUPILS AND UNDERGRADUATE STUDENTS*” 1st International Conference on Chemo and Bioinformatics, October 26-27, 2021. Kragujevac, Serbia. **M34**
- 2.3.9. Ana Rilak Simović, Dejan Lazić, Milica Mededović, **Dušan Čočić**, Biljana Petrović, “*SYNTHESIS AND BIOLOGICAL ACTIVITY OF THE NEW PINCER TYPE RUTHENIUM(III) COMPLEX*” 1st International Conference on Chemo and Bioinformatics, October 26-27, 2021. Kragujevac, Serbia. **M34**
- 2.3.10. **Dušan Čočić**, Biljana Petrović, Ralph Puchta, “*INVESTIGATION OF WATER SUBSTITUTION IN Ru(II) COMPLEXES BY CONCEPTUAL DFT CALCULATIONS APPROACH*” I International Conference on Advances in Science and Technology, May 26-29, 2022, Herceg Novi, Montenegro. **M34**
- 2.3.11. Angelina Z. Caković, **Dušan S. Čočić**, Marko Živanović, Jelena Pavić, Katarina Virijević, Nenad Janković, Milan Vraneš, Jovana V. Bogojeski, “*EFFECT OF USING BIOCOMPATIBLE IONIC LIQUIDS AS COSOLVENTS ON THE REACTIONS OF Rh(III) COMPLEXES WITH 5'-GMP, AND CT-DNA, AS WELL AS ON THEIR CYTOTOXIC EFFECT*” I International Conference on Advances in Science and Technology, May 26-29, 2022, Herceg Novi, Montenegro. **M34**
- 2.3.12. Milena Živković, Dragana Krstic, Tatjana B. Miladinović, Aleksandar Miladinović, **Dušan Čočić**, “*ABSORBED DOSE IN HUMERUS FOR BREAST CANCER AND REGIONAL LYMPH NODES INVOLVEMENT SIMULATED BY FOTELP – VOX CODE COMPARISON WITH CALCULATIONS BY TREATMENT PLANING SYSTEM*” International Conference on Radiation Applications, June 6-10, 2022, Thessaloniki, Greece. **M34**

4. Списак научних саопштења на националним конференцијама штампаним у изводу (M64):

- 2.4.1. **Dušan S. Ćočić**, Snežana M. Jovanović, Živadin D. Bugarčić, Biljana V. Petrović, “*Study of the interactions of bimetallic complexes of platinum(II) and palladium(II) with DNA and BSA*”, Fourth Conference of Young Chemists of Serbia, Belgrade, Serbia, 5. November, 2016, pp. BB P 13. **M64**
- 2.4.2. **Dušan S. Ćočić**, Snežana R. Radisavljević, Snežana M. Jovanović, Biljana V. Petrović, “*The study of the nucleophilic substitution reactions of the new platinum(II) and palladium(II) complexes with some bio-relevant ligands*”, 55th Meeting of the Serbian Chemical Society, Novi Sad, Serbia 8-9 June, 2018, pp. NH P 06. **M64**
- 2.4.3. Snežana R. Radisavljević, **Dušan S. Ćočić**, Biljana V. Petrović, “*New dinuclear gold(III) complexes: Synthesis, characterization and study of their interactions with DNA/BSA*” 55th Meeting of the Serbian Chemical Society, Novi Sad, Serbia 8-9 June, 2018, pp. NH P 07. **M64**
- 2.4.4. Milica Međedović, **Dušan Ćočić**, Snežana Radisavljević, Biljana Petrović, “*Investigation of the type of interactions between novel platinum(II) complexes and DNA*” Sixth Conference of Young Chemists of Serbia, Belgrade, Serbia, 27. October, 2018, pp. MH10 PE 8. **M64**
- 2.4.5. Angelina Z. Petrović, **Dušan S. Ćočić**, Marko N. Živanović, Linus M. Kuckling, Jovana V. Bogojevski “*Interactions of the Rh (III) complex with DNA / protein; Testing the cytotoxicity of the complex*” 56th Meeting of the Serbian Chemical Society, Niš, Serbia 7-8 June, 2019, pp. NH P 04. **M64**
- 2.4.6. Јована В. Богојески, Ангелина З. Петровић, **Душан С. Ћоћић**, “*СИМПОЗИЈУМ-Ефекти активних супстанци у експерименталним in vitro и in vivo моделима*” СИМПОЗИЈУМ- Ефекти активних супстанци у експерименталним in vitro и in vivo моделима 2019, Крагујевац, Србија 26. децембар, 2019. **M64**
- 2.4.7. Jovana Bogojeski, Marko Živanović, **Dušan Ćočić**, Angelina Caković, “*Influence of an inert ligand on the biological activity of Rh(III) and Os(II) complexes in the absence and in presence of ionic liquids*” 57th Meeting of the Serbian Chemical Society, Kragujevac, Serbia 18-19 June, 2021, pp. PPP-5. **M64**
- 2.4.8. Aleksandar Mijatović, Ljubica Bacetić, Nikola Pavlović, **Dušan Ćočić**, Milan Nikolić, Aleksandar Lolić, Rada Baošić, “*In-vitro investigation of interaction of two structurally similar Schiff base Rh(III) complexes with HSA/DNA and molecular docking*” 57th Meeting of the Serbian Chemical Society, Kragujevac, Serbia 18-19 June, 2021, pp. NH-P-3. **M64**
- 2.4.9. Milica G. Međedović, **Dušan S. Ćočić**, Ana M. Rilak Simović, Biljana V. Petrović, “*Interactions of newly synthesized ruthenium-tpy complexes with DNA and HSA*” 57th Meeting of the Serbian Chemical Society, Kragujevac, Serbia 18-19 June, 2021, pp. MH-P-2. **M64**
- 2.4.10. Dušan Ćočić, Milica Međedović, Angelina Caković, Ana Rilak Simović, Jovana Bogojeski, “*In silico investigation of the interactions of Ru(II) complexes with DNA and human serum albumin*” 58th Meeting of the Serbian Chemical Society, June 9-10, 2022, Belgrade, Serbia. **M64**

В. Приказ радова

1. Приказ докторске дисертације

Детаљан приказ резултата из докторске дисертације дат је у оквиру радова под бројевима: 2.1.1, 2.1.2 и 2.1.13.

2. Приказ научних радова

Рад 2.1.1. Шест нових динуклеарних Pd(II) комплекса је синтетизовано и окарактерисано. Вредности pK_a одговарајућих диаква комплекса одређене су спектрофотометријском рН титрацијом. Реакције супституције са тиоуреом, L-метионином, L-цистеином, L-хистидином и гуанозин-5'-монофосфатом су проучаване под условима реакција *pseudo*-првог реда. Интеракције комплекса са ДНК праћене су апсорпционом спектроскопијом и мерењима гашења флуоресценције. Сви комплекси могу да се вежу за ДНК показујући високе унутрашње константе везивања ($K_b=10^4$ - 10^5 M⁻¹). Флуорометријске студије са етидијум-бромидом су показале да комплекси могу да истисну ДНК везан за етидијум-бромидом. Високе вредности константи везивања према протеину говеђег серумског албумина (БСА) указују на добар афинитет везивања. Сви комплекси су показали умерену до високу цитотоксичну активност према ћелијској линији карцинома епитела грлића материце и према ћелијској линији хуманог епителног карцинома дојке.

Рад 2.1.2. Реакције супституције серије динуклеарних комплекса Pt(II) са биолошки важним лигандима као што су тиоуреа, глутатион, L-метионин, L-хистидин и гуанозин-5'-монофосфат проучавани су у медијуму који се састоји од 25 mM Нерес пуфера и 40 mM NaCl, при рН вредности 7,2 и температуре 310 K коришћењем UV-Vis спектрофотометрије. Уочен је следећи редослед реактивности лиганда: тиоуреа > L-метионин > глутатион > L-хистидин > гуанозин-5'-монофосфат. Вредности pK_a одговарајућих диаква комплекса одређене су спектрофотометријском рН титрацијом.

Рад 2.1.3. Четири нова комплекса $[[Pd(H_2L^{tBu})Cl]Cl$, $[Pt(H_2L^{tBu})Cl]Cl$, $[Pd(Me_2L^{tBu})Cl]Cl$ и $[Pt(Me_2L^{tBu})Cl]Cl$ (где је H_2L^{tBu} = 2,6-bis(5-(тетра-бутил)-1Н-пиразол-3-ил)пиридин и Me_2L^{tBu} = 2,6-bis(5-(тетра-бутил)-1-метил-1Н-пиразол-3-ил)пиридин) су синтетизовани и окарактерисани. Реактивност комплекса према тиоуреи, L-метионину, L-цистеину и гуанозин-5'-монофосфату су испитивани. Добијени ред реактивности је успостављен на следећи начин: тиоуреа > L-цистеин > L-метионин > гуанозин-5'-монофосфат. Интеракција комплекса са ДНК молекулом и албумином говеђег серума (БСА) проучавани су UV-Vis и флуоресцентном спектроскопијом. Резултати су показали да комплекси могу да се вежу за ДНК показујући високе константе везивања ($K_b=10^4$ M⁻¹). Високе вредности константи везивања указују и на добар афинитет везивања комплекса за БСА. Резултати биолошких испитивања показали су да сви комплекси имају умерено до високу селективну цитотоксичност, изазивајући апоптозу и аутофагију према испитиваним туморским ћелијским линијама.

Рад 2.1.4. На основу DFT прорачуна (B3LYP/ LANL2DZp) и применом модела једначина, као и поређење дужине везе М-Н-донора са ненапрегнутом референцом ($[M(\text{солвент})_6]^{n+}$), истражена је селективност алкалних и земноалкалних катјона (Li^+ – Cs^+ и Be^{2+} – Ba^{2+}) према криптанду *bis*-триазациклононанен *tris*-пиридил N9-азакриптанду. Испитивани криптанд може најбоље да веже алкални катјон K^+ , затим земноалкалне катјоне Ca^{2+} Sr^{2+} . Овај образац селективности идентична је селективности Lehn-типа криптанда, што сугерише сличну величину шупљине везивног места.

Рад 2.1.5. Три нова динуклеарна Pd(II) комплЕКСА су синтетизовани и окарактерисани. Интеракције ових динуклеарних комплекса са ДНК су праћењем

мерењем вискозитета, UV-Vis и флуоресцентном емисионом спектроскопијом. Поред тога, истраживан је и афинитети везивања комплекса за албумин говеђег серума (БСА) флуоресцентном емисионом спектроскопијом. *In vitro* антипролиферативне и апоптотичке активности динуклеарних комплекса су тестиране ћелијским линијама колоректалног и плућног карцинома. Сви тестирани Pd(II) комплекси су имали нижи цитотоксични ефекат од цисплатине на ћелије рака дебелог црева, али су такође имали сличну или чак већу цитотоксичност од цисплатина према ћелијама рака плућа. Сви комплекси су изазвали апоптозу колоректума и ћелије рака плућа.

Рад 2.1.6. У оквиру овог рада описана је синтеза серије динуклеарних и тринуклеарних злато(III) комплекса опште формуле $[\text{Au}_2(\text{N-N})\text{Cl}_6]$ (1 - 3) за динуклеарне и $[\text{Au}_3(\text{N-N})_2\text{Cl}_8]^+$ (4 - 6) за тринуклеарне комплексе, где је N-N бидентатни лиганд (1,4-диаминобутан, 1,6-диаминохексан или 1,8-диаминооктан). Сви комплекси су окарактерисани елементалном анализом, моларном проводљивошћу и спектроскопским техникама (IR, UV-Vis, ^1H NMR, ESI-MS). DFT прорачуни су коришћени како би се добио увид у геометрију испитиваних комплекса. Испитивање везивања комплекса за ДНК изучавано је употребом UV-Vis спектрофотометрије и флуоресцентне спектроскопије. Добијени резултати су потврдили да полинуклеарни злато(III) комплекси могу да интерагују са ДНК ковалентно или преко интеркалације. Даље, високе вредности за константе везивања злато(III) комплекса за говеђи серум албумин (БСА) указују на добру способност везивања. Редокс стабилност комплекса у присуству ДНК/БСА потврђена је цикличном волтаметријом. Интеракције између злато(III) комплекса и ДНК/БСА додатно су испитиване и помоћу молекуског докинга. Цитотоксична активност синтетисаних злато(III) комплекса испитивана је на хуманим ћелијским линијама карцинома дојке (MDA-MB-231), хуманим ћелијским линијама карцинома дебелог црева (HCT-116) и на нормалним хуманим фибробластима плућа (MRC-5). Сви комплекси у зависности од дозе редукују одрживост и канцерогених и нормалних ћелија, са значајним цитотоксичним ефектом ($\text{IC}_{50} < 25 \mu\text{M}$) за тринуклеарне злато(III) комплексе (4, 5) на HCT-116 ћелијским линијама.

Рад 2.1.7. Синтетисан је комплекс $[\text{Pd}(\text{AEMP})\text{Cl}_2]$ (AEMP = 2-(2-аминоетил)-1-метилпиридин) и окарактерисан спектралним и термичким мерењима. $[\text{Pd}(\text{AEMP})\text{Cl}_2]$ реагује са естрима аминокиселина (L) и формира мешовите комплексе лиганда $[\text{Pd}(\text{AEMP})\text{L}]^{2+}$. Кинетика базне хидролизе $[\text{Pd}(\text{AEMP})\text{L}]^{2+}$ проучавана је рН-потенциометријском техником и одговарајуће константе брзине хидролизе су приказане. Координовани глицин метил естар ефикасно хидролизује, док координирани метионин- и хистидин-метил естри подлежу хидролизи са много нижом каталитичком активношћу. Каталитички ефекат се контролише начином координације естра са Pd(II) комплекс.

Рад 2.1.8. Реакције супституције динуклеарних Ru(II) полипиридилних комплекса, тј. $\{[\text{RuCl}(\text{bpy})_2]_2(\mu\text{-pzn})\}[\text{PF}_6]_2$ и $\{[\text{RuCl}(\text{phen})_2]_2(\mu\text{-pzn})\}[\text{PF}_6]_2$ (2) (bpy = 2,2'-бипиридин, phen = 1,10-фенантролин, $\mu\text{-pzn}$ = пиазин) са мононуклеотидом гуанозин-5'-монофосфатом и нуклеофилима који садрже сумпор као доносрски атом (L-метионин и глутатион) проучаване су UV-Vis спектроскопијом. Структуре динуклеарних Ru(II) комплекса су очуване током процеса супституције, а израчунате енталпије и ентропије активације подржавају асоцијативни механизам супституције. Афинитет везивања за ДНК комплекса је процењен UV-Vis спектроскопијом, флуоресцентном емисионом спектроскопијом и мерењем вискозитета у воденом

раствору фосфатног пуфера. Додатно, конкурентне реакције везивања са интеркалативним агенсом етидијум бромидом и агенсом Hoechst 33258 такође су проучаване. Добијени резултати указују да комплекси могу да интерагују са ДНК интеркалацијом и/или везивањем за мањи жлеб. Ово запажање се добро слаже са добијеним резултатима молекулског докинга. Штавише, оба комплекса могу да интерагују са серумским албумином (БСА). Поред тога, комплекси су показали умерену цитотоксичну активност против ћелија рака дојке код људи, док су оба била неактивна против ћелија колоректалног карцинома.

Рад 2.1.9. Синтеза и структурна карактеризација новосинтетизованог мононуклеарног Rh(III) комплекса приказани су у овом раду. Кинетичке интеракције комплекса са есенцијалним биомолекулима као што су гуанозин-5'-монофосфатом, L-метионин и глутатион су додатно испитиване. Студија биолошких интеракција је била усмерена на својства везивања комплекса за ДНК и серумски албумин. Ове интеракције су испитиване коришћењем UV-Vis спектрофотометрије, флуоресцентне спектроскопије, мерењем вискозитета, термалном денатурацијом и електрофорезом. Испитивана су релативна термодинамичка својства и релативна стабилност комплекса, конструисањем модел једначине и помоћу DFT прорачуна (B3LYP(CPCM)/LANL2DZp). *In vitro* цитотоксичност и редокс статус ћелијских линија хуманог епителног колоректалног карцинома и ћелијских линија здравих људских фибробласта такође су истражени.

Рад 2.1.10. Два комплекса злато(III) јона, квадратно-планарни $[\text{Au}(\text{DPP})\text{Cl}_2]^+$ (1) и квадратно-пирамидални $[\text{Au}(\text{DMP})\text{Cl}_3]$ (2) (где је DMP = 2,9-диметил-1,10-фенантролин и DPP = 4,7-дифенил-1,10-фенантролин) су испитивана различитим експерименталним методама. Њихова стабилност у води и у раствору пуфера (25 mM HEPES, 30 mM NaCl, pH = 7,2) испитивана је UV-Vis спектроскопијом, док је редокс стабилност потврђена цикличном волтаметријом. Супституционе реакције комплекса 1 и 2 са биолошки релевантним нуклеофилима, као што су тиоуреа, гуанозин-5'-монофосфат, глутатион и L-метионин испитиване су „stopped-flow“ техником, у условима реакција *pseudo*-првог реда, као функција концентрације лиганда и температуре. Вредности активационих параметара за све испитиване реакције указале су на асоцијативни механизам супституције. Везивање за ДНК комплекса 1 и 2 испитивано је UV-Vis и флуоресцентном спектроскопијом, као и мерењем вискозности, док су испитиване и интеракције са говеђим серум албумином (БСА). Функционал густине (DFT) је коришћен да би се анализирао таласна функција оптимизоване структуре како би се добио бољи увид у начин везивања. Експериментални резултати везивања за ДНК и БСА симулирани су и упоређени са резултатима добијеним молекулским докингом. Сви резултати су показали повезаност између реактивности комплекса према биолошки важним метама и њихових структурних и електронских карактеристика. Цитотоксична активност комплекса 1 и 2 према различитим ћелијским линијама (MDA-MB-231, HCT-116 и HaCat) праћена је 24 h и 72 h након третмана. Резултати су показали редуковану одрживост ћелијских линија у зависности од времена и дозе.

Рад 2.1.11. Испитивана је селективност {2}-металокриптанда $[\text{Ga}_2\text{R}_3]$ и $[\text{Fe}_2\text{R}_3]$ (R: 1,1'-пиридин-2,6-диил)bis(2-(1H-тетразол-5-ил)етана-1-он)) према алкалним и земноалкалним јонима метала помоћу DFT прорачуна (B3LYP/LANL2DZp) да би се стекао бољи увид на утицај јона метала (Ga и Fe) на свеукупну селективност криптанда. На основу DFT прорачуна, посебно применом модел једначине и

геометријске карактеристике у вези са флексибилношћу {2}-металокриптана, јони K^+ , Sr^{2+} и Ba^{2+} идентификовани су као најприкладнији. Док $[Fe_2R_3]$ поседује мало веће везивно место од $[Ga_2R_3]$, преферира Ba^{2+} катјон, док $[Ga_2R_3]$ бира мањи Sr^{2+} катјон.

Рад 2.1.12. Применом DFT прорачуна ($\omega B97XD/def2-SVP/SVPfit$), истражена је способност и механизам инкапсулације племенитих гасова од стране криптофана. На основу примењеног модела реакција, праћењем геометријских промене и истраживање нековалентних интеракција између проучаваних криптофана и племенитих гасова, величина домаћина не игра нужно одлучујућу улогу у селективној инкапсулацији племенитих гасова. Пре прилагођавање унутрашњости везивног места и функционализација његове „капије“ могу бити значајне у подешавању афинитета датих криптофана према племенитим гаосвима.

Рад 2.1.13. Три динуклеарна комплекса $[Pd_2(tpbd)Cl_2]Cl_2$ (PP1), $[Pt_2(tpbd)Cl_2]Cl_2$ (PP2) и $[PdPt(tpbd)Cl_2]Cl_2$ (PP3) ($tpbd = N,N,N',N'$ -tetrakis(2-пиридилметил)бензен-1,4-диамин) су синтетизовани и окарактерисани, а одређене су и константе протонације њихових дијакова аналога. Такође, у воденом раствору, аква аналози ових комплекса постоје као моно-хидрокси, ди-хидрокси и димер μ -хидрокси комплекси у рН опсегу између 3,0 и 11,0. Реакције супституције са сумпор- и азот-донорским нуклеофилима, као што су тиоуреа, L-метионин, глутатион и гуанозин-5'-монофосфатом, проучавани су на рН 7,2 конвенционалном UV-Vis спектрофотометријом. Такође, испитиване су и интеракције са ДНК молекулом и албумином говеђег серума (БСА). Комплекси поседују способност да интерагују са ДНК путем интеркалације и везивањем за мали жлеб. Сви комплекси су показали и добар афинитет према БСА при релативно високим константама везивања. Експериментални резултати су упоређени са резултатима молекуларног докинга, док су испитивана и релативна стабилност и термодинамичка својства ових динуклеарних комплекса помоћу DFT прорачуна. Међу три тестирана комплекса, комплекс PP2 је показао снажан цитотоксични ефекат на ћелијске линије рака НТВ140 и Н460 након 48 сати од третмана и извршио је снажан дугорочни утицај на потенцијал пролиферације обе тестиране ћелијске линије.

Рад 2.1.14. Два изомерна криптана 1 (N,N' -bis(2,2'-биоксазол-5,5'-диметил)-2,2'-биоксазол-5,5'-bis(метиламин)) и 2 (N,N' -bis(2,2'-биоксазол-4,4'-диметил)-2,2'-биоксазол-4,4'-bis(метиламин)) су испитани DFT прорачунима (RB3LYP/LANL2DZp). На основу ових структура и енергија одредили смо моделима једначина и структурним поређење са комплексима растварача ($[M(\text{фуран})_n]^{m+}$, $[M(\text{пиридин})_n]^{m+}$ и $[M(NH_3)_n]^{m+}$) јонску селективност од криптана 1 и 2. Криптан 1 показује већи афинитет за катјон натријума и калцијума, скоро подједнако као и стронцијума. Насупрот томе, криптан 2, иако такође показује афинитет катјон натријума од земноалкалних катјона највећи афинитет је показао за катјон магнезијума.

Рад 2.1.15. Овај рад се бави поређењем експериментално добијених кинетичких резултата и теоретских DFT прорачуна, у погледу механистичких информација о реакцијама измене воде и истискивања молекула воде тиоуреом за серију комплекса типа $[Ru^II(terpy)(N^{\wedge}N)(H_2O)]^{2+}$, где је $terpy$ 2,2':6'2''-терпиридин и $N^{\wedge}N$ представља етилендиамина, 2-(аминометил)пиридин, 2,2'-бипиридин, 1,10-фенантролин, и N,N,N',N' -тетраметилетилендиамин. Сви комплекси су изоловани у облику $[Ru(terpy)(N^{\wedge}N)Cl]X$ ($X=Cl^-$ или ClO_4^-) једињења и потпуно окарактерисани у чврстом стању и у раствору. DFT прорачун открио је даљи механистички увид у реакције измене воде, као и реакције истискивања воде помоћу тиоуреа. И експериментални

параметри активације и DFT прорачуни сугеришу асоцијативни механизам супституције за оба проучавана типа реакција.

Рад 2.1.16. Селективна енкапсулација јона алкалних и земноалкалних метала од стране два различита криптанда, означена као [3.2.1] и [4.1.1], истраживана је и између њих упоређивана на основу DFT прорачуна (B3LYP/LANL2DZp). Пошто су ови криптанди изомери добро познатом [2.2.2] криптанду, енкапсулацијом катјона упоређена је селективност сва три споменута криптанда. Селективност јона и способност криптанда да успешно прилагоди своју структуру јону метала, заснована је на енергетским и геометријским критеријумима.

Рад 2.1.17. У оквиру овог рада приказана је синтеза и структурна карактеризација три новосинтетизована комплекса осмијума(II). Урађена је монокристална рендгенска анализа ДМСО адукта комплекса ОсI. Кинетика реакција супституције испитиваних комплекса са биомолекулима L-метионин, глутатион и гуанозин-5'-монофосфатом, су праћене у присуству и одсуству различитих биокомпатибилних јонских течности. Својства везивања испитиваних комплекса за биолошке важне молекуле, ДНК и хумани серумски албумин, су испитиване коришћењем UV-Vis спектрофотометрије, флуоресцентне спектроскопије и гел електрофорезе. Интеракције са ДНК вршене су и у одсуству и у присуству биокомпатибилних јонских течности. Урађени су и експерименти *in vitro* цитотоксичности и редокс статуса на три ћелијске линије рака и на једној здравој ћелијској линији.

Рад 2.1.18. Синтетизована су и карактерисана три рутенијум(III) комплекса. Кинетичка студија реакција супституције испитиваних комплекса са биомолекулима је показала да константе брзине зависе од својстава инертног лиганда, као и природе улазног нуклеофила. Студија везивања за ДНК/ХСА молекуле је показала да у поређењу са комплексом 1, који у својој структури садржи bis-пиразолилпиридин, друга два комплекса 2 и 3, која садрже терпиридин као инертни лиганд, имају нешто бољи афинитет везивања за ДНК молекула, док је у случају хуманог серумског албумина (ХСА) комплекс 1 показао највећи афинитет. Показали смо да комплекс 1 поседује значајну *in vitro* цитотоксичну активност у односу на ћелијске линије карцинома дебелог црева миша и *in vivo* антитуморски активност у хетеротопичном карциному дебелог црева миша.

Рад 2.1.19. Четири нова комплекса платине(II) и паладијума(II), [Pd(L1)Cl]Cl 1, [Pd(L2)Cl]Cl 2, [Pt(L1)Cl]Cl 3, [Pt(L2)Cl]Cl 4 (где је L1 – 2,6-bis(5,6-дифенил-1,2,4-триазин-3-ил)пиридин и L2 – 2,6-bis(5,6-дипропил-1,2,4-триазин-3-ил)пиридин) су синтетисана. Карактеризација комплекса је извршена елементарном анализом, IR, ¹H NMR спектроскопијом и MALDI-TOF масеном спектрометријом. Супституционе реакције комплекса 1 – 4 са L-метионином, L-цистеином и гуанозином-5'-монофосфатом испитиване су спектрофотометријски у физиолошким условима. Комплекси са лигандом L1 (1 или 3) су показали већу реактивност у односу на комплексе са лигандом L2 (2 или 4). Редослед реактивности нуклеофила је опадао у низу L-метионин > L-цистеин > гуанозин-5'-монофосфат. Интеракције комплекса са говеђим ДНК и хуманим серум албумином (ХСА) испитиване су UV-Vis апсорпцијом и мерењем флуоресценције. Резултати су показали да сви испитивани комплекси могу да интерагују са ДНК и интеркалацијом и везивањем у мањем жљебу. Константе везивања (10³ и 10⁴ M⁻¹) за интеракције комплекса са ХСА указују на умерени афинитет везивања комплекса 1 – 4 за протеин. Експериментални резултати везивања

комплекса **3** и **4** за ДНК и ХСА поређени су са резултатима добијеним молекулским докингом. Биолошко испитивање цитотоксичности комплекса **1** и **2** на НСТ-116 и МДА-МВ-231 ћелијским линијама је показало значајну цитотоксичност, док је комплекс **2** показао велику селективност према ћелијској линији канцера дебелог црева у поређењу са ћелијама канцера дојке.

Рад 2.1.20. У циљу напредовања у откривању ефикаснијих начина за елиминацију РОС, који изазива оксидативни стрес или за елиминацију штетних микроорганизама из организма код људи, а имајући у виду чињеницу да Шифове базе спадају у класу биолошки активних једињења, серија Шифових база је синтетизована и тестирана да би се проценила њихова антиоксидативна и антимикуробна активност. За процену антиоксидативног потенцијала проучаваних једињења коришћени су DPPH, супероксид анјон и тест редуције способности. Међу тестираним једињењима, једињење **B1** је показало највећу активност у свим антиоксидативним тестовима. Вредности IC_{50} у способности уклањања радикала DPPH и супероксид анјонских радикала биле су 15,64 $\mu\text{g/mL}$ и 54,72 $\mu\text{g/mL}$ (чак и боље од позитивне контроле аскорбинске киселине). Штавише, ова једињења су имала ефективну редуциону моћ (апсорбанца је била у опсегу 2,415–1,270, у зависности од тестираних концентрација). Висок антиоксидативни ефекат је такође пронађен у једињењима **B2** и **C3**. Преостала тестирана једињења су показала нешто слабију антиоксидативну активност. Поред тога, антиоксидативни капацитет одабраних једињења проучаван је теоријом функционалне густине (DFT). Испитивано је антимикуробно деловање једињења **B1**, **B2** и **C1–4** према осам микроорганизама (четири врсте бактерија и пет врста гљива) методом микродилуције. Међу испитиваним једињењима, **B1** и **B2** су показали изражену антибактеријску активност (вредности MIC су се кретале од 0,15 до 1,25 $\mu\text{g/mL}$), док су једињења **C4** и **B1** показала веома јаку антифунгалну активност (вредности MIC су се кретале од 0,07 до 1,25 $\mu\text{g/mL}$). Урађене су симулације молекуларног докинга да би се боље разумели начини везивања одабраних једињења са ДНК и БСА, као и да би се разумела њихова антиоксидативна или антимикуробна активност.

Рад 2.1.21. Пет нових злато(III) комплекса, опште формуле $[\text{Au}(\text{N-N})\text{Cl}_2]^+$ за комплексе **1–3** и $[\text{Au}(\text{N-N})_2]^{3+}$ за комплексе **4–5** (где је N-N бидентатни лиганд (3-((2-((5-фенил-1H-пиразол-3-ил)метокси)нафтален-3-илокси)метил)-5-фенил-1H-пиразол – лиганд **L1**; (3-((2-((5-фенил-1H-пиразол-3-ил)метокси)феноксид)метил)-5-фенил-1H-пиразол – лиганд **L2**, (3-((2-((5-нафтален-2-ил)-1H-пиразол-3-ил)метокси) феноксид)метил)-5-(нафтален-3-ил)-1H-пиразол – лиганд **L3**), синтетисано је и окарактерисано елементалном микроанализом, ^1H NMR, IR, UV-Vis, ESI-MS и кондуктометријски. Такође, лиганд **L2** је окарактерисан и X-ray анализом. Стабилност комплекса у води и Нерес пуферу потврђена је помоћу UV-Vis спектра. Кинетика и механизам супституционих реакција комплекса **1–3** са гуанозин-5'-монофосфатом, глутатионом и L-метионином испитивана је применом „stopped-flow“ технике. Добијени резултати су показали да је комплекс **1** најреактивнији, док је реактивност нуклеофила опадала у низу глутатион > гуанозин-5'-монофосфат > L-Мет. Израчунате вредности ентропије активирања потврђују асоцијативни механизам супституције. Редокс стабилност комплекса **1–3** испитивана је у присуству истих нуклеофила цикличном волтаметријом. Добијени волтамограми су указали на редуцију злата(III) до злата(0). Испитивање интеракција са ДНК у присуству EB или НОЕ вршена су помоћу UV-Vis, флуоресцентне спектроскопије и мерењем вискозности, у циљу одређивања начина везивања. Резултати су указали на то да злато(III) комплекси радије интерагују са

говеђим ДНК ковалентно него интеркалацијом. Такође, сви комплекси су показали високе вредности за константе везивања за говеђи (БСА) и хумани серум албумин (ХСА). Додатно, интеракције комплекса са ДНК и БСА/ХСА су испитиване и молекулским докингом. Велика повезаност између структуре и реактивности злато(III) комплекса према биолошки важним молекулима је потврђена.

Рад 2.1.22. DFT рачуни на три различита нивоа теорије (B3LYP/LANL2DZp, B3LYP-GD3/LANL2DZp и ω B97XD/def2tzvp) примењени су на различите конформере Lehn-типа макробцикличног полиетар криптатног комплекса $[Kc[2.2.2]]^+$ за конструисање механизма енантиомеризације и израчунавање енергетских баријера промене симетрије комплекса. Промене у конформацији истраживаног комплекса разматрају се према енергетским и геометријским критеријума, где промене у структурама прате редослед промене енергије активације. Истражени D_3 -симетрични криптат комплекса $[Kc[2.2.2]]^+$ показује енантиомеризацију кроз потпуно хирални петостепени пут са два локална минимума (C_2 и C_2') и три прелазна стања C_1 која се завршавају на D_3 -симетричног крипта $[Kc[2.2.2]]^+$. Потенцијална ахирална прелазна стања су стања вишег реда са минимум двоструко вишом енергијом од потпуно хиралне путање. Ова студија недвосмислено објашњава Лехнове NMR податке који показују флуksiјалност проучаваног комплекса. Добијени резултати су додатно рационализовани помоћу анализе декомпозиције енергије и NBO прорачуном.

Рад 2.1.23. Реакције супституције $[Pd(\text{кафеин})_2Cl_2]$ и $[Pt(\text{кафеин})_2Cl_2]$ (кафеин = 1,3,7-триметилксантин) комплекса са био-молекулима, као нпр. 9-метилгуанин и гуанозин-5'-монофосфатом су проучаване спектрофотометријски. Извршена су кинетичка мерења под условима *pseudo*-првог реда. Све реакције су изведене у два реакциона корака. Механизам реакције такође је потврђен протонском нуклеарном магнетном резонанцом и спектроскопијом. Испитиване су и интеракције комплекса са ДНК молекулом и хуманим серумским албумином (ХСА). Комплекси су у интеракцији са ДНК везују преко мањег жлеба, а не интеркалацијом. Високе вредности константи везивања указују на добар афинитет везивања комплекса за ХСА ($10^4 M^{-1}$). Поред тога, експериментални резултати студија везивања комплекса са ДНК и ХСА упоређени су са резултатима молекулског докинга. Цитотоксичност комплекса је тестирана према ћелијским линијама рака дојке код миша и рака дебелог црева као и рак дојке код људи и рак дебелог црева.

Рад 2.1.24. Механизам размене молекула воде код три комплекса $[[Zn(L)H_2O]^{2+} \times H_2O]$ (L = tren: *tris*(2-аминоетил)амин, trep: *tris*(2-фосфиноетил)фосфин, и tres: *tris*(2-арсиноетил)арсин) је проучаван коришћењем DFT прорачуна (B3LYP/6-311+G**) и процењен помоћу MP2 и B3LYP(PCM) енергетских прорачуна. Извршене су тополошке анализе истраживаних комплекса у њиховом основном стању. Енергетски и структурни подаци подржавају асоцијативни механизам размене молекула воде код ових комплекса.

Рад 2.1.25. У овом раду истраживане су реакције измене молекула воде и супституције молекула воде од стране молекула амонијака и тиоформалдехида Ru^{II} комплекса опште формуле $Ru(\text{terpy})(N^{\wedge}N)(H_2O)]^{2+}$ (где је $N^{\wedge}N$ = етилендиамин (en), 1,2-(аминометил)пиридин (ampy) and 2,2'-бипиридин (bipy)). Ове реакције су детаљно проучаване применом концептуалне DFT теорије. Овај приступ нам је омогућио да стекнемо даљи увид у оно што је у основи механизма реакције на микроскопском нивоу (који укључује само директне учеснике реакција, без утицаја растварача) и да

ставимо појам реакционог механизма на квантитативни ниво. Ток хемијске реакције дуж реакционе координате ξ , је рационализован у смислу реакционе енергије, силе, диполног момента и реакционог електронског флукса (РЕФ). Резултати показују на значајан утицај интермолекуларних водоничних веза настала између улазног и инертног лиганда на енергетску реакциону баријеру.

Рад 2.1.26. Два неутрална арен-рутенијум(II) комплекса су синтетизована и окарактерисана. Рендгенска структурна анализа једног комплекса открила је да комплекс осначен као 2 кристалише у моноклинској просторној групи. Мерење реактивности помоћу UV-Vis спектроскопије испитиваних комплекса са 9-метилгуанином, гуанозин-5'-монофосфатом и L-метионином показало је високи афинитет према овим нуклеофилима. Такође, DFT прорачуни са комплексом 2 су показали да реакција са 9-метилгуанином је термодинамички фаворизованија. Надаље, откривено је да комплекси ступају у повољну интеракцију са ДНК молекулом и протеином БСА. Цитотоксичности комплекса 1 и 2 су изучаване према ћелијским линијама рака дојке код људи, ћелијским линијама хуманог рака дебелог црева, хуманим карциномом плућа епителна ћелијска линија, ћелијских линија мишићег меланома и мезенхималним матичним ћелијама и добијени резултати су упоређени са цисплатином. Комплекси показују релевантно високу активности у односу на све ћелијске линије рака.

Рад 2.1.27. Четири нова комплекса бакра(II) са S,O-тетраденатним лигандима, дериватима тиосалицилне киселине, синтетизовани су и окарактерисани. Реактивност комплекса према L-метионину, L-цистеину и гуанозин-5'-монофосфату такође је испитана. Комплекс означен као C1 показује највећу реактивност, док је најмање реактиван комплекс означен као C4. Сви комплекси су показали највећу реактивност према метионину и најмања реактивност према гуанозин-5'-монофосфату. Интеракције комплекса C1-C4 са ДНК молекулом испитана је UV-Vis апсорпцијом и помоћу флуориметрије, откривајући добре способности да интерагују са ДНК молекулом. Сви синтетизовани комплекси показују интеракцију са хуманим серумским албумином при високим вредностима константи везивања. Интеракција комплекса са ДНК/ХСА је такође потврђена коришћењем молекулских докинг симулације. Цитотоксичност комплекса је тестирана према ћелијским линијама рака дебелог црева, рака дојке, као и рака плућа.

Г. Цитираност

Према бази **Scopus** радови др Душана Ћоћића цитирани су до сада **160** пута у међународним часописима (не рачунајући ауцитате). Списак цитираних радова и радова у којима су цитирани (извор ISI Web of Knowledge):

Рад: **Cocic D.**, Jovanovic S., Nisavic M., Baskic D., Todorovic D., Popovic S., Bugarcic Z.D., Petrovic B.

New dinuclear palladium(II) complexes: Studies of the nucleophilic substitution reactions, DNA/BSA interactions and cytotoxic activity

Цитиран је 26 пута, у:

1. Omondi, R.O., Fadaka, A.O., Fatokun, A.A., Jaganyi, D., Ojwach, S.O. Synthesis, substitution kinetics, DNA/BSA binding and cytotoxicity of tridentate N^EN (E = NH, O, S) pyrazolyl palladium(II) complexes (2022) *Journal of Biological Inorganic Chemistry*, 27 (7), pp. 653-664.
2. Dorairaj, D.P., Haribabu, J., Chang, Y.-L., Echeverria, C., Hsu, S.C.N., Karvembu, R. Pd(II)-PPh₃ complexes of halogen substituted acylthiourea ligands: Biomolecular interactions and in vitro anti-proliferative activity (2022) *Applied Organometallic Chemistry*, 36 (8), art. no. e6765,
3. Kuijpers, T., Blom, B. Homo and heterobimetallic palladium and platinum complexes bearing μ -diphosphane bridges involved in biological studies (2021) *European Journal of Medicinal Chemistry*, 223, art. no. 113651,
4. Milić, S.S.J., Jevtić, V.V., Avdović, E.H., Petrović, B., Mededović, M., Petrović, Đ.S., Milovanović, M., Milovanović, J., Arsenijević, N., Stojković, D.L., Radić, G.P., Stanković, M.J. DNA binding, molecular docking study and antitumor activity of [PdCl₂(R₂-(S,S)-edtrp)] complexes (2021) *Monatshefte für Chemie*, 152 (8), pp. 951-958.
5. Ariyo Olusegun, M., Reddy, D., Jaganyi, D. Understanding the role of flexible alkyl- α,ω -diamine linkers on the substitution behaviour of dinuclear trans-platinum(II) complexes: A kinetic and mechanistic study (2021) *Inorganica Chimica Acta*, 523, art. no. 120420,
6. Omondi, R.O., Sibuyi, N.R.S., Fadaka, A.O., Meyer, M., Jaganyi, D., Ojwach, S.O. Role of π -conjugation on the coordination behaviour, substitution kinetics, DNA/BSA interactions, and in vitro cytotoxicity of carboxamide palladium(ii) complexes (2021) *Dalton Transactions*, 50 (23), pp. 8127-8143.
7. Gutiérrez-Tarriño, S., Espino, J., Luna-Giles, F., Rodríguez, A.B., Pariente, J.A., Viñuelas-Zahinos, E. Synthesis, characterization and antiproliferative evaluation of Pt(ii) and Pd(ii) complexes with a thiazine-pyridine derivative ligand (2021) *Pharmaceuticals*, 14 (5), art. no. 395.
8. Alisufi, N., Mansouri-Torshizi, H. Preparation, characterization, DNA/BSA interaction and computational binding analyses of a dinuclear, biopotency Pd+2 coordinated with 1,4-phenylenediamine and ethylenediamine as ligands (2021) *Journal of the Iranian Chemical Society*, 18 (5), pp. 1147-1166.
9. Reigosa-Chamorro, F., Raposo, L.R., Munín-Cruz, P., Pereira, M.T., Roma-Rodrigues, C., Baptista, P.V., Fernandes, A.R., Vila, J.M. In Vitro and in Vivo Effect of Palladacycles: Targeting A2780 Ovarian Carcinoma Cells and Modulation of Angiogenesis (2021) *Inorganic Chemistry*, 60 (6), pp. 3939-3951.

10. Konovalov, B., Franich, A.A., Jovanović, M., Jurisević, M., Gajović, N., Jovanović, M., Arsenijević, N., Maric, V., Jovanović, I., Živković, M.D., Rajković, S.
Synthesis, DNA-/bovine serum albumin-binding affinity, and cytotoxicity of dinuclear platinum(II) complexes with 1,6-naphthyridine-bridging ligand
(2021) Applied Organometallic Chemistry, 35 (3), art. no. e6112.
11. Espino, J., Fernández-Delgado, E., Estirado, S., de la Cruz-Martinez, F., Villa-Carballar, S., Viñuelas-Zahinos, E., Luna-Giles, F., Pariente, J.A.
Synthesis and structure of a new thiazoline-based palladium(II) complex that promotes cytotoxicity and apoptosis of human promyelocytic leukemia HL-60 cells
(2020) Scientific Reports, 10 (1), art. no. 16745.
12. Omondi, R.O., Ojwach, S.O., Jaganyi, D.
Review of comparative studies of cytotoxic activities of Pt(II), Pd(II), Ru(II)/(III) and Au(III) complexes, their kinetics of ligand substitution reactions and DNA/BSA interactions
(2020) Inorganica Chimica Acta, 512, art. no. 119883.
13. Bošković, M., Franich, A.A., Rajković, S., Jovanović, M., Jurisević, M., Gajović, N., Jovanović, M., Arsenijević, N., Jovanović, I., Živković, M.D.
Potential Antitumor Effect of Newly Synthesized Dinuclear 1,5-Naphthyridine-Bridging Palladium(II) Complexes
(2020) ChemistrySelect, 5 (34), pp. 10549-10555.
14. Franich, A.A., Živković, M.D., Milovanović, J., Arsenijević, D., Arsenijević, A., Milovanović, M., Djuran, M.I., Rajković, S.
In vitro cytotoxic activities, DNA- and BSA-binding studies of dinuclear palladium(II) complexes with different pyridine-based bridging ligands
(2020) Journal of Inorganic Biochemistry, 210, art. no. 111158.
15. Karami, K., Jamshidian, N., Bagheri, A., Hajiaghahi, A., Momtazi-Borojeni, A.A., Abdollahi, E., Shahpiri, A., Azizi, N., Lipkowski, J.
Novel fluorescence palladium-alkoxime complexes: Synthesis, characterization, DNA/BSA spectroscopic and docking studies, evaluation of cytotoxicity and DNA cleavage mechanism
(2020) Journal of Molecular Structure, 1206, art. no. 127595.
16. Simović, A.R., Bogojeski, J., Petrović, B., Jovanović-Stević, S.
Bis-pyrazolylpyridine complexes of some transition metal ions: Structure-activity relationships and biological activity
(2020) Macroheterocycles, 13 (3), pp. 201-209.
17. Wei, X., Yang, Y., Ge, J., Lin, X., Liu, D., Wang, S., Zhang, J., Zhou, G., Li, S.
Synthesis, characterization, DNA/BSA interactions and in vitro cytotoxicity study of palladium(II) complexes of hispolon derivatives
(2020) Journal of Inorganic Biochemistry, 202, art. no. 110857.

18. Fiori-Duarte, A.T., Bergamini, F.R.G., de Paiva, R.E.F., Manzano, C.M., Lustri, W.R., Corbi, P.P.
A new palladium(II) complex with ibuprofen: Spectroscopic characterization, DFT studies, antibacterial activities and interaction with biomolecules
(2019) *Journal of Molecular Structure*, 1186, pp. 144-154.
19. Jovanović, S., Bogojeski, J., Nikolić, M.V., Mijajlović, M.Ž., Tomović, D.L., Bukonjić, A.M., Knežević Rangelov, S.M., Mijailović, N.R., Ratković, Z., Jevtić, V.V., Petrović, B., Trifunović, R.S., Novaković, S., Bogdanović, G., Radić, G.P.
Interactions of binuclear copper(II) complexes with S-substituted thiosalicylate derivatives with some relevant biomolecules
(2019) *Journal of Coordination Chemistry*, 72 (10), pp. 1603-1620.
20. Vojtek, M., Marques, M.P.M., Ferreira, I.M.P.L.V.O., Mota-Filipe, H., Diniz, C.
Anticancer activity of palladium-based complexes against triple-negative breast cancer
(2019) *Drug Discovery Today*, 24 (4), pp. 1044-1058.
21. Milutinović, M.M., Čanović, P.P., Stevanović, D., Masnikosa, R., Vraneš, M., Tot, A., Zarić, M.M., Simović Marković, B., Misirkić Marjanović, M., Vučićević, L., Savić, M., Jakovljević, V., Trajković, V., Volarević, V., Kanjevac, T., Rilak Simović, A.
Newly Synthesized Heteronuclear Ruthenium(II)/Ferrocene Complexes Suppress the Growth of Mammary Carcinoma in 4T1-Treated BALB/c Mice by Promoting Activation of Antitumor Immunity
(2018) *Organometallics*, 37 (22), pp. 4250-4266.
22. Besser Silconi, Z., Benazic, S., Milovanovic, J., Jurisevic, M., Djordjevic, D., Nikolic, M., Mijajlovic, M., Ratkovic, Z., Radić, G., Radisavljevic, S., Petrovic, B., Radosavljevic, G., Milovanovic, M., Arsenijevic, N.
DNA binding and antitumor activities of platinum(IV) and zinc(II) complexes with some S-alkyl derivatives of thiosalicylic acid
(2018) *Transition Metal Chemistry*, 43 (8), pp. 719-729.
23. Aneesrahman, K.N., Rohini, G., Bhuvanesh, N.S.P., Sundararaj, S., Musthafa, M., Sreekanth, A.
In Vitro Biomolecular Interaction Studies and Cytotoxic Activities of Newly Synthesised Copper(II) Complexes Bearing 2-Hydroxynaphthaldehyde-Based Thiosemicarbazone
(2018) *ChemistrySelect*, 3 (28), pp. 8118-8130.
24. Zhang, J., Yang, H., Li, D., Dou, J.
Copper(II) complexes based on aminohydroxamic acids: Synthesis, structures, in vitro cytotoxicities and DNA/BSA interactions
(2018) *Crystals*, 8 (5), art. no. 201.
25. Galkina, P.A., Proskurnin, M.A.
Supramolecular interaction of transition metal complexes with albumins and DNA: Spectroscopic methods of estimation of binding parameters
(2018) *Applied Organometallic Chemistry*, 32 (4), art. no. e4150.

26. Radisavljević, S., Bratsos, I., Scheurer, A., Korzekwa, J., Masnikosa, R., Tot, A., Gligorijević, N., Radulović, S., Rilak Simović, A.
New gold pincer-type complexes: Synthesis, characterization, DNA binding studies and cytotoxicity
(2018) Dalton Transactions, 47 (38), pp. 13696-13712.

Rad: **Cocic D.**, Jovanovic S., Rajkovic S., Petrovic B.
Kinetics and mechanism of the substitution reactions of dinuclear platinum(II) complexes with important bio-molecules
Цитиран је 3 пута, у:

1. Ariyo Olusegun, M., Reddy, D., Jaganyi, D.
Understanding the role of flexible alkyl- α,ω -diamine linkers on the substitution behaviour of dinuclear trans-platinum(II) complexes: A kinetic and mechanistic study
(2021) Inorganica Chimica Acta, 523, art. no. 120420.

2. Petrović, B., Jovanović, S., Puchta, R., van Eldik, R.
Mechanistic insight on the chemistry of potential Pt antitumor agents as revealed by collaborative research performed in Kragujevac and Erlangen
(2019) Inorganica Chimica Acta, 495, art. no. 118953.

3. Richert, M., Walczyk, M., Cieślak, M.J., Kaźmierczak-Barańska, J., Królewska-Golińska, K., Wrzeszcz, G., Muzioł, T., Biniak, S.
Synthesis, X-ray structure, physicochemical properties and anticancer activity of: Mer and fac Ru(III) triphenylphosphine complexes with a benzothiazole derivative as a co-ligand
(2019) Dalton Transactions, 48 (28), pp. 10689-10702.

Rad: **Cocic D.**, Jovanovic S., Radisavljevic S., Korzekwa J., Scheurer A., Puchta R., Baskic D., Todorovic D., Popovic S., Matic S. Petrovic B.
Kinetics and mechanism of interactions of some monofunctional Au(III) complexes with sulphur nucleophiles
Цитиран је 39 пута, у:

1. Bhaduri, R., Pan, A., Kumar Tarai, S., Mandal, S., Bagchi, A., Biswas, A., Ch. Moi, S.
In vitro anticancer activity of Pd(II) complexes with pyridine scaffold: Their bioactivity, role in cell cycle arrest, and computational study
(2022) Journal of Molecular Liquids, 367, art. no. 120540.

2. Omondi, R.O., Fadaka, A.O., Fatokun, A.A., Jaganyi, D., Ojwach, S.O.
Synthesis, substitution kinetics, DNA/BSA binding and cytotoxicity of tridentate N^EN (E = NH, O, S) pyrazolyl palladium(II) complexes
(2022) Journal of Biological Inorganic Chemistry, 27 (7), pp. 653-664.

3. Karami, K., Mehvari, F., Ramezanzade, V., Zakariazadeh, M., Kharaziha, M., Ramezanzade, A.
The interaction studies of novel imine ligands and palladium(II) complexes with DNA and BSA for drug delivery application: The anti-cancer activity and molecular docking evaluation
(2022) Journal of Molecular Liquids, 362, art. no. 119493.

4. Bhaduri, R., Mandal, S., Kumar Tarai, S., Pan, A., Mukherjee, S., Bagchi, A., Biswas, A., Ch. Moi, S.
Cytotoxic activity of nitrogen, sulfur, and oxygen chelated Pt(II) complexes; their DNA/BSA binding by in vitro and in silico approaches
(2022) *Journal of Molecular Liquids*, 360, art. no. 119529.
5. Bellam, R., Jaganyi, D., Robinson, R.S.
Heterodinuclear Ru-Pt Complexes Bridged with 2,3-Bis(pyridyl)pyrazinyl Ligands: Studies on Kinetics, Deoxyribonucleic Acid/Bovine Serum Albumin Binding and Cleavage, in Vitro Cytotoxicity, and in Vivo Toxicity on Zebrafish Embryo Activities
(2022) *ACS Omega*, 7 (30), pp. 26226-26245.
6. Xu, R., Hu, D., Lin, J., Tang, J., Zhan, R., Liu, G., Sun, L.
The Critical Role of 12-Methyl Group of Anthracycline Dutomycin to Its Antiproliferative Activity
(2022) *Molecules*, 27 (10), art. no. 3348.
7. Zhang, Y., Liu, P., Majonis, D., Winnik, M.A.
Polymeric dipicolylamine based mass tags for mass cytometry
(2022) *Chemical Science*, 13 (11), pp. 3233-3243.
8. Arafa, W.A.A., Ghoneim, A.A., Mourad, A.K.
N-Naphthoyl Thiourea Derivatives: An Efficient Ultrasonic-Assisted Synthesis, Reaction, and In Vitro Anticancer Evaluations
(2022) *ACS Omega*, 7 (7), pp. 6210-6222.
9. Xiong, X., Liu, L.-Y., Mao, Z.-W., Zou, T.
Approaches towards understanding the mechanism-of-action of metallodrugs
(2022) *Coordination Chemistry Reviews*, 453, art. no. 214311.
10. Sharma, S., Agnihotri, N., Kumar, K., Sihag, S., Randhawa, V., Kaur, R., Singh, R., Kaur, V.
Glutamine conjugated organotin(IV) Schiff base compounds: Synthesis, structure, and anticancer properties
(2022) *Applied Organometallic Chemistry*, 36 (2), art. no. e6521.
11. Pearce, B.H., Joseph, M.C., Nkabyo, H.A., Luckay, R.C.
Pincer-like pyrazole- and imidazole-pyridinyl compounds: Synthesis, characterisation, crystallographic and computational investigation
(2021) *Journal of Molecular Structure*, 1245, art. no. 131147.
12. Chrzanowska, A., Drzewiecka-antonik, A., Dobrzyńska, K., Stefańska, J., Pietrzyk, P., Struga, M., Bielenica, A.
The cytotoxic effect of copper (II) complexes with halogenated 1,3-disubstituted arylthioureas on cancer and bacterial cells
(2021) *International Journal of Molecular Sciences*, 22 (21), art. no. 11415.

13. Milić, S.S.J., Jevtić, V.V., Avdović, E.H., Petrović, B., Mededović, M., Petrović, Đ.S., Milovanović, M., Milovanović, J., Arsenijević, N., Stojković, D.L., Radić, G.P., Stanković, M.J.
DNA binding, molecular docking study and antitumor activity of [PdCl₂(R₂-(S,S)-eddrp)] complexes
(2021) Monatshefte für Chemie, 152 (8), pp. 951-958.
14. Ribeiro, A.G., Alves, J.E.F., Soares, J.C.S., dos Santos, K.L., Jacob, Í.T.T., da Silva Ferreira, C.J., dos Santos, J.C., de Azevedo, R.D.S., de Almeida, S.M.V., de Lima, M.C.A.
Albumin roles in developing anticancer compounds
(2021) Medicinal Chemistry Research, 30 (8), pp. 1469-1495.
15. Omondi, R.O., Sibuyi, N.R.S., Fadaka, A.O., Meyer, M., Jaganyi, D., Ojwach, S.O.
Role of π -conjugation on the coordination behaviour, substitution kinetics, DNA/BSA interactions, and in vitro cytotoxicity of carboxamide palladium(II) complexes
(2021) Dalton Transactions, 50 (23), pp. 8127-8143.
16. Gutiérrez-Tarriño, S., Espino, J., Luna-Giles, F., Rodríguez, A.B., Pariente, J.A., Viñuelas-Zahínos, E. Synthesis, characterization and antiproliferative evaluation of Pt(II) and Pd(II) complexes with a thiazine-pyridine derivative ligand
(2021) Pharmaceuticals, 14 (5), art. no. 395.
17. Pan, A., Mitra, I., Mukherjee, S., Ghosh, S., Chatterji, U., Moi, S.C.
Development of Anticancer Activity of the Pt(II) Complex with N-Heterocyclic Amine: Its in Vitro Pharmacokinetics with Thiol and Thio-Ethers, DNA and BSA Binding, and Cell Cycle Arrest (2021) ACS Applied Bio Materials, 4 (1), pp. 853-868.
18. Su, H.-Q., Zhang, R.-F., Guo, Q., Wang, J., Li, Q.-L., Du, X.-M., Ru, J., Zhang, Q.-F., Ma, C.-L.
Five organotin complexes derived from hydroxycinnamic acid ligands: Synthesis, structure, in vitro cytostatic activity and binding interaction with BSA
(2021) Journal of Molecular Structure, 1247, art. no. 131290.
19. Mirzaei-Kalar, Z., Khandar, A.A., White, J.M., Abolhasani, H., Komeili Movahhed, T., Best, S.P., Jouyban, A.
Investigation of biological activity of nickel (II) complex with naproxen and 1,10-phenanthroline ligands
(2021) Journal of Biomolecular Structure and Dynamics, 39 (18), pp. 6939-6954.
20. Omondi, R.O., Ojwach, S.O., Jaganyi, D.
Review of comparative studies of cytotoxic activities of Pt(II), Pd(II), Ru(II)/(III) and Au(III) complexes, their kinetics of ligand substitution reactions and DNA/BSA interactions
(2020) Inorganica Chimica Acta, 512, art. no. 119883.
21. Ayyannan, G., Mohanraj, M., Gopiraman, M., Uthayamalar, R., Raja, G., Bhuvanesh, N., Nandhakumar, R., Jayabalakrishnan, C.
New Palladium(II) complexes with ONO chelated hydrazone ligand: Synthesis, characterization, DNA/BSA interaction, antioxidant and cytotoxicity
(2020) Inorganica Chimica Acta, 512, art. no. 119868.

22. Aminzadeh, M., Saeidifar, M., Mansouri-Torshizi, H.
Synthesis, characterization, DNA binding, cytotoxicity, and molecular docking approaches of Pd(II) complex with N,O- donor ligands as a novel potent anticancer agent
(2020) *Journal of Molecular Structure*, 1215, art. no. 128212.
23. Omondi, R.O., Bellam, R., Ojwach, S.O., Jaganyi, D., Fatokun, A.A.
Palladium(II) complexes of tridentate bis(benzazole) ligands: Structural, substitution kinetics, DNA interactions and cytotoxicity studies
(2020) *Journal of Inorganic Biochemistry*, 210, art. no. 111156.
24. Dvořáčková, O., Chval, Z.
Tuning the Reactivity and Bonding Properties of Metal Square-Planar Complexes by the Substitution(s) on the Trans-Coordinated Pyridine Ring
(2020) *ACS Omega*, 5 (20), pp. 11768-11783.
25. Zou, B.-Q., Huang, X.-L., Qin, Q.-P., Wang, Z.-F., Wu, X.-Y., Tan, M.-X., Liang, H.
Transition metal complexes with 6,7-dichloro-5,8-quinolinedione as mitochondria-targeted anticancer agents
(2020) *Polyhedron*, 181, art. no. 114482.
26. Simović, A.R., Bogojeski, J., Petrović, B., Jovanović-Stević, S.
Bis-pyrazolylpyridine complexes of some transition metal ions: Structure-activity relationships and biological activity
(2020) *Macrocyclics*, 13 (3), pp. 201-209.
27. Aramesh-Boroujeni, Z., Aramesh, N., Jahani, S., Khorasani-Motlagh, M., Kerman, K., Noroozifar, M. Experimental and computational interaction studies of terbium (III) and lanthanide (III) complexes containing 2,2'-bipyridine with bovine serum albumin and their in vitro anticancer and antimicrobial activities
(2020) *Journal of Biomolecular Structure and Dynamics*, pp. 1-12.
28. Wei, X., Yang, Y., Ge, J., Lin, X., Liu, D., Wang, S., Zhang, J., Zhou, G., Li, S.
Synthesis, characterization, DNA/BSA interactions and in vitro cytotoxicity study of palladium(II) complexes of hispolon derivatives
(2020) *Journal of Inorganic Biochemistry*, 202, art. no. 110857.
29. Patel, N.J., Bhatt, B.S., Patel, M.N.
Heteroleptic N,N-donor pyrazole based Pt(II) and Pd(II) complexes: DNA binding, molecular docking and cytotoxicity studies
(2019) *Inorganica Chimica Acta*, 498, art. no. 119130.
30. Du, X., Wang, S., Zhang, R., Li, Q., Li, Y., Ma, C.
Novel organotin (IV) complexes derived from 4,4'-oxybisbenzoic acid: synthesis, structure, in vitro cytostatic activity and binding interaction with BSA
(2019) *Applied Organometallic Chemistry*, 33 (11), art. no. e5199.

31. Teles, C.M., Lammoglia, L.C., Juliano, M.A., Ruiz, A.L.T.G., Candido, T.Z., de Carvalho, J.E., Lima, C.S.P., Abbehausen, C.
Novel anticancer PdII complexes: The effect of the conjugation of transferrin binding peptide and the nature of halogen coordinated on antitumor activity
(2019) *Journal of Inorganic Biochemistry*, 199, art. no. 110754.
32. Petrović, B., Jovanović, S., Puchta, R., van Eldik, R.
Mechanistic insight on the chemistry of potential Pt antitumor agents as revealed by collaborative research performed in Kragujevac and Erlangen
(2019) *Inorganica Chimica Acta*, 495, art. no. 118953.
33. Facchetti, G., Rimoldi, I.
Anticancer platinum(II) complexes bearing N-heterocycle rings
(2019) *Bioorganic and Medicinal Chemistry Letters*, 29 (11), pp. 1257-1263.
34. Qin, Q.-P., Wang, Z.-F., Wang, S.-L., Luo, D.-M., Zou, B.-Q., Yao, P.-F., Tan, M.-X., Liang, H.
In vitro and in vivo antitumor activities of three novel binuclear platinum(II) complexes with 4'-substituted-2,2':6',2''-terpyridine ligands
(2019) *European Journal of Medicinal Chemistry*, 170, pp. 195-202.
35. Wei, Q.-M., Wang, Z.-F., Qin, Q.-P., Wang, S.-L., Tan, M.-X., Zou, B.-Q., Yao, P.-F., Liang, H.
Inhibition of telomerase activity and SK-OV-3/DDP cell apoptosis by rhodium(III) and iron(III) complexes with 4'-(3-thiophenecarboxaldehyde)-2,2':6',2''-terpyridine
(2019) *Inorganic Chemistry Communications*, 102, pp. 180-184.
36. Zhang, S.-M., Zhang, H.-Y., Qin, Q.-P., Fei, J.-W., Zhang, S.-H.
Syntheses, crystal structures and biological evaluation of two new Cu(II) and Co(II) complexes based on (E)-2-(((4H-1,2,4-triazol-4-yl)imino)methyl)-6-methoxyphenol
(2019) *Journal of Inorganic Biochemistry*, 193, pp. 52-59.
37. Tawfeeq, M.N., Awad, M.A., Majeed, S.R.
Synthesis, spectroscopic study and biological activity for Pd (II) complexes from mixed ligands
(2019) *Biochemical and Cellular Archives*, 19, pp. 2289-2295.
38. Scalese, G., MacHado, I., Correia, I., Pessoa, J.C., Bilbao, L., Pérez-Díaz, L., Gambino, D.
Exploring oxidovanadium(IV) homoleptic complexes with 8-hydroxyquinoline derivatives as prospective antitrypanosomal agents
(2019) *New Journal of Chemistry*, 43 (45), pp. 17756-17773.
39. Rodríguez Arce, E., Putzu, E., Lapier, M., Maya, J.D., Olea Azar, C., Echeverría, G.A., Piro, O.E., Medeiros, A., Sardi, F., Comini, M., Risi, G., Salinas, G., Correia, I., Pessoa, J.C., Otero, L., Gambino, D.
New heterobimetallic ferrocenyl derivatives are promising antitrypanosomal agents
(2019) *Dalton Transactions*, 48 (22), pp. 7644-7658.

Rad: Puchta R., **Cocic D.**, Michel M., van Eldik R.

Host-guest complexes of the Beer-Can-cryptand: prediction of ion selectivity by quantum chemical calculations XI

Цитиран је 3 пута, у:

1. Tkachenko, N.V., Rublev, P., Boldyrev, A.I., Lehn, J.-M.
Superalkali Coated Rydberg Molecules
(2022) *Frontiers in Chemistry*, 10, art. no. 880804.

2. Palmer, U., Puchta, R.
Host-guest complexes of [bfu.bfu.bfu]: Prediction of ion selectivities with quantum-chemical computations XIII [Article@Wirt-Gast-Komplexe von [bfu.bfu.bfu]: Vorhersage von Ionenselektivitäten mittels quantenchemischer Rechnungen XIII]
(2020) *Zeitschrift für Naturforschung - Section B Journal of Chemical Sciences*, 75 (8), pp. 769-775.

3. Hubbard, C.D., Chatterjee, D., Oszajca, M., Polaczek, J., Impert, O., Chrzanowska, M., Katafias, A., Puchta, R., Van Eldik, R.
Inorganic reaction mechanisms. A personal journey
(2020) *Dalton Transactions*, 49 (15), pp. 4599-4659.

Rad: Radisavljevic S., **Cocic D.**, Jovanovic S., Smit B., Petkovic M., Milivojevic N., Planojevic N., Markovic S, Petrovic B.

Synthesis, characterization, DFT study, DNA/BSA-binding affinity, and cytotoxicity of some dinuclear and trinuclear gold(III) complexes

Цитиран је 9 пута, у:

1. Milutinović, M.G., Milivojević, N.N., Đorđević, N.M., Nikodijević, D.D., Radisavljević, S.R., Đeković Kesić, A.S., Marković, S.D.
Gold(III) Complexes with Phenanthroline-derivatives Ligands Induce Apoptosis in Human Colorectal and Breast Cancer Cell Lines
(2022) *Journal of Pharmaceutical Sciences*, 111 (12), pp. 3215-3223.

2. Andleeb, S., Imtiaz-ud-Din, Rauf, M.K., Azam, S.S., Haq, I., Tahir, M.N., Zaman, N.
Structural characterization and antileishmanial activity of newly synthesized organo-bismuth(V) carboxylates: experimental and molecular docking studies
(2022) *Journal of Biological Inorganic Chemistry*, 27 (1), pp. 175-187.

3. Bondžić, A.M., Vasić Aničijević, D.D., Janjić, G.V., Zeković, I., Momić, T., Nikezić, A.V., Vasić, V.M.
Na, k-atpase as a biological target for gold(III) complexes: A theoretical and experimental approach
(2021) *Current Medicinal Chemistry*, 28 (23), pp. 4742-4798.

4. Galassi, R., Luciani, L., Gambini, V., Vincenzetti, S., Lupidi, G., Amici, A., Marchini, C., Wang, J., Pucciarelli, S.
Multi-Targeted Anticancer Activity of Imidazolite Phosphane Gold(I) Compounds by Inhibition of DHFR and TrxR in Breast Cancer Cells
(2021) *Frontiers in Chemistry*, 8, art. no. 602845.

5. Omondi, R.O., Ojwach, S.O., Jaganyi, D.
Review of comparative studies of cytotoxic activities of Pt(II), Pd(II), Ru(II)/(III) and Au(III) complexes, their kinetics of ligand substitution reactions and DNA/BSA interactions
(2020) *Inorganica Chimica Acta*, 512, art. no. 119883

6. Ashraf, R., Iqbal, M.A., Bhatti, H.N., Janjua, M.R.S.A., El-Naggar, M.
Bioactivity and DNA/BSA Interactions of Selenium N-Heterocyclic Carbene Adducts
(2020) *ChemistrySelect*, 5 (35), pp. 10970-10981.

7. Kumar, M., Kumar, G., Masram, D.T.
Copper(ii) complexes containing enoxacin and heterocyclic ligands: Synthesis, crystal structures and their biological perspectives
(2020) *New Journal of Chemistry*, 44 (20), pp. 8595-8613.

8. Radisavljević, S., Petrović, B.
Gold(III) Complexes: An Overview on Their Kinetics, Interactions With DNA/BSA, Cytotoxic Activity, and Computational Calculations
(2020) *Frontiers in Chemistry*, 8, art. no. 379.

9. Tabrizi, L., Abyar, F.
Conjugation of a gold(iii) complex with vitamin B1 and chlorambucil derivatives: Anticancer evaluation and mechanistic insights
(2020) *Metallomics*, 12 (5), pp. 721-731.

Rad Franich A.A., Zivkovic M.D., **Cocic D.**, Petrovic B., Milovanovic M., Arsenijevic A., Milovanovic J., Arsenijevic D., Stojanovic B., Duran I.M., Rajkovic S.
New dinuclear palladium(II) complexes with benzodiazines as bridging ligands: interactions with CT-DNA and BSA, and cytotoxic activity
Цитиран је 19 пута, у:

1. Bhaduri, R., Pan, A., Kumar Tarai, S., Mandal, S., Bagchi, A., Biswas, A., Ch. Moi, S.
In vitro anticancer activity of Pd(II) complexes with pyridine scaffold: Their bioactivity, role in cell cycle arrest, and computational study
(2022) *Journal of Molecular Liquids*, 367, art. no. 120540.

2. Suárez-Moreno, G.V., Hernández-Romero, D., García-Barradas, Ó., Vázquez-Vera, Ó., Rosete-Luna, S., Cruz-Cruz, C.A., López-Monteon, A., Carrillo-Ahumada, J., Morales-Morales, D., Colorado-Peralta, R.
Second and third-row transition metal compounds containing benzimidazole ligands: An overview of their anticancer and antitumour activity
(2022) *Coordination Chemistry Reviews*, 472, art. no. 214790.

3. Chen, S.Y., Ji, X.X., Song, D.X., Chen, Q., Li, Y., Sun, N., Wang, L., Wu, S.Y., Zhang, Y., Zhu, M.C.
A NEW MONOMER Ce(III) COMPLEX BASED ON BIS[(2-PYRIDYL)METHYLENE]PYRIDINE- 2,6-DICARBOHYDRAZONE: SYNTHESIS, DNA BINDING, APOPTOSIS, AND MOLECULAR DOCKING
(2022) *Journal of Structural Chemistry*, 63 (10), pp. 1568-1578.

4. Omondi, R.O., Fadaka, A.O., Fatokun, A.A., Jaganyi, D., Ojwach, S.O.
Synthesis, substitution kinetics, DNA/BSA binding and cytotoxicity of tridentate N^EN (E = NH, O, S) pyrazolyl palladium(II) complexes
(2022) *Journal of Biological Inorganic Chemistry*, 27 (7), pp. 653-664.
5. Sarkar, O., Roy, M., Biswal, D., Ranjan Pramanik, N., Paul, S., Drew, M.G.B., Chakrabarti, S.
Structural Exploration and Protein Binding Efficiencies of Binuclear Dioxidomolybdenum(VI) Complexes Constructed from ONO Chelator and Linear N–N Ditopic Spacer
(2022) *ChemistrySelect*, 7 (30), art. no. e202201412.
6. Dorairaj, D.P., Haribabu, J., Chang, Y.-L., Echeverria, C., Hsu, S.C.N., Karvembu, R.
Pd(II)–PPh₃ complexes of halogen substituted acylthiourea ligands: Biomolecular interactions and in vitro anti-proliferative activity
(2022) *Applied Organometallic Chemistry*, 36 (8), art. no. e6765.
7. Xu, R., Hu, D., Lin, J., Tang, J., Zhan, R., Liu, G., Sun, L.
The Critical Role of 12-Methyl Group of Anthracycline Dutomycin to Its Antiproliferative Activity
(2022) *Molecules*, 27 (10), art. no. 3348.
8. Zhang, Y., Gao, Z., Liu, W., Liu, G., Zhu, M., Wu, S., Yao, W., Gao, E.
Synthesis of copper-based metal-organic framework for sensing nitroaromatic compounds
(2021) *Inorganic Chemistry Communications*, 134, art. no. 109017.
9. Liu, G., Wu, S., Liu, W., Gao, G., Zhang, Y., Gao, E., Zhu, M.
Three novel spiral chain Nd (III) Eu (III) Sm (III) complexes bridged by 1,1'-(1,4-phenylene-bis [methylene])-bis (pyridine-3-carboxylic acid): Synthesis, structural characterization, and antitumor activity
(2021) *Applied Organometallic Chemistry*, 35 (12), art. no. e6427.
10. Czarnomysy, R., Radomska, D., Szewczyk, O.K., Roszczenko, P., Bielawski, K.
Platinum and palladium complexes as promising sources for antitumor treatments
(2021) *International Journal of Molecular Sciences*, 22 (15), art. no. 8271.
11. Omondi, R.O., Sibuyi, N.R.S., Fadaka, A.O., Meyer, M., Jaganyi, D., Ojwach, S.O.
Role of π -conjugation on the coordination behaviour, substitution kinetics, DNA/BSA interactions, and in vitro cytotoxicity of carboxamide palladium(II) complexes
(2021) *Dalton Transactions*, 50 (23), pp. 8127-8143.
12. Feizi-Dehghaneyi, M., Dehghanian, E., Mansouri-Torshizi, H.
A novel palladium(II) antitumor agent: Synthesis, characterization, DFT perspective, CT-DNA and BSA interaction studies via in-vitro and in-silico approaches
(2021) *Spectrochimica Acta - Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy*, 249, art. no. 119215,

13. Konovalov, B., Franich, A.A., Jovanović, M., Jurisević, M., Gajović, N., Jovanović, M., Arsenijević, N., Maric, V., Jovanović, I., Živković, M.D., Rajković, S.
Synthesis, DNA-/bovine serum albumin-binding affinity, and cytotoxicity of dinuclear platinum(II) complexes with 1,6-naphthyridine-bridging ligand
(2021) Applied Organometallic Chemistry, 35 (3), art. no. e6112.

14. Patel, N.J., Bhatt, B.S., Vekariya, P.A., Vaidya, F.U., Pathak, C., Pandya, J., Patel, M.N.
Synthesis, characterization, structural-activity relationship and biomolecular interaction studies of heteroleptic Pd(II) complexes with acetyl pyridine scaffold
(2020) Journal of Molecular Structure, 1221, art. no. 128802.

15. Biswal, D., Roy, M., Pramanik, N.R., Paul, S., Drew, M.G.B., Chakrabarti, S.
The vital role of ditopic: N - N bridging ligands with different lengths in the formation of new binuclear dioxomolybdenum(vi) complexes: Synthesis, crystal structures, supramolecular framework and protein binding studies
(2020) New Journal of Chemistry, 44 (38), pp. 16645-16664.

16. Bošković, M., Franich, A.A., Rajković, S., Jovanović, M., Jurisević, M., Gajović, N., Jovanović, M., Arsenijević, N., Jovanović, I., Živković, M.D.
Potential Antitumor Effect of Newly Synthesized Dinuclear 1,5-Naphthyridine-Bridging Palladium(II) Complexes
(2020) ChemistrySelect, 5 (34), pp. 10549-10555.

17. Franich, A.A., Živković, M.D., Milovanović, J., Arsenijević, D., Arsenijević, A., Milovanović, M., Djuran, M.I., Rajković, S.
In vitro cytotoxic activities, DNA- and BSA-binding studies of dinuclear palladium(II) complexes with different pyridine-based bridging ligands
(2020) Journal of Inorganic Biochemistry, 210, art. no. 111158.

18. Guo, X.-Y., Zhang, J.-D., Li, Y.-Y., Li, X.-J., Meng, X.-R.
Synthesis, structure, and BSA binding studies of a new Co(II) complex based on 2-(1H-tetrazol-1-methyl)-1H-imidazole-4,5-dicarboxylic acid
(2020) Inorganic Chemistry Communications, 119, art. no. 108055.

19. Živković, M.D., Franich, A.A., Ašanin, D.P., Drašković, N.S., Rajković, S., Djuran, M.I.
Hydrolysis of the Amide Bond in L-Methionine- and L-Histidine-Containing Dipeptides in the Presence of Dinuclear Palladium(II) Complexes with Benzodiazines Bridging Ligands
(2020) Journal of Solution Chemistry, 49 (7-8), pp. 1082-1093.

Rad **Cocic D.**, Puchta R., vanEldik R.

Noble guests in organic cages—encapsulation of noble gases by cryptophane

Цитиран је 2 пута, у:

1. Munir, M., Ahsan, F., Yar, M., Ayub, K.
Theoretical investigation of double-cubed polycationic cluster (Sb₇Se₈Cl₂)₃₊ for the storage of helium and neon
(2022) Materials Science in Semiconductor Processing, 148, art. no. 106756.

2. Borocci, S., Grandinetti, F., Sanna, N.

Noble-gas compounds: A general procedure of bonding analysis
(2022) Journal of Chemical Physics, 156 (1), art. no. 014104.

Rad Medjedovic M., Simovic A.R., **Cocic D.**, Milutinovic M., Senft L., Blagojevic S.,
Milivojevic N., Petrovic B.

Dinuclear ruthenium(II) polypyridyl complexes: Mechanistic study with biomolecules,
DNA/BSA interactions and cytotoxic activity

Цитиран је 11 пута, у:

1. Kumar Tarai, S., Mandal, S., Bhaduri, R., Pan, A., Biswas, P., Bhattacharjee, A., Moi, S.C.
Bioactivity, molecular docking and anticancer behavior of pyrrolidine based Pt(II)
complexes: Their kinetics, DNA and BSA binding study by spectroscopic methods
(2023) Spectrochimica Acta - Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy, 287, art.
no. 122059,

2. Hong, H., Lu, Y., Zhu, X., Wu, Q., Jin, L., Jin, Z., Wei, X., Ma, G., Yu, H.
Cytotoxicity of nitrogenous disinfection byproducts: A combined experimental and
computational study
(2023) Science of the Total Environment, 856, art. no. 159273.

3. Lu, Y., Hou, Z., Li, M., Wang, N., Wang, J., Ni, F., Zhao, Y., Zhang, B., Xi, N.
Increasing the cytotoxicity of Ru(ii) polypyridyl complexes by tuning the electron-donating
ability of 1,10-phenanthroline ligands
(2022) Dalton Transactions, 51 (42), pp. 16224-16235.

4. Jahromi, Z.M., Asadi, Z., Eigner, V., Dusek, M., Rastegari, B.
A new phenoxo-bridged dicopper Schiff base complex: Synthesis, crystal structure,
DNA/BSA interaction, cytotoxicity assay and catecholase activity
(2022) Polyhedron, 221, art. no. 115891.

5. Luikham, S., Mavani, A., Bhattacharyya, J.
Deciphering binding affinity, energetics, and base specificity of plant alkaloid Harmane with
AT and GC hairpin duplex DNA
(2022) Luminescence, 37 (5), pp. 691-701.

6. de Almeida, P.S.V.B., de Arruda, H.J., Sousa, G.L.S., Ribeiro, F.V., de Azevedo-França,
J.A., Ferreira, L.A., Guedes, G.P., Silva, H., Kummerle, A.E., Neves, A.P.
Cytotoxicity evaluation and DNA interaction of Ru(II)-bipy complexes containing coumarin-
based ligands.
(2021) Dalton Transactions, 50 (41), pp. 14908-14919.

7. Omondi, R.O., Sibuyi, N.R.S., Fadaka, A.O., Meyer, M., Jaganyi, D., Ojwach, S.O.
Role of π -conjugation on the coordination behaviour, substitution kinetics, DNA/BSA
interactions, and in vitro cytotoxicity of carboxamide palladium(ii) complexes
(2021) Dalton Transactions, 50 (23), pp. 8127-8143.

8. Omondi, R.O., Ojwach, S.O., Jaganyi, D.
Review of comparative studies of cytotoxic activities of Pt(II), Pd(II), Ru(II)/(III) and Au(III) complexes, their kinetics of ligand substitution reactions and DNA/BSA interactions
(2020) *Inorganica Chimica Acta*, 512, art. no. 119883.
9. Akbari Javar, H., Garkani-Nejad, Z., Dehghannoudeh, G., Mahmoudi-Moghaddam, H.
Development of a new electrochemical DNA biosensor based on Eu³⁺-doped NiO for determination of amsacrine as an anti-cancer drug: Electrochemical, spectroscopic and docking studies
(2020) *Analytica Chimica Acta*, 1133, pp. 48-57.
10. Liu, J.-J., Liu, X.-R., Zhao, S.-S., Yang, Z.-W., Yang, Z.
Syntheses, crystal structures, thermal stabilities, CT-DNA, and BSA binding characteristics of a new acylhydrazone and its Co(II), Cu(II), and Zn(II) complexes
(2020) *Journal of Coordination Chemistry*, 73 (7), pp. 1159-1176.
11. Akbari Javar, H., Mahmoudi-Moghaddam, H.
A Label-Free DNA Biosensor for Determination of Topotecan as an Anticancer Drug: Electrochemical, Spectroscopic and Docking Studies
(2020) *Journal of the Electrochemical Society*, 167 (12), art. no. 127502.
- Rad: Radisavljevic S., Dekovic Kesic A., **Cocic D.**, Puchta R., Senft L., Milutinovic M., Milivojevic N., Petrovic B.
Studies of the stability, nucleophilic substitution reactions, DNA/BSA interactions, cytotoxic activity, DFT and molecular docking of some tetra- And penta-coordinated gold(iii) complexes
Цитиран је 9 пута, у:
1. Spectral studies, crystal structures, DNA binding, and anticancer potentials of Pd(II) complexes with iminophosphine ligands: Experimental and computational methods
(2023) *Inorganica Chimica Acta*, 547, art. no. 121368.
2. Milutinović, M.G., Milivojević, N.N., Đorđević, N.M., Nikodijević, D.D., Radisavljević, S.R., Đeković Kesić, A.S., Marković, S.D.
Gold(III) Complexes with Phenanthroline-derivatives Ligands Induce Apoptosis in Human Colorectal and Breast Cancer Cell Lines
(2022) *Journal of Pharmaceutical Sciences*, 111 (12), pp. 3215-3223.
3. Kuranova, N.N., Yarullin, D.N., Zavalishin, M.N., Gamov, G.A.
Complexation of Gold(III) with Pyridoxal 5'-Phosphate-Derived Hydrazones in Aqueous Solution
(2022) *Molecules*, 27 (21), art. no. 7346.
4. Saini, A., Bansal, P.
Quenching Studies as Important Toolkit for Exploring Binding Propensity of Metal Complexes with Serum Albumin and DNA (A Review)
(2022) *Pharmaceutical Chemistry Journal*, 56 (4), pp. 545-558.

5. Vieira Ferreira, W., de Oliveira Amaral, L., Alves Bueno, M., Galdino de Oliveira, B., Beatriz Pereira Mangas, M., Macêdo Soares, S.
Potential scorpionate ligand derived from heterocyclic 2,4(1H,3H)-pyrimidinedithione: Synthesis, spectroscopic characterization and DFT studies.
(2022) Polyhedron, 218, art. no. 115769.

6. Pascual, L.M.H., Boudesocque, S., Dupont, L., Hénon, E., Mohamadou, A., Plantier-Royon, R., Gatard, S.
New Water-Soluble Au(III) Complexes with Xyloside-Based Ligands: Synthesis, Structural Characterization, Solution Studies and Catalytic Evaluation
(2022) European Journal of Inorganic Chemistry.

7. Güngör, S.A., Köse, M., Tümer, M., Bal, M.
Structural characterization, DNA binding properties and molecular docking studies of imine compounds derived from Disperse black 9
(2021) Journal of Molecular Structure, 1243, art. no. 130776.

8. Rosa, L.B., Aires, R.L., Oliveira, L.S., Fontes, J.V., Miguel, D.C., Abbehausen, C.
A "Golden Age" for the discovery of new antileishmanial agents: Current status of leishmanicidal gold complexes and prospective targets beyond the trypanothione system
(2021) ChemMedChem, 16 (11), pp. 1681-1695.

9. Kumar, M., Lal, N., Luthra, P.M., Masram, D.T.
Exploring the binding and cleavage activities of nickel(II) complexes towards DNA and proteins
(2021) New Journal of Chemistry, 45 (15), pp. 6693-6708.

Rad: Petrovic A., Zivanovic M., Puchta R., **Cocic D.**, Scheurer A., Milivojevic N., Bogojeski J.

Experimental and quantum chemical study on the DNA/protein binding and the biological activity of a rhodium(III) complex with 1,2,4-triazole as an inert ligand

Цитиран је 9 пута, у:

1. Nikolic, S., Gazdic-Jankovic, M., Rosic, G., Miletic-Kovacevic, M., Jovicic, N., Nestorovic, N., Stojkovic, P., Filipovic, N., Milosevic-Djordjevic, O., Selakovic, D., Zivanovic, M., Seklic, D., Milivojević, N., Markovic, A., Seist, R., Vasilijic, S., Stankovic, K.M., Stojkovic, M., Lujic, B.

Orally administered fluorescent nanosized polystyrene particles affect cell viability, hormonal and inflammatory profile, and behavior in treated mice.
(2022) Environmental Pollution, 305, art. no. 119206.

2. Wang, Z.-F., Nai, X.-L., Xu, Y., Pan, F.-H., Tang, F.-S., Qin, Q.-P., Yang, L., Zhang, S.-H.
Cell nucleus localization and high anticancer activity of quinoline-benzopyran rhodium(III) metal complexes as therapeutic and fluorescence imaging agents
(2022) Dalton Transactions, 51 (34), pp. 12866-12875.

3. Ugrinovic, V., Panic, V., Spasojevic, P., Seslija, S., Bozic, B., Petrovic, R., Janackovic, D., Veljovic, D.
Strong and tough, pH sensible, interpenetrating network hydrogels based on gelatin and poly(methacrylic acid)
(2022) Polymer Engineering and Science, 62 (3), pp. 622-636.

4. Sumrra, S.H., Zafar, W., Imran, M., Chohan, Z.H.
A review on the biomedical efficacy of transition metal triazole compounds
(2022) *Journal of Coordination Chemistry*, 75 (3-4), pp. 293-334.
5. Elsayed, S.A., Elnabky, I.M., di Biase, A., El-Hendawy, A.M.
New mixed ligand copper(II) hydrazone-based complexes: Synthesis, characterization, crystal structure, DNA/RNA/BSA binding, in vitro anticancer, apoptotic activity, and cell cycle analysis (2022) *Applied Organometallic Chemistry*, 36 (1), art. no. e6481.
6. Alanazi, R.L.B., Zaki, M., Bawazir, W.A.
Synthesis and characterization of new metal complexes containing Triazino[5,6-b]indole moiety: In vitro DNA and HSA binding studies
(2021) *Journal of Molecular Structure*, 1246, art. no. 131203.
7. Shao, J., Zhang, Q., Wei, J., Yuchi, Z., Cao, P., Li, S.-Q., Wang, S., Xu, J.-Y., Yang, S., Zhang, Y., Wei, J.-X., Tian, J.-L.
Synthesis, crystal structures, anticancer activities and molecular docking studies of novel thiazolidinone Cu(II) and Fe(III) complexes targeting lysosomes: special emphasis on their binding to DNA/BSA
(2021) *Dalton Transactions*, 50 (38), pp. 13387-13398.
8. Elsayed, S.A., Badr, H.E., di Biase, A., El-Hendawy, A.M.
Synthesis, characterization of ruthenium(II), nickel(II), palladium(II), and platinum(II) triphenylphosphine-based complexes bearing an ONS-donor chelating agent: Interaction with biomolecules, antioxidant, in vitro cytotoxic, apoptotic activity and cell cycle analysis
9. Haribabu, J., Srividya, S., Mahendiran, D., Gayathri, D., Venkatramu, V., Bhuvanesh, N., Karvembu, R.
Synthesis of Palladium(II) Complexes via Michael Addition: Antiproliferative Effects through ROS-Mediated Mitochondrial Apoptosis and Docking with SARS-CoV-2
(2020) *Inorganic Chemistry*, 59 (23), pp. 17109-17122.
- Rad: **Cocic D.**, Jovanovic-Stevic S., Jelic R., Matic S., Popovic S., Djurdjevic P., Baskic D., Petrovic B.
Homo- And hetero-dinuclear Pt(II)/Pd(II) complexes: Studies of hydrolysis, nucleophilic substitution reactions, DNA/BSA interactions, DFT calculations, molecular docking and cytotoxic activity
Цитиран је 6 пута, у:
1. Mihajlović, K., Joksimović, N., Radisavljević, S., Petronijević, J., Filipović, I., Janković, N., Milović, E., Popović, S., Matić, S., Baskić, D.
Examination of antitumor potential of some acylpyruvates, interaction with DNA and binding properties with transport protein
(2022) *Journal of Molecular Structure*, 1270, art. no. 133943.

2. Bhaduri, R., Mandal, S., Kumar Tarai, S., Pan, A., Mukherjee, S., Bagchi, A., Biswas, A., Ch. Moi, S.

Cytotoxic activity of nitrogen, sulfur, and oxygen chelated Pt(II) complexes; their DNA/BSA binding by in vitro and in silico approaches

(2022) Journal of Molecular Liquids, 360, art. no. 119529.

3. Mandal, S., Reddy B., V.P., Mitra, I., Mukherjee, S., Tarai, S.K., Bhaduri, R., Pan, A., Bose K., J.C., Ghosh, G.K., Moi, S.C.

Anticancer activity and biomolecular interaction of Pt(II) complexes: Their synthesis, characterization and DFT study

(2022) Applied Organometallic Chemistry, 36 (2), art. no. e6506.

4. Ma, L., Li, L., Zhu, G.

Platinum-containing heterometallic complexes in cancer therapy: advances and perspectives

(2022) Inorganic Chemistry Frontiers.

5. İşler, E., Zülfikaroğlu, A., Vural, H., Dege, N.

Synthesis, spectroscopic analyses, DFT calculations and molecular docking studies of Pd(II) complex of hydrazone ligand derived from ethyl carbazate

(2022) Molecular Crystals and Liquid Crystals, 736 (1), pp. 72-92.

6. Ariyo Olusegun, M., Reddy, D., Jaganyi, D.

Understanding the role of flexible alkyl- α,ω -diamine linkers on the substitution behaviour of dinuclear trans-platinum(II) complexes: A kinetic and mechanistic study

(2021) Inorganica Chimica Acta, 523, art. no. 120420.

Rad: **Cocic D.**, Chrzanowska M., Katafias A., Puchta R., van Eldik R.

Tuning the lability of a series of Ru(II) polypyridyl complexes: a comparison of experimental-kinetic and DFT-predicted reaction mechanisms

Цитиран је 1 пут, у:

1. Mutua, G.K., Sitati, M., Onunga, D.O., Jaganyi, D., Mambanda, A.

Tuning the reactivity of ruthenium(II) terpyridyl complexes using auxiliary ligands: kinetic and mechanistic studies

(2022) Reaction Kinetics, Mechanisms and Catalysis, 135 (5), pp. 2379-2400.

Rad: **Cocic D.**, Manaa A., Siegl S., Puchta R., van Eldik R.

*[3.2.1] and [4.1.1] isomers of Lehn's [2.2.2] Cryptand: Prediction of ion selectivity by quantum chemical calculations XV***

Цитиран је 1 пут, у:

1. Tkachenko, N.V., Rublev, P., Boldyrev, A.I., Lehn, J.-M.

Superalkali Coated Rydberg Molecules

(2022) Frontiers in Chemistry, 10, art. no. 880804.

Rad: Petrovic A.Z., **Cocic D.C.**, Bockfeld D., Zivanovic M., Milivojevic N., Virijevec K., Jankovic N., Scheurer A., Vranes M., Bogojeski J.V.

Biological activity of bis(pyrazolopyridine) and terpiridine Os(ii) complexes in the presence of biocompatible ionic liquids

Цитиран је 7 пута, у:

1. Lu, Y., Hou, Z., Li, M., Wang, N., Wang, J., Ni, F., Zhao, Y., Zhang, B., Xi, N.
Increasing the cytotoxicity of Ru(II) polypyridyl complexes by tuning the electron-donating ability of 1,10-phenanthroline ligands
(2022) Dalton Transactions, 51 (42), pp. 16224-16235.
 2. Demetriades, M., Zivanovic, M., Hadjicharalambous, M., Ioannou, E., Ljubic, B., Vucicevic, K., Ivosevic, Z., Dagovic, A., Milivojevic, N., Kokkinos, O., Bauer, R., Vavourakis, V.
Interrogating and Quantifying In Vitro Cancer Drug Pharmacodynamics via Agent-Based and Bayesian Monte Carlo Modelling
(2022) Pharmaceutics, 14 (4), art. no. 749.
 3. Živanović, M.N., Filipovic, N.
Tissue engineering—Electrospinning approach
(2022) Cardiovascular and Respiratory Bioengineering, pp. 213-224.
 4. Mihajlović, K.Z., Divac, V.M., Kostić, M.D., Živanović, M.N., Grujić, J., Virijević, K.
SELENIUM-FUNCTIONALIZED CYCLIC ETHERS DERIVED FROM NATURAL TERPENIC ALCOHOLS – BIOLOGICAL IN VITRO PROFILE
(2022) Macedonian Journal of Chemistry and Chemical Engineering, 41 (1), pp. 89-98.
 5. Branković, J., Milivojevic, N., Milovanovic, V., Simijonovic, D., Petrovic, Z.D., Markovic, Z., Šeklic, D.S., Živanovic, M.N., Vukic, M.D., Petrovic, V.P.
Evaluation of antioxidant and cytotoxic properties of phenolic N-acylhydrazones: Structure-activity relationship
(2022) Royal Society Open Science, 9 (6), art. no. 211853.
 6. Halilagić, A., Selimović, E., Stanković, J.S.K., Srećković, N., Virijević, K., Živanović, M.N., Šmit, B., Soldatović, T.V.
Novel heterometallic Zn(II)-L-Cu(II) complexes: studies of the nucleophilic substitution reactions, antimicrobial, redox and cytotoxic activity
(2022) Journal of Coordination Chemistry, 75 (3-4), pp. 472-492.
 7. Dimic, D.S., Kaluderovic, G.N., Avdovic, E.H., Milenkovic, D.A., Živanovic, M.N., Potocnák, I., Samolová, E., Dimitrijevic, M.S., Saso, L., Markovic, Z.S., Dimitric Markovic, J.M.
Synthesis, Crystallographic, Quantum Chemical, Antitumor, and Molecular Docking/Dynamic Studies of 4-Hydroxycoumarin-Neurotransmitter Derivatives
(2022) International Journal of Molecular Sciences, 23 (2), art. no. 1001.
- Rad: Lazic D., Scheurer A., **Cocic D.**, Milovanovic J., Arsenijevic A., Stojanovic B., Arsenijevic N., Milovanovic M., Rilak Simovic A.
A new bis-pyrazolylpyridine ruthenium(III) complex as a potential anticancer drug: in vitro and in vivo activity in murine colon cancer
Цитиран је 2 пута, у:

1. Ribeiro, N., Farinha, P.F., Pinho, J.O., Luiz, H., Mészáros, J.P., Galvão, A.M., Costa Pessoa, J., Enyedy, É.A., Reis, C.P., Correia, I., Gaspar, M.M.
Metal Coordination and Biological Screening of a Schiff Base Derived from 8-Hydroxyquinoline and Benzothiazole
(2022) *Pharmaceutics*, 14 (12), art. no. 2583.

2. Benniston, A.C., Zeng, L.
Recent advances in photorelease complexes for therapeutic applications
(2022) *Dalton Transactions*, 51 (11).

Rad: Jovanovic-Stevic S., Radisavljevic S., Scheurer A., **Cocic D.**, Smit B., Petkovic M., Zivanovic M.N., Virijevic K., Petrovic B.
Bis(triazinyl)pyridine complexes of Pt(II) and Pd(II): studies of the nucleophilic substitution reactions, DNA/HSA interactions, molecular docking and biological activity
Цитиран је 3 пута, у:

1. Zhang, N., Liu, X.-R., Zhao, S.-S., Yang, Z.-W.
Interactions of novel pyrazole ligand and its transition metal complexes with CT-DNA and BSA: A combination of experimental and computational studies
(2023) *Polyhedron*, 231, art. no. 116273.

2. Jovičić Milić, S.S., Jevtić, V.V., Radisavljević, S.R., Petrović, B.V., Radojević, I.D., Raković, I.R., Petrović, Đ.S., Stojković, D.L., Jurišević, M., Gajović, N., Petrović, A., Arsenijević, N., Jovanović, I., Klisurić, O.R., Vuković, N.L., Vukić, M., Kačaniová, M.
Synthesis, characterization, DNA interactions and biological activity of new palladium(II) complexes with some derivatives of 2-aminothiazoles
(2022) *Journal of Inorganic Biochemistry*, 233, art. no. 111857.

3. Dimitrijević Stojanović, M.N., Franich, A.A., Jurišević, M.M., Gajović, N.M., Arsenijević, N.N., Jovanović, I.P., Stojanović, B.S., Mitrović, S.L., Kljun, J., Rajković, S., Živković, M.D.
Platinum(II) complexes with malonic acids: Synthesis, characterization, in vitro and in vivo antitumor activity and interactions with biomolecules
(2022) *Journal of Inorganic Biochemistry*, 231, art. no. 111773.

Rad: Radisavljevic S., Scheurer A., Bockfeld D., **Cocic D.**, Puchta R., Senft L., Pesic M., Damljanovic I., Petrovic B.
New mononuclear gold(III) complexes: Synthesis, characterization, kinetic, mechanistic, DNA/BSA/HSA binding, DFT and molecular docking studies
Цитиран је 4 пута, у:

1. Zhang, N., Liu, X.-R., Zhao, S.-S., Yang, Z.-W.
Interactions of novel pyrazole ligand and its transition metal complexes with CT-DNA and BSA: A combination of experimental and computational studies.
(2023) *Polyhedron*, 231, art. no. 116273.

2. Kuranova, N.N., Yarullin, D.N., Zavalishin, M.N., Gamov, G.A.
Complexation of Gold(III) with Pyridoxal 5'-Phosphate-Derived Hydrazones in Aqueous Solution
(2022) *Molecules*, 27 (21), art. no. 7346.

3. Jovičić Milić, S.S., Jevtić, V.V., Radisavljević, S.R., Petrović, B.V., Radojević, I.D., Raković, I.R., Petrović, Đ.S., Stojković, D.L., Jurišević, M., Gajović, N., Petrović, A., Arsenijević, N., Jovanović, I., Klisurić, O.R., Vuković, N.L., Vukić, M., Kačaniová, M.
Synthesis, characterization, DNA interactions and biological activity of new palladium(II) complexes with some derivatives of 2-aminothiazoles
(2022) *Journal of Inorganic Biochemistry*, 233, art. no. 111857.

4. Jahromi, Z.M., Asadi, Z., Eigner, V., Dusek, M., Rastegari, B.
A new phenoxo-bridged dicopper Schiff base complex: Synthesis, crystal structure, DNA/BSA interaction, cytotoxicity assay and catecholase activity
(2022) *Polyhedron*, 221, art. no. 115891.

Rad: Joksimovic N., Petronijevic J., **Cocic D.**, Jankovic N., Milovic E., Kosanic M., Petrovic N.
Synthesis, characterization, biological evaluation, BSA binding properties, density functional theory and molecular docking study of Schiff bases.

Цитиран је 4 пута, у:

1. Fan, M., Yang, W., Peng, Z., He, Y., Wang, G.
Chromone-based benzohydrazide derivatives as potential α -glucosidase inhibitor: Synthesis, biological evaluation and molecular docking study
(2023) *Bioorganic Chemistry*, 131, art. no. 106276.

2. Peng, Z., Wang, G., He, Y., Wang, J.J., Zhao, Y.
Tyrosinase inhibitory mechanism and anti-browning properties of novel kojic acid derivatives bearing aromatic aldehyde moiety.
(2023) *Current Research in Food Science*, 6, art. no. 100421.

3. Çakmak, R., Başaran, E., Şentürk, M.
Synthesis, characterization, and biological evaluation of some novel Schiff bases as potential metabolic enzyme inhibitors
(2022) *Archiv der Pharmazie*, 355 (4), art. no. 2100430.

4. Abdulsattar, M.A., Almaroof, N.M., Mahmood, T.H.
Hemoglobin interaction with formaldehyde in cigarette smoke: A DFT study
(2022) *International Journal of Chemical and Biochemical Sciences*, 21, pp. 328-334.

Rad: Balovic J., **Cocic D.**, Dordevic S., Radenkovic S., van Eldik R., Puchta R.
A theoretical mechanistic study of $[K \subset [2.2.2]]^+$ enantiomerization

Цитиран је 1 пут, у:

1. Cheng, X., Li, F., Zhao, Y., Cheng, X., Nie, K., Han, Y., Yang, Y.
Stability, atomic charges, bond-order analysis, and the directionality of lone-electron pairs on nitriles and isocyanides
(2022) *Journal of Physical Organic Chemistry*, 35 (12), art. no. e4420.

Rad: Zivanovic A.S., Bukonjic A.M., Jovanovic-Stevic S., Bogojeski J., Cocic D., Bijelic A.P., Ratkovic Z.R., Volarevic V., Miloradovic D., Tomovic D. Lj. Radic G.P.

Complexes of copper(II) with tetradentate S,O-ligands: Synthesis, characterization, DNA/albumin interactions, molecular docking simulations and antitumor activity

Цитиран је 1 пут, у:

1. Zhang, N., Liu, X.-R., Zhao, S.-S., Yang, Z.-W.

Interactions of novel pyrazole ligand and its transition metal complexes with CT-DNA and BSA: A combination of experimental and computational studies.

(2023) Polyhedron, 231, art. no. 116273.

Д. Мишљење и предлог комисије

Научни допринос др Душана Ћоћића огледа се, пре свега, у систематичном проучавању интеракција моно- и полинуклеарних комплекса платине(II) и паладијума(II) са различитим биомолекулима. Примарни циљ развоја нових платина(II) и паладијум(II) комплекса је проналазак једињења које ће поседовати антитуморску активност према туморима који су резистентни на једињења платине, док је секундарни циљ смањена токсичност једињења.

Полинуклеарни комплекси платине(II) и паладијума(II) спадају у трећу генерацију потенцијалних антитуморских лекова, који се налазе у фази предклиничког испитивања. Ова једињења у својој структури могу да садрже два или више јона метала који су међусобно повезани помоћу мостних лиганата. Као мостни лиганди највише су заступљени флексибилни алифатични диамини или крути мостни лиганди, попут молекула азола и азина. Велико интересовање за изучавање полинуклеарних комплекса платине(II) је последица њихове способности да са молекулом ДНК формирају производе који се структурно разликују од оних које формирају цисплатина и слични комплекси. С обзиром да полинуклеарни комплекси у растворима постоје у катјонском облику, њихова растворљивост у води је већа у односу на неутралне мононуклеарне комплексе. Поред тога, ћелије тумора показују мању резистентност према полинуклеарним комплексима платине(II) у односу на мононуклеарне комплексе.

Након открића антитуморске активности цисплатине дошло је до наглог развоја медицинске неорганске хемије. Примарни циљ истраживања у овој области јесте проналажење комплекса са ширим спектром деловања, мањом резистентношћу и мањом токсичношћу у односу на цисплатину и друге антитуморски активне комплексе платине. У складу с тим, комплексна једињења других јона прелазних метала почела су интензивно да се испитују као агенси за лечење различитих обољења (артритиса, тумора, дијабетеса итд.).


Др Душан Ћоћић је до сада објавио двадесет и седам научних радова (један из категорије **M21a**, десет из категорије **M21**, девет из категорије **M22** и седам из категорије **M23**), три рада у часопису од националног значаја (**M53**), дванаест саопштења на међународним научним конференцијама штампана у изводу (**M34**) и десет саопштења на националним научним конференцијама штампана у изводу (**M64**). Укупна вредност коефицијента М за до сада постигнуте резултате износи **167** док нормирани М фактор износи **135,63**.

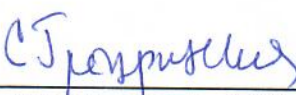
научноистраживачким радом у области неорганске хемије, сваком проблему приступа савесно и успешно, влада методологијом истраживања која је праћена модерним истраживачким техникама. Поред тога, др Душан Ђоћић је показао смисао и да стечено знање преноси на студенте и млађе колеге, будући да је активно ангажован у извођењу експерименталних вежби на ОАС и МАС хемије на Природно-математичком факултету.

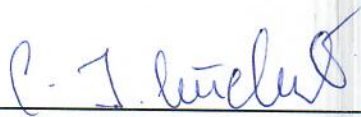
На основу претходно изнетих чињеница, а у складу са **Законом о научноистраживачкој делатности** („Службени гласник РС”, бр. 110/05 и 50/06-исправка), може се закључити да је др Душан Ђоћић, испунио све услове за избор у звање *научни сарадник за научну област Хемија*. Сходно томе, комисија са задовољством предлаже Наставно-научном већу Природно-математичког факултета у Крагујевцу да прихвати предлог за избор кандидата др Душан Ђоћића у научно звање *научни сарадник за научну област Хемија* и упути га надлежној комисији Министарства просвете, науке и технолошког развоја Републике Србије.

У Крагујевцу,
09. 02. 2023. године

КОМИСИЈА

1. 
Проф. др Биљана Петровић, председник комисије
Природно-математички факултет, Универзитет у Крагујевцу
Ужа научна област: Неорганска хемија

2. 
Проф. др Сања Гргурић Шипка, члан комисије
Хемијски факултет, Универзитет у Београду
Ужа научна област: Неорганска хемија

3. 
Доц. др Снежана Јовановић-Стевић, члан комисије
Факултет медицинских наука, Универзитет у Крагујевцу
Ужа научна област: Примењена хемија