

**СРПСКО КРИСТАЛОГРАФСКО ДРУШТВО**  
**SERBIAN CRYSTALLOGRAPHIC SOCIETY**

**XXVII КОНФЕРЕНЦИЈА**  
**СРПСКОГ КРИСТАЛОГРАФСКОГ ДРУШТВА**

**Изводи радова**

**27<sup>th</sup> CONFERENCE OF THE**  
**SERBIAN CRYSTALLOGRAPHIC SOCIETY**

**Abstracts**

**Крагујевац – Kragujevac**  
**2021.**

**XXVII КОНФЕРЕНЦИЈА СРПСКОГ КРИСТАЛОГРАФСКОГ ДРУШТВА**  
**Изводи радова**

**27<sup>th</sup> CONFERENCE OF THE SERBIAN CRYSTALLOGRAPHIC SOCIETY**  
**Abstracts**

**Издавач - Publisher:**

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

**За издавача – For the publisher:**

Марија Станић – Marija Stanić

**Уредник – Editor:**

Верица Јевтић – Verica Jevtić

**Технички уредник – Technical editor:**

Маја Ђукић – Maja Đukić

Издавање ове публикације омогућено је финансијском помоћи Министарства просвете,  
науке и технолошког развоја Републике Србије

The publication is financially supported by Ministry of Education, Science and  
Technological development, Republic of Serbia

© Српско кристалографско друштво – Serbian Crystallographic Society

ISBN 978-86-6009-085-2

ISSN 0354-5741

**Штампа – Printing:**

Природно-математички факултет, Радоја Домановића 12, Крагујевац, Србија  
Faculty of Science, Radoje Domanović 12, Kragujevac, Serbia

Тираж – Copies: 50

Крагујевац – Kragujevac

2021.

**XXVII КОНФЕРЕНЦИЈА  
СРПСКОГ КРИСТАЛОГРАФСКОГ ДРУШТВА**

**27<sup>th</sup> CONFERENCE OF THE  
SERBIAN CRYSTALLOGRAPHIC SOCIETY**

**НАУЧНИ ОДБОР / SCIENTIFIC COMMITTEE:**

др Љиљана Карановић, РГФ Београд / dr Ljiljana Karanović, FMG Belgrade  
др Тамара Тодоровић, ХФ Београд / dr Tamara Todorović, FC Belgrade  
др Марко Родић, ПМФ Нови Сад / dr Marko Rodić, FS Novi Sad  
др Душан Велковић, ХФ Београд / dr Dušan Veljković, FC Belgrade  
др Оливера Клисурић, ПМФ Нови Сад / dr Olivera Klisurić, FS Novi Sad  
др Јелена Роган, ТМФ Београд / dr Jelena Rogan, FTM Belgrade  
др Горан Богдановић, ИНН „ВИНЧА” / dr Goran Bogdanović, INS "Vinča"  
др Александар Кременовић, РГФ Београд / dr Aleksandar Kremenović, FMG Belgrade  
др Братислав Антић, ИНН „ВИНЧА” / dr Bratislav Antić, INN "Vinča"  
др Снежана Зарић, ХФ Београд / dr Snežana Zarić, FC Belgrade  
др Катарина Анђелковић, ХФ Београд / dr Katarina Anđelković, FC Belgrade  
др Срђан Ракић, ПМФ Нови Сад / dr Srđan Rakić, FS Novi Sad  
др Наташа Јовић Орсини, ИНН „ВИНЧА” / dr Nataša Jović Orsini, INS "Vinča"  
др Александра Дапчевић, ТМФ Београд / dr Aleksandra Dapčević, FTM Belgrade

**ОРГАНИЗАЦИОНИ ОДБОР / ORGANIZATION COMMITTEE:**

др Верица Јевтић, ПМФ Крагујевац / dr Verica Jevtić, FS Kragujevac  
др Гордана Радић, ФМН Крагујевац / dr Gordana Radić, FMS Kragujevac  
др Аница Глођовић, ПМФ Крагујевац / dr Anica Glidović, FS Kragujevac  
др Андрија Ћирић, ПМФ Крагујевац / dr Andrija Ćirić, FS Kragujevac  
др Марина Ћендић Серафиновић, ПМФ Крагујевац / dr Marina Ćendić Serafinović, FS Kragujevac  
др Марија Ристић, ПМФ Крагујевац / dr Marija Ristić, FS Kragujevac  
др Емина Мркалић, ИИТ Крагујевац / dr Emina Mrkalić, ИТ Кragujevac  
др Данијела Стојковић, ИИТ Крагујевац / dr Danijela Stojković, ИТ Кragujevac  
др Едина Авдовић, ИИТ Крагујевац / dr Edina Avdović, ИТ Кragujevac  
др Маја Ђукић, ПМФ Крагујевац / dr Маја Đukić, FS Kragujevac  
Сандра Јовичић Милић, ПМФ Крагујевац / Sandra Jovičić Milić, FS Kragujevac  
Ђорђе Петровић, ПМФ Крагујевац / Đorđe Petrović, FS Kragujevac  
Маријана Касаловић, ПМФ Крагујевац / Marijana Kasalović, FS Kragujevac  
Марко Радовановић, ПМФ Крагујевац / Marko Radovanović, FS Kragujevac  
Игњат Филиповић, ПМФ Крагујевац / Ignjat Filipović, FS Kragujevac

## ОРГАНИЗАТОРИ



СРПСКО КРИСТАЛОГРАФСКО ДРУШТВО  
SERBIAN CRYSTALLOGRAPHIC SOCIETY



ПРИРОДНО-МАТЕМАТИЧКИ ФАКУЛТЕТ  
УНИВЕРЗИТЕТ У КРАГУЈЕВЦУ  
FACULTY OF SCIENCE  
UNIVERSITY OF KRAGUJEVAC

## ПОКРОВИТЕЉ



МИНИСТАРСТВО ПРОСВЕТЕ, НАУКЕ И  
ТЕХНОЛОШКОГ РАЗВОЈА РЕПУБЛИКЕ СРБИЈЕ  
MINISTRY OF EDUCATION, SCIENCE AND  
TECHNOLOGICAL DEVELOPMENT OF THE  
REPUBLIC OF SERBIA

## САДРЖАЈ – CONTENT

### PLENARNA PREDAVANJA - PLENARY LECTURES

**G. N. Kaluderović**

IMMOBILIZATION OF THE ANTITUMOR ACTIVE COMPOUNDS INTO SBA-15..... 2

**Н. Филиповић**

(1,3-THIAZOLYL/SELENAZOYL-2-YL)HYDRAZONES AND THEIR COMPLEXES: OD STRUKTURE DO POTENCIJALNE PRIMENE..... 4

**N. Filipović**

(1,3-THIAZOLYL/SELENAZOYL-2-YL)HYDRAZONES AND THEIR COMPLEXES: FROM STRUCTURE TO POTENTIAL APPLICATION..... 5

**C. S. B. Gomes**

IMINOPYRROLYL-NICKEL AND BORON COMPLEXES: STRUCTURE-PROPERTY RELATIONSHIP ANALYSIS AND APPLICATIONS IN LUMINESCENCE AND CATALYSIS..... 6

### USMENA SAOPŠTENJA - ORAL PRESENTATIONS

**A. Mašulović, J. Ladarević, L. Radovanović, K. Gak Simić, N. Trišović, J. Rogan, D. Mijin**  
SAMOORGANIZACIJA PAKOVANJA DIPOL-JON PIRIDONA PREKO MOLEKULA VODE..... 10

**A. Mašulović, J. Ladarević, L. Radovanović, K. Gak Simić, N. Trišović, J. Rogan, D. Mijin**  
WATER ASSISTED ASSEMBLY OF PYRIDONE ZWITTERIONS..... 11

**Александра Ракић, Марија Петковић Benazzouz, Немања Тришовић, Горан Јањић**  
ФЛУОРОВАЊЕ АЛИФАТИЧНИХ ЈЕДИЊЕЊА. ПОКРЕТАЧКА СИЛА У КРИСТАЛНИМ СТРУКТУРАМА..... 12

**Aleksandra Rakić, Marija Petković Benazzouz, Nemanja Trišović, Goran Janjić**  
FLUORINATION OF ALIPHATIC COMPOUNDS. DRIVING FORCE IN CRYSTAL STRUCTURES..... 13

**А. Б. Ђуновић, Д. С. Кретић, И. С. Вељковић, Д. Ж. Вељковић**  
УЛОГА НЕКОВАЛЕНТНИХ ИНТЕРАКЦИЈА У КОНТРОЛИ ОСЕТЉИВОСТИ ВИСОКОЕНЕРГЕТСКИХ МОЛЕКУЛА КА ДЕТОНАЦИЈИ..... 14

**A. B. Đunović, D. S. Kretić, I. S. Veljković, D. Ž. Veljković**  
ROLE OF NONCOVALENT INTERACTIONS IN THE CONTROL OF THE SENSITIVITY OF HIGH ENERGETIC MOLECULES TOWARDS DETONATION..... 15

**I. Potočňák, A. Lüköová, E. Samol'ová**  
KOMPLEKSI PALADIJUMA SA 7-BROMO-HINOLIN-8-OL..... 16

<b>I. Potočňák, A. Lüköová, E. Samoľová</b> PALLADIUM COMPLEXES WITH 7-BROMO-QUINOLIN-8-OL.....	17
<b>N. Milojković, M. Orlić, J. Dikić, M. Žunić, B. Simović, A. Dapčević</b> CINK-ORTOTITANAT SA ANTIBAKTERIJSKIM SVOJSTVIMA.....	18
<b>N. Milojković, M. Orlić, J. Dikić, M. Žunić, B. Simović, A. Dapčević</b> ANTIBACTERIAL ZINC ORTHOTITANATE.....	19
<b>Nikola Radnović, Chris Hawes, Marko Rodić</b> SINTEZA I STRUKTURA KOMPLEKSA Cu(II) SA BIS(4-KARBOKSI-BENZIL) AMONIJUM-HLORIDOM.....	20
<b>Nikola Radnović, Chris Hawes, Marko Rodić</b> SYNTHESIS AND STRUCTURE OF Cu(II) COMPLEX WITH BIS(4-CARBOXY-BENZYL) AMMONIUM CHLORIDE.....	21
<b>POSTERSKA SAOPŠTENJA - POSTER PRESENTATIONS</b>	
<b>К. Гак Симић, А. Лазић, Ј. Радовановић, Ј. Роган, Г. Јањић, И. Ђорђевић, Н. Тришовић</b> СУПРАМОЛЕКУЛСКА ОРГАНИЗАЦИЈА 3-(4-ХЛОРБЕНЗОИЛ)-1,3-ДИАЗА- СПИРО[4.5]ДЕКАН-2,4-ДИОНА.....	24
<b>К. Gak Simić, A. Lazić, L. Radovanović, J. Rogan b, G. Janjić, I. Đorđević, N. Trišović</b> SUPRAMOLECULAR ASSOCIATION IN 3-(4-CHLOROBENZOYL)-1,3- DIAZASPIRO[4.5]DECANE-2,4- DIONE.....	25
<b>Т. Адејумо, Д. Радановић, М. Златар, М. Груден, К. Анђелковић, Б. Чобелјић</b> СИНТЕЗА, КАРАКТЕРИЗАЦИЈА И DFT ПРОРАЧУНИ БИНУКЛЕАРНОГ КОМПЛЕКСА Mn(II) СА ШИФОВИМ БАЗАМА.....	26
<b>T. Adejumo, D. Radanović, M. Zlatar, M. Gruden, K. Andelković, B. Čobeljić</b> SYNTHESIS, CHARACTERIZATION AND DFT CALCULATIONS OF DINUCLEAR SCHIFF BASE Mn(II) COMPLEX.....	27
<b>D. Stojković, V. Jevtić, Đ. Petrović, S. Jovičić Milić, N. Vuković, M. Vukić, M. Đukić, O. Klisurić</b> SINTEZA I KRISTALNA STRUKTURA 2-ACETILBUTIROLAKTONA SA METIL ESTROM L-TRIFTOFANA.....	28
<b>D. Stojković, V. Jevtić, Đ. Petrović, S. Jovičić Milić, N. Vuković, M. Vukić, M. Đukić, O. Klisurić</b> SYNTHESIS AND CRYSTAL STRUCTURE OF 2-ACETYL BUTYROLACTONE WITH METHYL ESTER OF L-TRYPTOPHANE.....	29
<b>Đ. Petrović, V. Jevtić, S. Jovičić Milić, D. Stojković, O. Klisurić</b> SINTEZA I KRISTALNA STRUKTURA PROPILENDIAMIN-N,N'-DI-2-(3-METIL)- BUTANSKE KISELINE.....	30

<b>Đ. Petrović, V. Jevtić, S. Jovičić Milić, D. Stojković, O. Klisurić</b> SYNTHESIS AND CRYSTAL STRUCTURE OF PROPYLENEDIAMINE- <i>N,N'</i> -DI-2-(3-METHYL)-BUTANOATE ACID.....	31
<b>E. H. Avdović, K. Molčanov, Ž. B. Milanović, M. Antonijević, D. Simijonović, D. Milenković, Z. S. Marković</b> SINTEZA I KRISTALNA STRUKTURA (E)-3-(1-((4-HIDROKSI-3-METOKSIFENIL)AMINO)-ETILIDEN) HROMAN-2,4-DIONA.....	32
<b>E. H. Avdović, K. Molčanov, Ž. B. Milanović, M. Antonijević, D. Simijonović, D. Milenković, Z. S. Marković</b> SYNTHESIS AND CRYSTAL STRUCTURE (E)-3-(1-((4-HYDROXY-3-METHOXYPHENYL)AMINO)-ETHYLIDENE) CHROMANE-2,4-DIONE.....	33
<b>G. Janjić, I. Đorđević, A. Lazić, L. Radovanović, M. Petković-Benazzouz, J. Rogan, N. Trišović</b> UTICAJ HALOGENOVANJA AROMATIČNOG PRSTENA NA KONFORMACIJU SPIROHIDANTOINSKIH JEDINJENJA.....	34
<b>G. Janjić, I. Đorđević, A. Lazić, L. Radovanović, M. Petković-Benazzouz, J. Rogan, N. Trišović</b> INFLUENCE OF HALOGENATION OF AROMATIC RING ON THE CONFORMATION OF SPIROHYDANTOIN COMPOUNDS.....	35
<b>J. Ladarević, L. Radovanović, B. Božić, A. Mašulović, J. Rogan, D. Mijin</b> KRISTALNA STRUKTURA I ANTIOKSIDATIVNA AKTIVNOST Cu(II) KOMPLEKSA AZO PIRIDONSKE BOJE.....	36
<b>J. Ladarević, L. Radovanović, B. Božić, A. Mašulović, J. Rogan, D. Mijin</b> CRYSTAL STRUCTURE AND ANTIOXIDANT ACTIVITY OF Cu(II) COMPLEX OF AZO PYRIDONE DYE.....	37
<b>Јована Арашков, Александар Вишњевац, Тамара Тодоровић, Ненад Филиповић</b> МОЛЕКУЛСКЕ И КРИСТАЛНЕ СТРУКТУРЕ КОМПЛЕКСА Zn(II) СА ТИАЗОЛИЛ-ХИДРАЗОНИМА.....	38
<b>Jovana Araškov, Aleksandar Višnjevac, Tamara Todorović, Nenad Filipović</b> MOLECULAR AND CRYSTAL STRUCTURES OF Zn(II) COMPLEXES WITH THIAZOLYL-HYDRAZONES.....	39
<b>М. Јевтовић, Н. Стевановић, Д. Радановић, Д. Сладић, К. Анђелковић, Б. Чобелјић</b> КОМПЛЕКСИ Zn(II) СА ШИФОВИМ БАЗАМА КООРДИНАЦИОНОГ БРОЈА ПЕТ.....	40
<b>M. Jevtović, N. Stevanović, D. Radanović, D. Sladić, K. Anđelković, B. Čobeljić</b> SCHIFF BASE Zn(II) COMPLEXES WITH COORDINATION NUMBER FIVE.....	41
<b>L. Radovanović, I. Đorđević, M. V. Rodić, J. Rogan</b> KRISTALNA STRUKTURA KOKRISTALA 2,2'-DIPYRIDILAMIN-DIETIL-BARBITURNE KISELINE.....	42

<b>L. Radovanović, I. Đorđević, M. V. Rodić, J. Rogan</b> CRYSTAL STRUCTURE OF 2,2'-DIPYRIDYLAMINE-DIETHYLBARBITURIC ACID CO-CRYSTAL.....	43
<b>Lj. Suručić, T. Tadić, A. Nastasović, B. Marković, Z. Sandić, A. Onjia, G. Janjić</b> ZAMENA SUMPORA SELENOM. EFEKAT POLARNIH GRUPA IZ OKRUŽENJA.....	44
<b>Lj. Suručić, T. Tadić, A. Nastasović, B. Marković, Z. Sandić, A. Onjia, G. Janjić</b> SUBSTITUTION OF SULFUR BY SELENIUM. EFFECT OF POLAR GROUPS FROM THE ENVIRONMENT.....	45
<b>Љ. Кузмановић, М. Ковачевић</b> ПРИМЕНА ФОТОНСКИХ КРИСТАЛА У ОПТИЧКИМ ВЛАКНИМА.....	46
<b>Lj. Kuzmanović, M. Kovačević</b> APPLICATION OF PHOTONIC CRYSTALS IN OPTICAL FIBERS.....	47
<b>M. Petković Benazzouz, A. Rakić, N. Trišović, G. Janjić, M. Sarvan</b> FLUORINACIJA AROMATIČNIH GRUPA. EFEKAT KOORDINOVANJA NA ATOM FLUORA.....	48
<b>M. Petković Benazzouz, A. Rakić, N. Trišović, G. Janjić, M. Sarvan</b> FLUORINATION OF AROMATIC GROUPS. THE EFFECTS OF COORDINATION ON FLUORINE INTERACTIONS.....	49
<b>Марко Радовановић, Марија Ристић, Маја Ђукић, Игњат Филиповић, Frank W. Heinemann, Зоран Матовић</b> СИНТЕЗА И КРИСТАЛНА СТРУКТУРА <i>cis</i> -equatorial-Na[Rh(Hed3ap)Cl]·2,22H <sub>2</sub> O КОМПЛЕКСА.....	50
<b>Marko Radovanović, Marija Ristić, Maja Đukić, Ignjat Filipović, Frank W. Heinemann, Zoran Matović</b> SYNTHESIS AND CRYSTAL STRUCTURE OF <i>cis</i> -equatorial- Na[Rh(Hed3ap)Cl]·2,22H <sub>2</sub> O COMPLEX.....	51
<b>M. Harmošová, E. Samořová, M. Litecká, N. Kuncová, I. Potočňák</b> MOLEKULSKI, JONSKI I POLIMERNI KOMPLEKSI CINKA SA NITRODERIVATIMA HINOLIN-8-OL.....	52
<b>M. Harmošová, E. Samořová, M. Litecká, N. Kuncová, I. Potočňák</b> MOLECULAR, IONIC AND POLYMERIC COMPLEXES OF ZINC WITH NITRODERIVATIVES OF QUINOLIN-8-OL.....	53
<b>M. Matiková Mařarová, K. Lacková, I. Potočňák</b> STRUKTURNA RAZLIČITOST Cu(II)-phen-C(CN) <sub>3</sub> SISTEMA.....	54
<b>M. Matiková Mařarová, K. Lacková, I. Potočňák</b> STRUCTURAL DIVERSITY OF Cu(II)-phen-C(CN) <sub>3</sub> SYSTEM.....	55
<b>Н. Јовић Орсини, М. М. Милић</b> ЦИНКОМ СУПСТИТУИСАНЕ НАНОЧЕСТИЦЕ ГВОЖЂЕ ОКСИДА ОБЛИКА ОБЛУТКА ЗА МАГНЕТНУ ХИПЕРТЕРМИЈУ - ИЗ ОРГАНСКЕ У ВОДЕНУ СУСПЕНЗИЈУ ГРАЂЕЊЕМ TiO <sub>2</sub> -ГВОЖЂЕ ОКСИД КОМПОЗИТА.....	56

<p><b>N. Jović Orsini, M. M. Milić</b>                      ZINC SUBSTITUTED IRON OXIDE NANOPEBBLES FOR MAGNETIC HYPERTHERMIA FROM ORGANIC TO AQUEOUS MEDIUM BY BUILDING TiO<sub>2</sub>-IRON OXIDE COMPOSITES.....</p>	57
<p><b>Н. Даниловић, А. Јанићијевић, Т. Б. Миладиновић</b>                      КРИСТАЛИЗАЦИОНА ПОЛИЦА.....</p>	58
<p><b>N. Danilović, A. Janićijević, T. B. Miladinović</b>                      CRYSTALLIZATION SHELF.....</p>	59
<p><b>N. Stevanović, J. Kljun, T. Andrejević, D. Ašanin, I. Turel, M. Djuran, B. Glišić</b>                      SINTEZA I KRISTALNA STRUKTURA KOMPLEKSA SREBRA(I) SA ANTIFUNGALNIM AGENSOM EKONZOLOM.....</p>	60
<p><b>N. Stevanović, J. Kljun, T. Andrejević, D. Ašanin, I. Turel, M. Djuran, B. Glišić</b>                      SYNTHESIS AND CRYSTAL STRUCTURE OF A SILVER(I) COMPLEX WITH ANTIFUNGAL AGENT ECONAZOLE.....</p>	61
<p><b>T. P. Andrejević, J. Kljun, D. P. Ašanin, N. Lj. Stevanović, I. Turel, M. I. Djuran, B. Đ. Glišić</b>                      SINTEZA I KRISTALNA STRUKTURA KOMPLEKSA SREBRA(I) SA DIMETIL 6-(PIRAZIN-2-IL)PIRIDIN-3,4-DIKARBOKSILATOM.....</p>	62
<p><b>T. P. Andrejević, J. Kljun, D. P. Ašanin, N. Lj. Stevanović, I. Turel, M. I. Djuran, B. Đ. Glišić</b>                      SYNTHESIS AND CRYSTAL STRUCTURE OF A SILVER(I) COMPLEX WITH DIMETHYL 6-(PYRAZIN-2-YL)PYRIDINE-3,4-DICARBOXYLATE.....</p>	63
<p><b>Предраг Ристић, Павле Павловић, Марија Станишић, Радивоје Продановић, Милош Огњановић, Вељко Ђокић, Тамара Тодоровић</b>                      УТИЦАЈ АНЈОНА, ПУФЕРА И ДЕТЕРГЕНТА НА ТОПОЛОГИЈУ И МОРФОЛОГИЈУ ZIF-8 КРИСТАЛИТА.....</p>	64
<p><b>Predrag Ristić, Pavle Pavlović, Marija Stanišić, Radivoje Prodanović, Miloš Ognjanović, Veljko Đokić, Tamara Todorović</b>                      INFLUENCE OF ANIONS, BUFFER AND DETERGENT ON TOPOLOGY AND MORPHOLOGY OF ZIF-8 CRYSTALLITES.....</p>	65
<p><b>S. Jovičić Milić, V. Jevtić, Đ. Petrović, D. Stojković, N. Vuković, M. Vukić, O. Klisurić, M. Kačaniová</b>                      SINTEZA I KRISTALNA STRUKTURA KOMPLEKSA PALADIJUM(II) JONA SA 2-AMINO-6-HLOROBENZOTIAZOLOM.....</p>	66
<p><b>S. Jovičić Milić, V. Jevtić, Đ. Petrović, D. Stojković, N. Vuković, M. Vukić, O. Klisurić, M. Kačaniová</b>                      SYNTHESIS AND CRYSTAL STRUCTURE COMPLEX OF PALLADIUM(II) ION WITH 2-AMINO-6-CHLOROBENZOTIAZOLE.....</p>	67
<p><b>С. Марковић, А. Вишњевац, Т. Тодоровић, Н. Филиповић</b>                      МОЛЕКУЛСКЕ И КРИСТАЛНЕ СТРУКТУРЕ КОМПЛЕКСА Cd(II) СА ТИАЗОЛИЛ-ХИДРАЗОНИМА.....</p>	68

<b>S. Marković, A. Višnjevac, T. Todorović, N. Filipović</b> MOLECULAR AND CRYSTAL STRUCTURES OF Cd(II) COMPLEXES WITH THIAZOLYL-HYDRAZONES.....	69
<b>С. Б. Новаковић, Г. А. Богдановић, З. Д. Петровић, Д. Симијонових,</b> <b>В. М. Миловановић, Ј. Бранковић, В. П. Петровић</b> КРИСТАЛНЕ СТРУКТУРЕ ДВА МЕТОКСИБЕНЗЕН-ПИРАЗОЛОНСКА ДЕРИВАТА.....	70
<b>S. B. Novaković, G. A. Bogdanović, Z. D. Petrović, D. Simijonović, V. M. Milovanović,</b> <b>J. Branković, V. P. Petrović</b> CRYSTAL STRUCTURES OF TWO METHOXYBENZENE-PYRAZOLONE DERIVATIVES.....	71
<b>B. Simović, G. Branković, A. Dapčević</b> FOTOKATALITIČKA RAZGRADNJA BOJE RO16 POMOĆU HIDROTERMALNO SINTETISANIH KOMPOZITA CeO <sub>2</sub> /ZnO.....	72
<b>B. Simović, G. Branković, A. Dapčević</b> PHOTOCATALYTIC DEGRADATION OF RO16 DYE USING HYDROTHERMALLY SYNTHESIZED CeO <sub>2</sub> /ZnO COMPOSITES.....	73
<b>М. М. Милић</b> УРЕЂЕЊЕ КИСЕОНИКА И ФОРМИРАЊЕ –U ЦЕНТРА У YBa <sub>2</sub> Cu <sub>3</sub> O <sub>6+x</sub> СУПЕРПРОВОДНИКУ.....	74
<b>М. М. Milić</b> OXYGEN ORDERING AND FORMATION OF –U CENTERS IN THE YBa <sub>2</sub> Cu <sub>3</sub> O <sub>6+x</sub> SUPERCONDUCTOR.....	75
<b>М. Milojević, B. Maksimović, B. Vučetić, M. Mitrović, A. Žekić</b> UTICAJ MAGNETNOG POLJA NA RASPODELE BRZINA RASTA MALIH KRISTALA NATRIJUM-HLORATA.....	76
<b>M. Milojević, B. Maksimović, B. Vučetić, M. Mitrović, A. Žekić</b> INFLUENCE OF MAGNETIC FIELD ON GROWTH RATE DISTRIBUTIONS OF SMALL SODIUM CHLORATE CRYSTALS.....	77
<b>Д. Б. Нинковић, А. Б. Ђуновић, Д. Ж. Вељковић</b> УТИЦАЈ ХАЛОГЕНОГ ВЕЗИВАЊА НА ОСЕТЉИВОСТ КА ДЕТОНАЦИЈИ ВИСОКОЕНЕРГЕТСКИХ МОЛЕКУЛА.....	78
<b>D. B. Ninković, A. B. Đunović, D. Ž. Veljković</b> INFLUENCE OF HALOGEN BONDING ON THE SENSITIVITY OF HIGH-ENERGY MOLECULES TOWARDS DETONATION.....	79
<b>М. Russin, A. Lüköová, S. Drweesh, E. Samol'ová, M. Litecká, I. Potočňák</b> JONSKI KOMPLEKSI PALADIJUMA SA 5-HLORO-8-HIDROKSIHINOLINOM I RAZLIČITIM KATJONIMA.....	80
<b>M. Russin, A. Lüköová, S. Drweesh, E. Samol'ová, M. Litecká, I. Potočňák</b> IONIC PALLADIUM COMPLEXES WITH 5-CHLORO-8-HYDROXYQUINOLINE AND DIFFERENT CATIONS.....	81

## CONTENT

---

<b>M. M. Radanović, M. V. Rodić, Lj. S. Vojinović-Ješić, M. S. Kostić, D. Gazdić, V. M. Leovac</b> SINTEZA I STRUKTURA TETRANUKLEARNOG KOMPLEKSA CINKA SA ŠIFOVOM BAZOM AMINOGVANIDINA.....	82
<b>M. M. Radanović, M. V. Rodić, Lj. S. Vojinović-Ješić, M. S. Kostić, D. Gazdić, V. M. Leovac</b> SYNTHESIS AND STRUCTURE OF TETRANUCLEAR ZINC COMPLEX WITH SCHIFF BASE OF AMINOGUANIDINE.....	83
<b>P. Dabić, S. Kovač, A. Kremenović</b> KRISTALNE STRUKTURE $Cs_2HoSi_4O_{10}F$ I $Cs_2TmSi_4O_{10}F$ .....	84
<b>P. Dabić, S. Kovač, A. Kremenović</b> CRYSTAL STRUCTURES OF $Cs_2HoSi_4O_{10}F$ AND $Cs_2TmSi_4O_{10}F$ .....	85



**PLENARNA PREDAVANJA**  
**PLENARY LECTURES**

## IMMOBILIZATION OF THE ANTITUMOR ACTIVE COMPOUNDS INTO SBA-15

**G. N. Kaluderović**

Department of Engineering and Natural Sciences, University of Applied Sciences Merseburg,  
Eberhard-Leibnitz-Straße 2, 06217 Merseburg, Germany  
e-mail: goran.kaluderovic@hs-merseburg.de

Cisplatin, conventional therapeutic, is one of the most effective and commonly used agents in treatment of various types of cancers [1]. Undesirably, beneficial effects of cisplatin are followed by severe toxicity and/or by spontaneous or acquired resistance [2].

Silica-based materials are already highly promising candidates in several fields of medicine, but in cancer therapy there have been relatively few investigations [2]. These nontoxic materials have large external surfaces and porous cores, and may be functionalized with small molecules and used as drug carriers. The rationale of loading of highly active anticancer compounds into particles lie in the following: prevention of hydrolysis and accumulation in the healthy tissues/organs, tailorable drug release, as well as local application in tumor tissues in high doses. SBA-15 or its functionalized forms have a great impact on the mechanism of action of metal-based (e.g. cisplatin, ruthenium(II), organotin(IV) compounds) or natural occurring compounds (e.g. emodin) [3-9] (Figure 1).

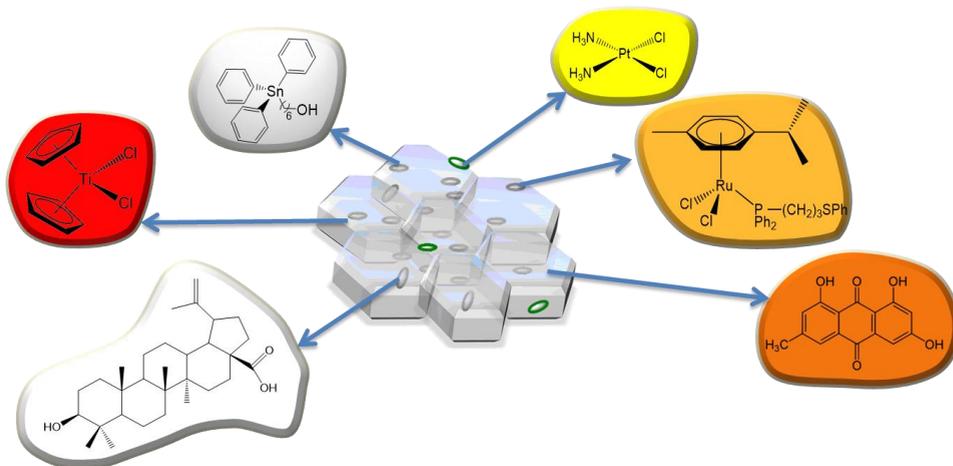


Figure 1. Overview of some SBA-15 particles loaded with various metal-based and natural occurring compounds.

For instance, SBA-15 loaded with cisplatin induced senescence in survived clones of B16F10 mouse melanoma cells [3]. Outstandingly, SBA-15 boosted *in vivo* activity of cisplatin in melanoma C57Bl6 mice model and diminished side effects of cisplatin [4].

SBA-15 grafted with  $\text{Ph}_3\text{Sn}(\text{CH}_2)_6\text{OH}$  triggers apoptosis in B16 cells followed by the development of a nonproliferative melanocyte-like phenotype of surviving cells [5]. Moreover, same nanomaterial almost completely abolished tumor progression *in vivo* in melanoma syngeneic C57BL/6 mouse model without visible side effects.  $\text{Ph}_3\text{Sn}(\text{CH}_2)_3\text{OH}$  loaded into SBA-15 reduces metastatic potential of highly invasive serous ovarian carcinoma A2780 cells [6]. Importantly, functionalization of SBA-15 has an influence on the mode of action and differentiation inducing properties [7]. SBA-15 potentiates action of  $[\text{Ru}(\eta^6\text{-}p\text{-cymene})\text{Cl}_2\{\text{Ph}_2\text{P}(\text{CH}_2)_3\text{SPh-}\kappa\text{P}\}]$  and emodin against B16 cells [8,9]. These approaches present a safer mode in tumor treatment compared to induced apoptosis alone. Superiority from the classical metal-based drugs reflects not only in reducing tumor volume without signs of toxicity but, more importantly, they are inducing differentiations of the tumor cells to the normal phenotype.

## REFERENCES

- [1] S. Ghosh, *Bioorg. Chem.* 88 (2019) 102925.
- [2] S. Sears, L. Siskind, *J. Am. Soc. Nephrol.* (2021) ASN.2020101455
- [3] D. Edeler, M. R. Kaluđerović, B. Dojčinović, H. Schmidt, G. N. Kaluđerović, *RSC Advances* 6 (2016) 111031.
- [4] D. Drača, D. Edeler, M. Saoud, B. Dojčinović, D. Dunderović, G. Đmura, D. Maksimović-Ivanić, S. Mijatović, G. N. Kaluđerović, *J. Inorg. Biochem.* 217 (2021) 111383;
- [5] M. Z. Bulatović, D. Maksimović-Ivanić, C. Bensing, S. Gómez-Ruiz, D. Steinborn, H. Schmidt, M. Mojić, A. Korać, I. Golić, D. Pérez-Quintanilla, M. Momčilović, S. Mijatović, G. N. Kaluđerović, *Angew. Chem. Int. Ed.* 53 (2014) 5982.
- [6] C. Bensing, M. Mojić, S. Gómez-Ruiz, S. Carralero, D. Maksimović-Ivanić, S. Mijatović, G. N. Kaluđerović, *Dalton Trans.* 45 (2016) 18984.
- [7] D. Edeler, D. Drača, V. Petković, F. Natalio, D. Maksimović-Ivanić, S. Mijatović, H. Schmidt, G. N. Kaluđerović, *Mat. Sci. Eng. C* 100 (2019) 315-322.
- [8] D. Edeler, S. Arlt, V. Petković, G. Ludwig, D. Drača, D. Maksimović-Ivanić, S. Mijatović, G. N. Kaluđerović, *J. Inorg. Biochem.* 180 (2018) 155-162.
- [9] T. Krajnović, D. Maksimović-Ivanić, S. Mijatović, D. Drača, K. Wolf, D. Edeler, L. A. Wessjohann, G. N. Kaluđerović, *Nanomaterials* 8 (2018,) 322.

## (1,3-ТИАЗОЛИЛ/СЕЛЕНАЗОИЛ-2-ИЛ)ХИДРАЗОНИ И ЊИХОВИ КОМПЛЕКСИ: ОД СТРУКТУРЕ ДО ПОТЕНЦИЈАЛНЕ ПРИМЕНЕ

Ненад Филиповић

Катедра за хемију и биохемију, Универзитет у Београду – Пољопривредни факултет,  
Немањина 6, Београд – Земун, Србија  
e-mail: nenadf@agrif.bg.ac.rs

1,3-Тиазолски прстен је добро позната фармакофора у медицинској хемији. Саставни је део многих биолошки активних молекула као што су витамин Б1, сулфатиазол (антимикробни лек), ритонавир (антиретровирусни лек), абафунгин и равуконазол (антифунгални лекови), блеомицин, тиазофурин и дасатиниб (антинеопластични лекови), нитазоксанид (антипаразитни лек) итд. (1,3-Тиазолил-2-ил) хидразони (ТХ) су деривати тиазола који су показали обећавајућу биолошку активност, укључујући антиканцерогену, антимикробну и антипаразитску активност. ТХ инхибирају различите ензиме који су препознати као главне мете код дијабетеса типа 2 ( $\alpha$ -амилаза и  $\alpha$ -глукозидаза), неуродегенеративних поремећаја (моноаминооксидаза А/Б и ацетилхолинестераза) и канцера (ткивно неспецифична алкална фосфатаза, интестинална алкална фосфатаза,  $\beta$ -глукуронидаза и екто-5'-нуклеотидаза). С друге стране, њихови селенски аналози (1,3-селеназоил-2-ил) хидразони (СХ) су мање истражени [1].

ТХ и СХ и њихови комплекси метала су последњих година предмет опсежних студија у нашој групи [1-5]. Осим биолошке активности, недавно смо започели истраживања у вези са могућом применом комплекса метала ТХ као фотокатализатора и фотолуминесцентних материјала. Ова презентација ће дати преглед нашег рада у овој области са кристалографског, физичко-хемијског и биолошког становишта.

- [1] J. B. Araškov, M. Nikolić, S. Armaković, S. Armaković, M. Rodić, A. Višnjevac, J. M. Padrón, T. R. Todorović, N. R. Filipović, *Journal of Molecular Structure*, **1240** (2021) 130512.
- [2] H. Elshafly, T. Todorović, M. Nikolić, A. Lolić, A. Višnjevac, S. Hagenow, J. M. Padrón, A. T. García-Sosa, I. Đorđević, S. Grubišić, H. Stark, Nenad Filipović, *Frontiers in Chemistry*, **6** (2018) 247.
- [3] A. Borges, M. Simões, T. R. Todorović, N. R. Filipović, A. T. García-Sosa, *Molecules*, **23** (2018) 1385.
- [4] N. R. Filipović, H. Elshafly, S. Grubišić, Lj. S. Jovanović, M. Rodić, I. Novaković, A. Malešević, I. S. Đorđević, H. Li, N. Šojić, A. Marinković, T. R. Todorović, *Dalton Transactions*, **46** (2017) 2910–2924.
- [5] H. Elshafly, S. Bjelogrić, C. D. Muller, T. R. Todorović, M. Rodić, A. Marinković, N. R. Filipović, *Journal of Coordination Chemistry*, **69** (2016) 3354–3366.

## (1,3-THIAZOLYL/SELENAZOYL-2-YL)HYDRAZONES AND THEIR COMPLEXES: FROM STRUCTURE TO POTENTIAL APPLICATION

Nenad Filipović

*Department of Chemistry and Biochemistry, University of Belgrade – Faculty of Agriculture, Nemanjina 6, Belgrade – Zemun, Serbia*  
e-mail: nenadf@agrif.bg.ac.rs

1,3-Thiazole ring is well established pharmacophore in medicinal chemistry. It can be found in many biologically active molecules such as vitamin B1, sulfathiazol (antimicrobial drug), ritonavir (antiretroviral drug), abafungin and ravuconazole (antifungal drugs), bleomycin, tiazofurin and dasatinib (antineoplastic drugs), nitazoxanide (antiparasitic agent) etc. (1,3-Thiazolyl-2-yl)hydrazones (THs) are thiazole derivatives which showed promising biological activities including anticancer, antimicrobial, and antiparasitic. THs inhibit various enzymes which are recognized as type-2 diabetes mellitus ( $\alpha$ -amylase and  $\alpha$ -glucosidase), neurodegenerative disorders (monoamine oxidase A/B and acetylcholinesterase) and cancer (tissue-nonspecific alkaline phosphatase, intestinal alkaline phosphatase,  $\beta$ -glucuronidase, and ecto-5'-nucleotidase) related targets. On the other hand, their selenium analogues (1,3-selenazoil-2-yl)hydrazones (SHs) have been investigated in lesser extent [1].

THs and SHs and their metal complexes are the subject of extensive studies in our group in recent years [1-5]. Besides biological activity, recently we have started investigations regarding the potential application of THs metal complexes as photocatalists and photoluminescent materials. This presentation will give an overview of our work in this field from the crystallographic, physico-chemical, and biological point of view.

- [1] J. B. Araškov, M. Nikolić, S. Armaković, S. Armaković, M. Rodić, A. Višnjevac, J. M. Padrón, T. R. Todorović, N. R. Filipović, *Journal of Molecular Structure*, **1240** (2021) 130512.
- [2] H. Elshaflu, T. Todorović, M. Nikolić, A. Lolić, A. Višnjevac, S. Hagenow, J. M. Padrón, A. T. García-Sosa, I. Đorđević, S. Grubišić, H. Stark, Nenad Filipović, *Frontiers in Chemistry*, **6** (2018) 247.
- [3] A. Borges, M. Simões, T. R. Todorović, N. R. Filipović, A. T. García-Sosa, *Molecules*, **23** (2018) 1385.
- [4] N. R. Filipović, H. Elshaflu, S. Grubišić, Lj. S. Jovanović, M. Rodić, I. Novaković, A. Malešević, I. S. Đorđević, H. Li, N. Šojić, A. Marinković, T. R. Todorović, *Dalton Transactions*, **46** (2017) 2910–2924.
- [5] H. Elshaflu, S. Bjelogrić, C. D. Muller, T. R. Todorović, M. Rodić, A. Marinković, N. R. Filipović, *Journal of Coordination Chemistry*, **69** (2016) 3354–3366.

## IMINOPYRROLYL-NICKEL AND BORON COMPLEXES: STRUCTURE-PROPERTY RELATIONSHIP ANALYSIS AND APPLICATIONS IN LUMINESCENCE AND CATALYSIS

C. S. B. Gomes<sup>a,b,c</sup>

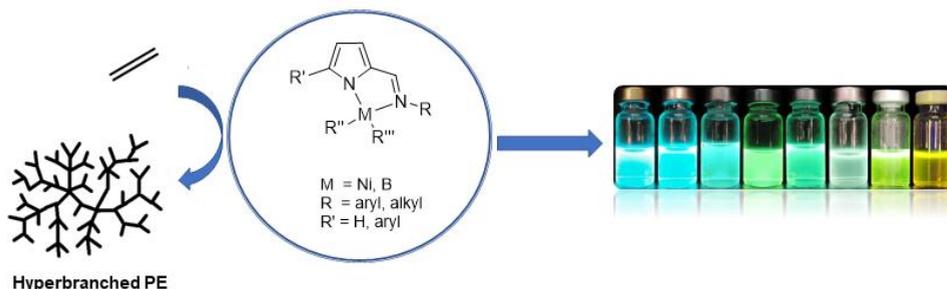
<sup>a</sup> LAQV-REQUIMTE, Department of Chemistry, NOVA School of Science and Technology, Universidade Nova de Lisboa, 2829-516 Caparica, Portugal;

<sup>b</sup> Associate Laboratory i4HB - Institute for Health and Bioeconomy, School of Science and Technology, NOVA University Lisbon, 2819-516 Caparica, Portugal

<sup>c</sup> UCIBIO – Applied Molecular Biosciences Unit, Department of Chemistry, School of Science and Technology, NOVA University Lisbon, 2819-516 Caparica, Portugal

e-mail: clara.gomes@fct.unl.pt

*N,N'*-chelating ligands of the type 2-iminopyrrolyl are of great interest in the areas of organometallic and coordination chemistry because of their high versatility and tunability. Over the years, complexes bearing these ligands have been mainly used as polymerization catalysts. The developments in olefin polymerization catalyzed by late transition metal complexes as homogeneous catalytic systems led to new polyolefin materials with novel characteristics [1]. In this context, hyperbranched polyethylenes have unique chain architectures that confer distinctive physical properties (e.g. low viscosity, good solubility), which could be used in specialty applications such as lubricants [2]. We have been developing Ni(II) complexes with bulky 2-iminopyrrolyl ligands to be applied as aluminum-free catalysts in the polymerization of ethylene [3]. The catalytic tests performed revealed the PE products obtained are highly branched, exhibiting up to 160-170 branches/1000C, which are values higher than the ones reported for similar systems [4]. On the other hand, luminescent organoboron compounds are efficient emitters for Organic Light-Emitting Diode (OLED) applications (e.g. flat panel displays, lighting, etc.), and tetracoordinate mononuclear boron compounds containing chelating N,O-, N,N- and N,C- chromophores are one such family of emitters [5]. Variations on the chromophore part of the molecule influences the HOMO–LUMO energies and thereby the color of emission. The iminopyrrole ligand precursors are one such synthons where the electronic and steric nature can be fine-tuned easily. Taking this into account, a series of B(III) derivatives have been prepared using different strategic approaches [6]. The ligand precursors are non-emissive while most of their boron complexes are highly fluorescent. DFT and TD-DFT calculations were performed in order to rationalize the obtained results.



Herein, a structure-property relationship analysis of these Ni(II) and B(III) systems, and the results obtained on their application as homogeneous polymerization catalyst and in the fabrication of OLEDs will be presented and discussed.

Acknowledgements: We thank Fundação para a Ciência e Tecnologia for financial support (Projects PTDC/QUI-QIN/31585/2017, UIDB/00100/2020 and UIDP/00100/2020, UIDB/50006/2020 and UIDP/50006/2020, UIDB/04378/2020 and UIDP/04378/2020).

- [1] H. Mu, L. Pan, D. Song, Y. Li, *Chem. Rev.* **115** (2015) 12091–12137.
- [2] Z. Dong, Z. Ye, *Polym. Chem.* **3** (2012) 286–301.
- [3] (a) C. A. Figueira, P. S. Lopes, C. S. B. Gomes, J. C. S. Gomes, F. Lemos, P. T. Gomes, *Dalton Trans.* **47** (2018), 15857–15872; (b) C. A. Figueira, P. S. Lopes, C. S. B. Gomes, J. C. S. Gomes, L. F. Veiros, F. Lemos, P. T. Gomes, *Organometallics* **38** (2019) 614–625.
- [4] (a) D. Zhang, E. T. Nades, M. Brookhart, O. Daugulis, *Organometallics* **32** (2013) 5136–5143; (b) C. J. Stephenson, J. P. McInnis, C. Chen, M. P. Weberski, Jr., A. Motta, M. Delferro, T. J. Marks, *ACS Catal.* **4** (2014) 999–1003.
- [5] (a) B. J. Liddle, R. M. Silva, T. J. Morin, F. P. Macedo, R. Shukla, S. V. Lindeman, J. R. Gardinier, *J. Org. Chem.* **72** (2007) 5637–5646. (b) H. Amarne, C. Baik, S. K. Murphy, S. Wang, *Chem. Eur. J.* **16** (2010) 4750–4761.
- [6] (a) C. S. B. Gomes *et al.*, *Dalton Trans.* **41** (2012) 8502–8505; (b) C. S. B. Gomes *et al.*, *Chem. Eur. J.* **20** (2014) 4126–4140; (c) C. S. B. Gomes *et al.*, *Chem. Eur. J.* **21** (2015) 9133–9149; (d) C. S. B. Gomes *et al.*, *Dalton Trans.* **45** (2016) 15603–15620; (e) C. S. B. Gomes *et al.*, *Dyes and Pigments* **140** (2017) 520–532; (f) C. S. B. Gomes *et al.*, *Dalton Trans.* **48** (2019) 13337–13352; (g) C. S. B. Gomes *et al.*, *Dalton Trans.* **49** (2020) 10185–10202; (h) C. S. B. Gomes *et al.*, *Inorg. Chem. Front.* **8** (2021) 3960–3983.



**USMENA SAOPŠTENJA  
ORAL PRESENTATIONS**

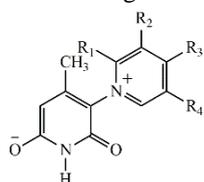
## SAMOORGANIZACIJA PAKOVANJA DIPOL-JON PIRIDONA PREKO MOLEKULA VODE

**A. Mašulović<sup>a</sup>, J. Ladarević<sup>b</sup>, L. Radovanović<sup>a</sup>, K. Gak Simić<sup>a</sup>, N. Trišović<sup>b</sup>, J. Rogan<sup>b</sup>, D. Mijin<sup>b</sup>**

<sup>a</sup>Inovacioni centar Tehnološko-metalurškog fakulteta, Univerzitet u Beogradu, Karnegijeva 4, Beograd, Srbija <sup>b</sup>Tehnološko-metalurški fakultet, Univerzitet u Beogradu, Karnegijeva 4, Beograd, Srbija

e-mail: amasulovic@tmf.bg.ac.rs

Pažnja farmaceutske industrije u velikoj meri usmerena je na razumevanje sposobnosti molekula vode da se inkorporiraju u kristalno pakovanje organskih molekula uspostavljanjem različitih nekovalentnih intermolekulskih interakcija [1]. 2-Piridon je gradivna jedinica mnogih supstanci koje poseduju antibakterijsku, antifungalnu, antiinflamatornu, antiviralnu i antikancerogenu aktivnost [2]. U ovom radu, dva piridona, koja sadrže metil supstitujsano



Compound	R <sub>1</sub>	R <sub>2</sub>	R <sub>3</sub>	R <sub>4</sub>
1	-H	-H	-H	-H
2	-H	-CH <sub>3</sub>	-H	-CH <sub>3</sub>
3	-CH <sub>3</sub>	-H	-CH <sub>3</sub>	-H

Slika. Strukturna formula dipol-jona **1**, **2** i **3**.

piridinsko jezgro u položajima 2,4 (**2**) i 3,5 (**3**) i jedan piridon sa nesupstitujsanim (**1**) piridinskim jezgrom (slika), sintetisani su Guarešić-Torpeovom reakcijom kondenzacije. Jedinjenja su okarakterisana rendgenskom strukturnom analizom kao i određivanjem tačke topljenja, UV-Vis, FT-IR, <sup>1</sup>H i <sup>13</sup>C NMR spektroskopijom.

Asimetrične jedinice jedinjenja **1·2H<sub>2</sub>O** i **3·2H<sub>2</sub>O**

sastoje se od jednog molekula piridona i dva molekula vode, dok se u asimetričnoj jedinici jedinjenja **2·4H<sub>2</sub>O** nalaze četiri molekula vode. Inverzno orijentisani molekuli uspostavljaju N–H···O vodonične veze i na taj način obrazuju  $R_2^2(8)$  sintone. Tipovi vodenih kanala u supramolekulskoj arhitekturi zavise od prirode interakcija između dipol-jona. Dipol-dipol interakcije, jake i slabe vodonične veze,  $\pi\cdots\pi$  i C–H··· $\pi$  interakcije, određuju pakovanje ovih molekula, pri čemu molekuli vode imaju značajnu ulogu.

*Kristalografski podaci:* **1·2H<sub>2</sub>O**: C<sub>11</sub>H<sub>14</sub>N<sub>2</sub>O<sub>4</sub>, *M<sub>r</sub>* = 238,24, trikliničan sistem, prostorna grupa  $P\bar{1}$ , *a* = 7,2258(14), *b* = 8,0470(16), *c* = 11,287(2) Å,  $\alpha$  = 70,71(3),  $\beta$  = 74,88(3),  $\gamma$  = 79,85(3)°, *V* = 595,1(2) Å<sup>3</sup>, *R*<sub>1</sub> = 0,0492; **2·4H<sub>2</sub>O**: C<sub>13</sub>H<sub>22</sub>N<sub>2</sub>O<sub>6</sub>, *M<sub>r</sub>* = 302,32, trikliničan sistem, prostorna grupa  $P\bar{1}$ , *a* = 7,4411(15), *b* = 10,581(2), *c* = 11,235(2) Å,  $\alpha$  = 108,96(3),  $\beta$  = 96,14(3),  $\gamma$  = 107,41(3)°, *V* = 777,6(3) Å<sup>3</sup>, *R*<sub>1</sub> = 0,0443; **3·2H<sub>2</sub>O**: C<sub>13</sub>H<sub>18</sub>N<sub>2</sub>O<sub>4</sub>, *M<sub>r</sub>* = 266,29, trikliničan sistem, prostorna grupa  $P\bar{1}$ , *a* = 7,5951(8), *b* = 9,0353(8), *c* = 11,5716(10) Å,  $\alpha$  = 82,878(7),  $\beta$  = 72,010(8),  $\gamma$  = 71,919(9)°, *V* = 717,62(13) Å<sup>3</sup>, *R*<sub>1</sub> = 0,0522.

[1] J. van de Streek, J. Rantanen, A. D. Bond, *Acta Crystallographica*, **C69** (2013) 1229–1233.

[2] I. Khan, P. Panini, S. Ud-Din Khan, U. Ali Rana, H. Andleeb, D. Chopra, S. Hameed, J. Simpson, *Crystal Growth and Design*, **16** (2016) 1371–1386.

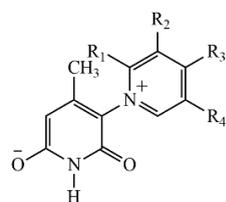
## WATER ASSISTED ASSEMBLY OF PYRIDONE ZWITTERIONS

**A. Mašulović**<sup>a</sup>, **J. Ladarević**<sup>b</sup>, **L. Radovanović**<sup>a</sup>, **K. Gak Simić**<sup>a</sup>, **N. Trišović**<sup>b</sup>, **J. Rogan**<sup>b</sup>, **D. Mijin**<sup>b</sup>

<sup>a</sup>Innovation Centre of the Faculty of Technology and Metallurgy, University of Belgrade, Karnegijeva 4, Belgrade, Serbia; <sup>b</sup>Faculty of Technology and Metallurgy, University of Belgrade, Karnegijeva 4, Belgrade, Serbia

e-mail: amasulovic@tmf.bg.ac.rs

The attention of pharmaceutical industry is set on understanding the ability of water molecules to accompany organic crystals through interplay of various non-covalent intermolecular interactions [1]. 2-Pyridone is found as a structural



Compound	R <sub>1</sub>	R <sub>2</sub>	R <sub>3</sub>	R <sub>4</sub>
1	-H	-H	-H	-H
2	-H	-CH <sub>3</sub>	-H	-CH <sub>3</sub>
3	-CH <sub>3</sub>	-H	-CH <sub>3</sub>	-H

unit in many compounds with antibacterial, antifungal, anti-inflammatory, antiviral or anticancer activity [2]. In this paper, two pyridone derivatives bearing methyl substituents in the pyridine unit in positions 2,4 (2) and 3,5 (3) were synthesized *via* the Guareschi-Thorpe condensation as well as one pyridone without substituents (1) in the

Figure. Structural formula of zwitterions 1, 2 and 3.

pyridine scaffold (Figure). These compounds were characterized by single-crystal X-ray analysis as well as determination of the melting points, UV-Vis, FTIR, <sup>1</sup>H and <sup>13</sup>C NMR spectroscopy. The asymmetric units of compounds **1**·2H<sub>2</sub>O and **3**·2H<sub>2</sub>O are comprised of one pyridone molecule and two water molecules, whereas the asymmetric unit of compound **2**·4H<sub>2</sub>O incorporates four water molecules. Pairs of N–H···O hydrogen bonds connect inversion related molecules into the  $R_2^2(8)$  synthons in the supramolecular architectures. The type of water channel depends on the nature of interactions established between zwitterions. Molecular packing is governed by dipole-dipole interactions, strong and weak hydrogen bonds,  $\pi$ - $\pi$  and C–H··· $\pi$  interactions, wherein water molecules play a significant role.

*Crystal data:* **1**·2H<sub>2</sub>O: C<sub>11</sub>H<sub>14</sub>N<sub>2</sub>O<sub>4</sub>,  $M_r = 238.24$ , triclinic, space group  $P\bar{1}$ ,  $a = 7.2258(14)$ ,  $b = 8.0470(16)$ ,  $c = 11.287(2)$  Å,  $\alpha = 70.71(3)$ ,  $\beta = 74.88(3)$ ,  $\gamma = 79.85(3)^\circ$ ,  $V = 595.1(2)$  Å<sup>3</sup>,  $R_1 = 0.0492$ ; **2**·4H<sub>2</sub>O: C<sub>13</sub>H<sub>22</sub>N<sub>2</sub>O<sub>6</sub>,  $M_r = 302.32$ , triclinic, space group  $P\bar{1}$ ,  $a = 7.4411(15)$ ,  $b = 10.581(2)$ ,  $c = 11.235(2)$  Å,  $\alpha = 108.96(3)$ ,  $\beta = 96.14(3)$ ,  $\gamma = 107.41(3)^\circ$ ,  $V = 777.6(3)$  Å<sup>3</sup>,  $R_1 = 0.0443$ ; **3**·2H<sub>2</sub>O: C<sub>13</sub>H<sub>18</sub>N<sub>2</sub>O<sub>4</sub>,  $M_r = 266.29$ , triclinic, space group  $P\bar{1}$ ,  $a = 7.5951(8)$ ,  $b = 9.0353(8)$ ,  $c = 11.5716(10)$  Å,  $\alpha = 82.878(7)$ ,  $\beta = 72.010(8)$ ,  $\gamma = 71.919(9)^\circ$ ,  $V = 717.62(13)$  Å<sup>3</sup>,  $R_1 = 0.0522$ .

[1] J. van de Streek, J. Rantanen, A. D. Bond, *Acta Crystallographica*, **C69** (2013) 1229–1233.

[2] I. Khan, P. Panini, S. Ud-Din Khan, U. Ali Rana, H. Andleeb, D. Chopra, S. Hameed, J. Simpson, *Crystal Growth and Design*, **16** (2016) 1371–1386.

## ФЛУОРОВАЊЕ АЛИФАТИЧНИХ ЈЕДИЊЕЊА. ПОКРЕТАЧКА СИЛА У КРИСТАЛНИМ СТРУКТУРАМА

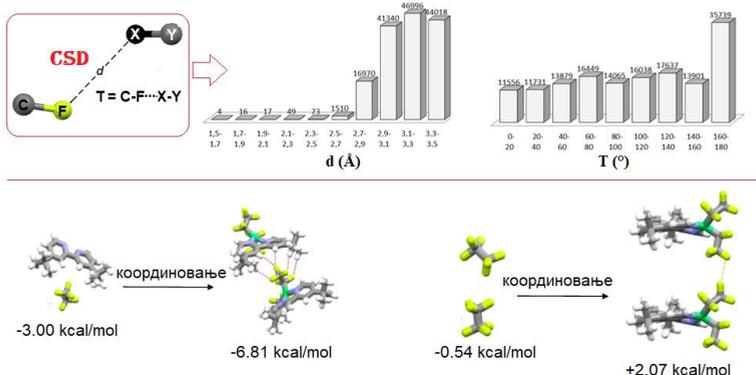
**Александра Ракић,<sup>a</sup> Марија Петковић Venazzouz,<sup>b</sup> Немања Тришковић,<sup>c</sup> Горан Јањић<sup>d</sup>**

<sup>a</sup> Факултет за физичку хемију, Универзитет у Београду, Студентски трг 12-16, 11000 Београд, Србија; <sup>b</sup> Физички факултет, Универзитет у Београду, Студентски трг 12-16, 11000 Београд, Србија; <sup>c</sup> Технолошко-металуршки факултет, Универзитет у Београду, Карнегијева 4, 11120 Београд, Србија; <sup>d</sup> Институт за хемију, технологију и металургију, Институт од националног значаја за Републику Србију, Универзитет у Београду, Његошева 12, 11000 Београд, Србија;  
e-mail: saska@ffh.bg.ac.rs

Флуоровање једињења повећава протон-акцепторска својства, али истовремено смањује протон-донорска својства алифатичних угљоводоничних група [1].

На основу анализе кристалних структура преузетих из Кембричке базе кристалографских података (CSD) показано је да се алифатичне C–H…F водоничне везе издвајају као најбројније интеракције флуорованих алифатичних група (43397 структура). Далеко испод (23050 структура), на другом месту су F…F интеракције. Уочљиво је да су вредности F…F растојања (*d* параметар) претежно изнад 2,9 Å. Међутим, не постоји јасно изражена тенденција према одређеној вредности *d* параметра (Слика 1). Пошто се за највећи број структура вредности торзионог угла C–F–X–Y (*T* параметар) крећу између 160 и 180° (Слика 1), може се закључити да интерагујуће C–F и X–Y групе међусобно заузимају *trans* оријентацију.

Приликом координације алифатичних флуорида, негативни потенцијал F атома расте. Тако се поспешује протон-акцепторски карактер флуоровог атома (јачање C–H/F интеракција). С друге стране, F…F интеракције значајно слабе услед јачања одбојних сила међу F атомима.



[1] G.V. Janjić, S.T. Jelić, N.P. Trišović, D.M. Popović, I.S. Đorđević, M.K. Milčić, *Crystal Growth & Design*, **20** (2020) 2943–2951.

## FLUORINATION OF ALIPHATIC COMPOUNDS. DRIVING FORCE IN CRYSTAL STRUCTURES

**Aleksandra Rakić,<sup>a</sup> Marija Petković Benazzouz,<sup>b</sup> Nemanja Trišović,<sup>c</sup> Goran Janjić<sup>d</sup>**

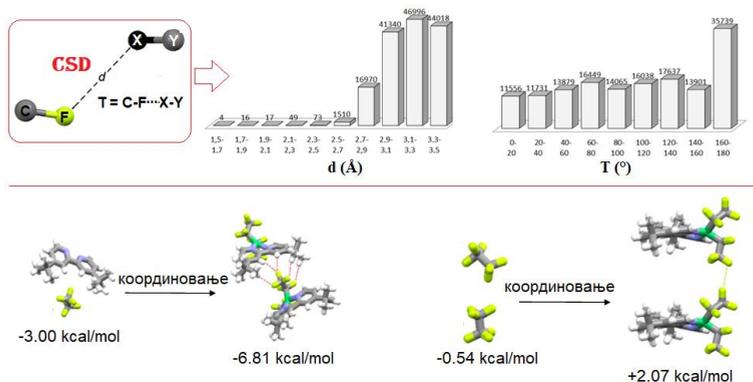
<sup>a</sup> Faculty of Physical Chemistry, University of Belgrade, Studentski trg 12-16, 11000 Belgrade, Serbia; <sup>b</sup> Faculty of Physics, University of Belgrade, Studentski trg 12-16, 11000 Belgrade, Serbia; <sup>c</sup> Faculty of Technology and Metallurgy, University of Belgrade, Karnegijeva 4, 11120 Belgrade, Serbia; <sup>d</sup> Institute of Chemistry, Technology and Metallurgy, National Institute of the Republic of Serbia, University of Belgrade, Njegoševa 12, 11000 Belgrade, Serbia; e-mail: saska@ffh.bg.ac.rs

Fluorination of compounds causes an increase in the proton-donating and a decrease in the proton-accepting ability of aliphatic groups bound to fluorine atom [1].

Statistical analysis of crystal structures from CSD (Crystallographic database) has shown the F...F contacts are the second group of interactions (23050 structures), immediately after the hydrogen bonds (43397 structures), that are mainly of aliphatic C-H...F type. There is no clear tendency of F...F contacts toward some certain values of *d* parameter (Figure 1), but it is possible to notice noticeable clear tendency of numerous structures to *d* values greater than 2.9 Å. There is a pronounced maximum in the range of torsion angle *T* from 160 to 180° (Figures 1), corresponding to trans orientation of interacting C-F and X-Y fragments.

Coordination of aliphatic fluorides leads to an increase of the negative potential of the F atoms, and, therefore, an increase in the hydrogen bonding acceptor ability (strengthening of C-H...F interactions) and a weakening of the F/F interactions, due to an increase in repulsive interactions between the F atoms

The negative potential of the F atoms of aliphatic fluorides increases by its coordination (Figure 1). This also leads to increase in the hydrogen bonding acceptor ability (strengthening of C-H...F interactions) and a weakening of the F...F interactions, due to an increase in repulsive interactions between the F atoms.



[1] G.V. Janjić, S.T. Jelić, N.P. Trišović, D.M. Popović, I.S. Đorđević, M.K. Milčić, *Crystal Growth & Design*, **20** (2020) 2943–2951.

## УЛОГА НЕКОВАЛЕНТНИХ ИНТЕРАКЦИЈА У КОНТРОЛИ ОСЕТЉИВОСТИ ВИСОКОЕНЕРГЕТСКИХ МОЛЕКУЛА КА ДЕТОНАЦИЈИ

А. Б. Ђуновић<sup>а</sup>, Д. С. Кретић<sup>б</sup>, И. С. Вељковић<sup>с</sup>, Д. Ж. Вељковић<sup>а</sup>

<sup>а</sup> Иновациони центар Хемијског факултета, Студентски трг 12-16, Београд,

<sup>б</sup> Универзитет у Београду – Хемијски факултет, Студентски трг 12-16, Београд, Србија, <sup>с</sup> Универзитет у Београду, Институт за хемију, технологију и металургију, институт од националног значаја, Његошева 12, Београд, Србија

e-mail: vdusan@chem.bg.ac.rs

Изразито позитивне вредности молекулског електростатичког потенцијала (MEP) у централним регијама високоенергетских молекула (HEM) представљају један од најважнијих фактора који утиче на осетљивост ових молекула ка детонацији [1,2]. Веома позитивне вредности електростатичког потенцијала су индикатор високе осетљивости енергетских молекула у односу на механички удар.

У овом раду су коришћени прорачуни засновани на теорији функционала густине (DFT) да би се расветлио утицај нековалентних интеракција у кристалним структурама експлозива на вредности електростатичког потенцијала одабраних нитроароматичних молекула. Да би се проучио утицај нековалентног везивања на електростатичке потенцијале испитиваних молекула, примери нитроароматичних једињења у којима постоји водонична и/или халогена веза издвојени су из Кембричке базе структурних података.

Резултати прорачуна рађених на M06/сс-PVDZ нивоу показали су да постоје значајне разлике у утицају водоничног везивања на електростатичке потенцијале енергетских молекула у зависности од тога да ли енергетски молекули играју улогу донора или акцептора водоника. У случају молекула 2,4,6-тринитрофенола (кристална структура КО-DYIM) који истовремено учествује у водоничном везивању као акцептор (O–H...O–N интеракција) и донор (O–H...O интеракција) атома водоника, израчуната вредност електростатичког потенцијала изнад центра површине молекула је 23,44 kcal/mol. Након уклањања молекула воде из окружења, вредност електростатичког потенцијала је порасла на 28,13 kcal/mol. Ове разлике у вредностима електростатичког потенцијала између водонично везаних и слободних HEM молекула пружају могућност контроле осетљивости ка детонацији ових високоенергетских једињења.

Истраживање спроведено уз подршку Фонда за науку Републике Србије, ПРОМИС, #6066886, CD-HEM. Министарство просвете, науке и технолошког развоја Републике Србије, Евиденциони број: 451-03-9/2021-14/200168, 451-03-9/2021-14/200288 и 451-03-68/2021-14/200026.

[1] B. M. Rice, J. J. Hare, *J. Phys. Chem. A* **106** (2002) 1770–1783.

[2] P. Politzer, J. S. Murray, *Propellants Explos. Pyrotech.* **41** (2016) 414–425.

## ROLE OF NONCOVALENT INTERACTIONS IN THE CONTROL OF THE SENSITIVITY OF HIGH ENERGETIC MOLECULES TOWARDS DETONATION

A. B. Đunović <sup>a</sup>, D. S. Kretić <sup>b</sup>, I. S. Veljković <sup>c</sup>, D. Ž. Veljković <sup>b</sup>

<sup>a</sup> Innovation center of the Faculty of Chemistry, Studentski trg 12-16, Belgrade, Serbia

<sup>b</sup> University of Belgrade – Faculty of Chemistry, Studentski trg, 12- 16, Belgrade, Serbia

<sup>c</sup> University of Belgrade – Institute of Chemistry, Technology and Metallurgy – National Institute of the Republic of Serbia, Njegoševa 12, 11000 Belgrade, Serbia

e-mail: vdusan@chem.bg.ac.rs

Strongly positive values of Molecular Electrostatic Potential (MEP) in the central regions of the high energetic molecules (HEM) is one of the most important factors that affects the sensitivity of these molecules towards detonation [1,2]. Strong positive potential in the center of molecular surface is an indicator of high impact sensitivity of HEM molecule.

In this work, Density Functional Theory (DFT) calculations were used to reveal the influence of noncovalent interactions in crystal structures on the values of electrostatic potential above the central areas of selected nitroaromatic molecules. To examine the influence of noncovalent interactions on the electrostatic potential of HEM molecules in crystal structures, examples of hydrogen-bonded and halogen-bonded nitroaromatic molecules were searched in Cambridge Structural Database. Calculations were also done on model systems.

Results of the calculations performed using the M06/cc-PVDZ level of theory showed that there are significant differences in the influence of hydrogen bonding on the electrostatic potential of energetic molecules acting as hydrogen atom donors and hydrogen atom acceptors. In the case of 2,4,6-trinitrophenol molecule (extracted from KODYIM crystal structure) involved in hydrogen bonding as both hydrogen atom acceptor (O–H...O–N interaction) and hydrogen atom donor (O–H...O interaction) calculated value of electrostatic potential in the central portion of the molecular surface was 23.44 kcal/mol. After the removal of water molecules which were present in KODYIM crystal structure, value of electrostatic potential increased to 28.13 kcal/mol. These differences in electrostatic potential values for hydrogen-bonded and free HEM molecules give the opportunity for the control of impact sensitivities of HEM compounds.

This research was supported by the Science Fund of the Republic of Serbia, PROMIS, #6066886, CD-HEM. This work was supported by the Serbian Ministry of Education, Science and Technological Development (Contract numbers: 451-03-9/2021-14/200168, 451-03-9/2021-14/200288 and 451-03-68/2021-14/200026).

[1] B. M. Rice, J. J. Hare, *J. Phys. Chem. A* **106** (2002) 17701783.

[2] P. Politzer, J. S. Murray, *Propellants Explos. Pyrotech.* **41** (2016) 414–425.

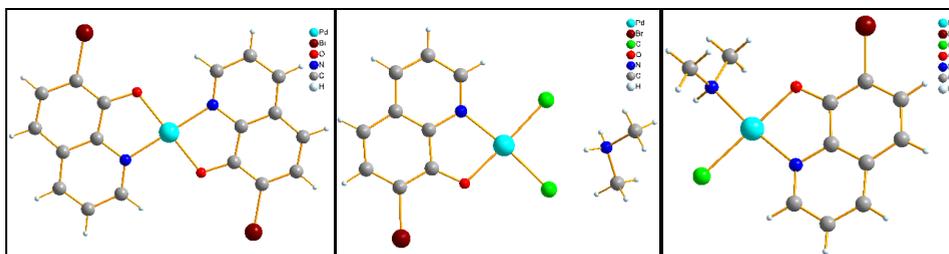
## KOMPLEKSI PALADIJUMA SA 7-BROMO-HINOLIN-8-OL

I. Potočňák<sup>a</sup>, A. Lüköová<sup>a</sup>, E. Samořová<sup>b</sup>

<sup>a</sup>Departman za neorgansku hemiju, Prirodno-matematički fakultet, P. J. Šafárik University, Moyzesova 11, 04154 Košice, Slovačka; <sup>b</sup>Institut za fiziku Češke akademije nauka, Na Slovance 2, 182 21 Prague 8, Republika Češka  
e-mail: ivan.potocnak@upjs.sk

Koristeći paladijum(II)-hlorid i 7-bromo-hinolin-8-ol (HBrQ), pri različitim uslovima reakcije sintetisana su četiri kompleksa kao potencijalni antikancerogeni agensi: [Pd(BrQ)<sub>2</sub>] (**1a,b,c**), H<sub>2</sub>BrQ[PdCl<sub>2</sub>(BrQ)] (**2**), (CH<sub>3</sub>)<sub>2</sub>NH<sub>2</sub>[PdCl<sub>2</sub>(BrQ)] (**3**) and [PdCl(BrQ)((CH<sub>3</sub>)<sub>2</sub>NH)] (**4**).

Rendgenskom strukturnom analizom **1a,b,c** otkriveno je da su molekulske strukture ovih polimorfa vrlo slične - BrQ ligandi su bidentatno *trans*-koordinirani za atom paladijuma preko atoma kiseonika, nakon deprotonovanja HBrQ hidroksilne grupe iz fenolnog dela i atoma azota iz piridinskog dela. U supramolekularnoj strukturi složeni molekuli su ipak različito raspoređeni i drže ih različite međumolekulske sile. Kompleksi **2** i **3** su jonski sa istim [PdCl<sub>2</sub>(BrQ)]<sup>-</sup> anjonom u kojem su dva hloridna liganda cis-koordinirana, a preostala dva položaja oko atoma Pd(II) zauzimaju atomi kiseonika i azota iz BrQ. Negativna naelektrisanja anjona uravnotežena su različitim kationima, H<sub>2</sub>BrQ<sup>+</sup> i (CH<sub>3</sub>)<sub>2</sub>NH<sub>2</sub><sup>+</sup>. Struktura **2** u rastvoru DMSO je razjašnjena korišćenjem jednodimenzionalnih i dvodimenzionalnih NMR eksperimenata koji su pokazali da se kompleks razlaže do HBrQ liganda. U **4**, molekul dimetilamina je vezan preko atoma azota, pri čemu su atomi azota BrQ i dimetilamina u *trans*-pozicijama. Četvrto koordinaciono mesto zauzima hloridni ligand. U svim kompleksima primećena je kvadratna planarna konfiguracija centralnog atoma Pd(II) (slika 1). Kristalne strukture su stabilizovane H-vezama i  $\pi$ - $\pi$  interakcijama pri čemu se se uočava formiranje različitih supramolekulskih aranžmana.



Slika 1. Strukture kompleksa [Pd(BrQ)<sub>2</sub>] (**1a**), (CH<sub>3</sub>)<sub>2</sub>NH<sub>2</sub>[PdCl<sub>2</sub>(BrQ)] (**3**) and [PdCl(BrQ)((CH<sub>3</sub>)<sub>2</sub>NH)] (**4**) (s leva u desno)

Zahvalnica: Ovaj rad je podržan od strane APVV-18-0016 i VEGA 1/0148/19.

## PALLADIUM COMPLEXES WITH 7-BROMO-QUINOLIN-8-OL

I. Potočňák<sup>a</sup>, A. Lüköová<sup>a</sup>, E. Samoľová<sup>b</sup>

<sup>a</sup>Department of Inorganic Chemistry, Faculty of Science, P. J. Šafárik University, Moyzesova 11, 04154 Košice, Slovakia; <sup>b</sup>Institute of Physics of the Czech Academy of Sciences, Na Slovance 2, 182 21 Prague 8, Czech Republic  
e-mail: ivan.potocnak@upjs.sk

Using palladium(II) chloride and 7-bromo-quinolin-8-ol (HBrQ) under altered reaction conditions, four different complexes were prepared as potential anticancer agents:  $[\text{Pd}(\text{BrQ})_2]$  (**1a,b,c**),  $\text{H}_2\text{BrQ}[\text{PdCl}_2(\text{BrQ})]$  (**2**),  $(\text{CH}_3)_2\text{NH}_2[\text{PdCl}_2(\text{BrQ})]$  (**3**) and  $[\text{PdCl}(\text{BrQ})((\text{CH}_3)_2\text{NH})]$  (**4**). X-ray structure analysis of **1a,b,c** revealed that the molecular structures of these polymorphs are very similar - BrQ ligands are bidentately *trans*-coordinated to the palladium atom by oxygen atom, after the deprotonation of HBrQ hydroxyl group in the phenolic part, and nitrogen atom of the pyridine part. Nevertheless, the complex molecules are differently arranged in the supramolecular structure being held by different intermolecular forces. Complexes **2** and **3** are ionic with the same  $[\text{PdCl}_2(\text{BrQ})]^-$  anion in which two chloride ligands are *cis*-coordinated while remaining two positions around the Pd(II) atom are occupied by oxygen and nitrogen atoms from BrQ. Negative charges of anions are balanced by different cations,  $\text{H}_2\text{BrQ}^+$  and  $(\text{CH}_3)_2\text{NH}_2^+$ , respectively. The structure of **2** in DMSO solution was elucidated using one- and two-dimensional NMR experiments which showed that the complex decomposes to HBrQ ligand. In **4**, the dimethylamine molecule is attached *via* nitrogen atom, wherein the nitrogen atoms of BrQ and of dimethylamine are in *trans*-positions. The fourth coordination place is occupied by chloride ligand. In all complexes a square planar configuration of the central Pd(II) atom is observed (Figure 1). The structures are stabilized by H-bonds and  $\pi$ - $\pi$  interactions while observing the formation of different supramolecular arrangements.

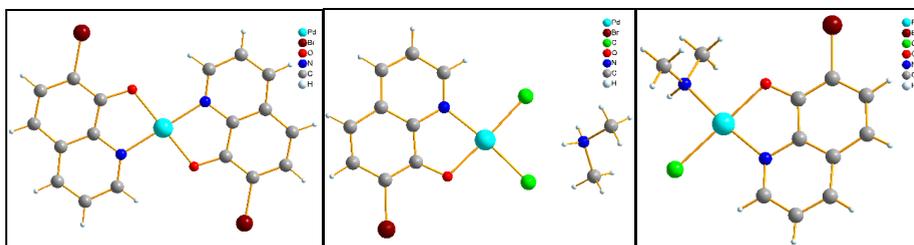


Figure 1. Crystal structures of  $[\text{Pd}(\text{BrQ})_2]$  (**1a**),  $(\text{CH}_3)_2\text{NH}_2[\text{PdCl}_2(\text{BrQ})]$  (**3**) and  $[\text{PdCl}(\text{BrQ})((\text{CH}_3)_2\text{NH})]$  (**4**) (from left to right).

Acknowledgement: This work was supported by the APVV-18-0016 grant and VEGA grant 1/0148/19.

## CINK-ORTOTITANAT SA ANTIBAKTERIJSKIM SVOJSTVIMA

**N. Milojković<sup>a</sup>, M. Orlić<sup>a</sup>, J. Dikić<sup>b</sup>, M. Žunić<sup>c</sup>, B. Simović<sup>c</sup>, A. Dapčević<sup>a</sup>**

<sup>a</sup> Tehnološko-metalurški fakultet, Univerzitet u Beogradu, Karnegijeva 4, 11000 Beograd, Srbija; <sup>b</sup> Inovacioni centar Tehnološko-metalurškog fakulteta, Univerzitet u Beogradu, Karnegijeva 4, 11000 Beograd, Srbija; <sup>c</sup> Institut za multidisciplinarna istraživanja, Univerzitet u Beogradu, Kneza Višeslava 1a, 11030 Beograd, Srbija  
e-mail: nmilojkovic@tmf.bg.ac.rs

Kontaminacija bakterijama je poslednjih godina postala problem na globalnom nivou zbog čega se javila potreba za novim antibakterijskim agensima. Stabilni titan-dioksid i cink-oksidi pokazuju antibakterijsku aktivnost te se smatraju pogodnim materijalima i zbog njihove netoksičnosti i niske cene [1, 2].

Cilj ovog rada bio je dobijanje novog materijala na bazi ZnO i TiO<sub>2</sub> sa antibakterijskim svojstvima. U tu svrhu, titan(IV)-butoksid (25 mol.%) rastvoren je u vodenom rastvoru cink-acetata (75 mol.%), nakon čega je dodavan amonijak dok vrednost pH nije iznosila 8,5. Polovina dobijenog rastvora je hidrotermalno tretirana 12 h na 120 °C, zatim sušena 20 h na 100 °C i kalcinisana 1 h na 500 (uzorak H-ZnTi-500) i 800 °C (uzorak H-ZnTi-800). Druga polovina dobijenog rastvora bila je direktno sušena i kalcinisana pod istim uslovima (uzorci ZnTi-500 i ZnTi-800).

Na osnovu XRD rezultata, fazni sastav i veličina kristalita izračunati su u Powder Cell programu, dok su parametri jedinične ćelije i dužine veza dobijeni Ritveldovim utajnjavanjem pomoću FullProf/Winplotr programskog paketa. Termogravimetrijskom analizom nekalciniranih uzoraka određena je temperatura kalcinacije. Antibakterijska aktivnost dobijenih prahova ispitana je prema dva soja bakterija: Gram-pozitivnoj *S. aureus* ATCC 25923 i Gram-negativnoj *E. coli* DSM 498.

Jednofazni kubni Zn<sub>2</sub>TiO<sub>4</sub> (ICSD#162392, prostorna grupa *Fd3m*) dobijen je jedino u slučaju ZnTi-800, dok je u ostale tri sinteze Zn<sub>2</sub>TiO<sub>4</sub> bio većinska faza. Pored Zn<sub>2</sub>TiO<sub>4</sub>, uzorci H-ZnTi-500 i ZnTi-500 sadržali su 22 i 4 mas.% ZnO (ICSD#26170) redno, dok je u uzorku H-ZnTi-800 pronađeno 7 mas.% ZnO i 5 mas.% Zn<sub>2</sub>Ti<sub>3</sub>O<sub>8</sub> (ICSD#083525). Parametar *a* svih dobijenih Zn<sub>2</sub>TiO<sub>4</sub> pokazao se nezavisnim od samog procesa sinteze, a dobijene vrednosti su približno iste: 8,4465(3) za H-ZnTi-500, 8,4604(2) za ZnTi-500, 8,4564(2) za H-ZnTi-800 i 8,4565(2) Å za ZnTi-800. U strukturi kubnog Zn<sub>2</sub>TiO<sub>4</sub> postoje dva katjonska mesta: tetraedarski koordinirani Zn u 0,0,0, i oktaedarski koordinirani Zn i Ti koji dele položaj 5/8,5/8,5/8. Dužine veza Zn–O i Zn/Ti–O su takođe nezavisne od uslova sinteze. Na 500 °C dobijeni su nanokristalni Zn<sub>2</sub>TiO<sub>4</sub> (veličina kristalita iznosila je 26 i 71 nm za H-ZnTi-500 i ZnTi-500, respektivno) dok su mikrokristalni Zn<sub>2</sub>TiO<sub>4</sub> nastali na 800 °C (veličina kristalita prelazila je 110 nm). Od svih uzoraka, ZnTi-500 je pokazao najbolju antibakterijsku aktivnost dostignuvši visoki stepen redukcije broja bakterijskih kolonija: 87,6 % *E. coli* DSM 498 i 63,4 % *S. aureus* ATCC 25923. To se može pripisati činjenici da je u ovom slučaju dobijen gotovo jednofazni Zn<sub>2</sub>TiO<sub>4</sub> sa dovoljno malom veličinom kristalita.

[1] A. Sirelkhatim et al., *Nano-Micro Letters*, **7** (2015) 219–242.

[2] T. Matsunaga et al., *FEMS Microbiology Letters*, **29** (1985) 211–214.

## ANTIBACTERIAL ZINC ORTHOTITANATE

**N. Milojković<sup>a</sup>, M. Orlić<sup>a</sup>, J. Dikić<sup>b</sup>, M. Žunić<sup>c</sup>, B. Simović<sup>c</sup>, A. Dapčević<sup>a</sup>**

<sup>a</sup> Faculty of Technology and Metallurgy, University of Belgrade, Karnegijeva 4, 11000 Belgrade, Serbia; <sup>b</sup> Innovation Center of the Faculty Technology and Metallurgy, University of Belgrade, Karnegijeva 4, 11000 Belgrade, Serbia; <sup>c</sup> Institute for Multidisciplinary Research, University of Belgrade, Kneza Višeslava 1a, 11030 Belgrade, Serbia

e-mail: nmilojkovic@tmf.bg.ac.rs

In recent years bacterial contamination has become a significant problem of the global environment causing the necessity for novel antibacterial agents. Stable, non-toxic and low cost zinc oxide and titanium dioxide are considered as suitable antibacterial materials [1, 2].

The aim of this work was to find a new antibacterial material based on both, ZnO and TiO<sub>2</sub>. Therefore, titanium(IV) butoxide (25 mole%) was dissolved in a water solution of zinc acetate (75 mole%) after which the ammonia was added until pH was adjusted to 8.5. Half of the obtained solution was hydrothermally treated for 12 h at 120 °C, dried for 20 h at 100 °C and then calcined at 500 (sample H-ZnTi-500) and 800 °C (sample H-ZnTi-800) for 1 h. The other half of obtained solution was directly dried and calcined under the same conditions (samples ZnTi-500 and ZnTi-800).

Base on XRD data for obtained powders, the phase composition and crystallite size were calculated in Powder Cell software while unit cell parameters and bond distances were obtained by Rietveld refinement using FullProf software in Winplotr environment. TG analysis of uncalcined samples was used to determine temperature of calcination. Antibacterial properties of obtained powders were examined towards Gram-positive *S. aureus* ATCC 25923 and Gram-negative *E. coli* DSM 498 bacteria.

The single-phase cubic Zn<sub>2</sub>TiO<sub>4</sub> phase (ICSD#162392, space group  $Fd\bar{3}m$ ) was obtained in the case of ZnTi-800 while, for three other samples, the Zn<sub>2</sub>TiO<sub>4</sub> is found to be a predominant phase. Beside Zn<sub>2</sub>TiO<sub>4</sub> samples H-ZnTi-500 and ZnTi-500 contained 22 and 4 wt.% of ZnO (ICSD#26170) respectively, while H-ZnTi-800 had 7 wt.% of ZnO and 5 wt.% of Zn<sub>2</sub>Ti<sub>3</sub>O<sub>8</sub> (ICSD#083525). The *a*-parameter of all obtained Zn<sub>2</sub>TiO<sub>4</sub> was independent of synthetic procedure having following values: 8.4465(3) for H-ZnTi-500, 8.4604(2) for ZnTi-500, 8.4564(2) for H-ZnTi-800 and 8.4565(2) Å for ZnTi-800. Two cation sites can be found in cubic Zn<sub>2</sub>TiO<sub>4</sub>: tetrahedrally coordinated Zn at 0,0,0 and octahedral site at 5/8,5/8,5/8 shared between Zn and Ti. The Zn–O and Zn/Ti–O bond distances were also independent of synthesis. The nanocrystalline Zn<sub>2</sub>TiO<sub>4</sub> phases were obtained at 500 °C (crystallite size for H-ZnTi-500 and ZnTi-500 were 26 and 71 nm respectively), and microcrystalline ones at 800 °C (the crystallite size exceeded 110 nm). Among all samples, the ZnTi-500 demonstrated the best antibacterial activity reaching high reduction in the number of bacteria cells: 87.6 % of *E. coli* DSM 498 and 63.4 % of *S. aureus* ATCC 25923. This could be explained by the fact that almost pure Zn<sub>2</sub>TiO<sub>4</sub> phase was obtained with sufficiently small crystallites.

[1] A. Sirelkhatim et al., *Nano-Micro Letters*, **7** (2015) 219–242.

[2] T. Matsunaga et al., *FEMS Microbiology Letters*, **29** (1985) 211–214.

## SINTEZA I STRUKTURA KOMPLEKSA Cu(II) SA BIS(4-KARBOKSI-BENZIL)AMONIJUM-HLORIDOM

**Nikola Radnović<sup>a</sup>, Chris Hawes<sup>b</sup>, Marko Rodić<sup>a</sup>**

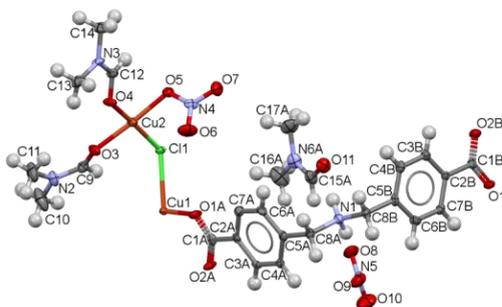
<sup>a</sup> Univerzitet u Novom Sadu, Prirodno-matematički fakultet, Trg D. Obradovića 3, 21000 Novi Sad, Srbija; <sup>b</sup> Univerzitet u Kilu, Škola hemijskih i fizičkih nauka, Kil, Njukasl, ST5 5BG, Ujedinjeno Kraljevstvo  
e-mail: nikola.radnovic@dh.uns.ac.rs

Reakcijom bis(4-karboksi-benzil)amonijum-hlorida,  $[H_3L]Cl$ , sa  $Cu(NO_3)_2 \cdot 2,5H_2O$ , pri solvotermalnim uslovima u rastvoru dimetilformamida (DMF), dobijen je dvodimenzionalni koordinacioni polimer  $\{[Cu_2(HL)(DMF)_2NO_3Cl]NO_3 \cdot DMF\}_n$ .

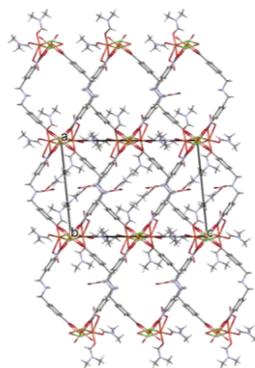
Asimetrična jedinica kompleksa sastoji se od dva jona  $Cu^{2+}$ ,  $HL^-$ , mostovnog hloridnog jona i tri molekula DMF od kojih jedan nije koordinovan i predstavlja rastvarač u kristalnoj strukturi. Ligand  $HL^-$  je tetradentatano koordinovan i ima mostovnu ulogu. Monoanjonska forma liganda je nastala deprotonacijom obe karboksilne grupe, s tim da je alifatičnaaminska grupa između benzoksi grupa u protonovanoj formi.

Oba centralna atoma nalaze se u kvadratnom piramidalnom okruženju sa različitim ligandima. Cu1 formira dimer u obliku pedaline, gde su bazalni položaji koordinacionog poliedra jona Cu1 u klasteru zauzeti karboksilatnom grupom, a apikalni položaj zauzima hloridni jon koji premošćuje atome Cu1 i Cu2. Koordinaciono okruženje Cu2 čine hloridni jon, dva molekula DMF i nitratni jon u bazalnom položaju, dok se u apikalnom položaju nalazi još jedan hloridni jon koji pripada drugoj asimetričnoj jedinici.

$HL^-$  ligandi se savijaju da povežu svaki Cu1 dimer kako bi formirali jednodimenzionalne lance duž ose  $b$ , a lanci su povezani preko hloridnih jona. Kao rezultat toga, kristalna struktura ima dve vrste ravnih 1D kanala.



Asimetrična jedinica kompleksa  
 $\{[Cu_2(HL)(DMF)_2NO_3Cl]NO_3 \cdot DMF\}_n$



Dve vrste 1D kanala duž ose  $b$  u  
kristalnoj strukturi kompleksa

Odabrani kristalografski podaci i parametri utaćnjavanja:  $C_{25}H_{35}ClCu_2N_6O_{13}$ ,  $P2_1/c$ ,  $a = 14,8506(8)$  Å,  $b = 10,8286(6)$  Å,  $c = 20,8755(11)$  Å,  $\beta = 95,872(3)^\circ$ ,  $V = 3339,4(3)$  Å<sup>3</sup>,  $Z = 4$ ,  $R = 6,02\%$ ,  $S = 1,047$ , za 460 parametara i 5906 refleksija.

## SYNTHESIS AND STRUCTURE OF Cu(II) COMPLEX WITH BIS(4-CARBOXY-BENZYL)AMMONIUM CHLORIDE

**Nikola Radnović<sup>a</sup>, Chris Hawes<sup>b</sup>, Marko Rodić<sup>a</sup>**

<sup>a</sup> University of Novi Sad, Faculty of Sciences, Trg D. Obradovića 3, 21000 Novi Sad, Serbia; <sup>b</sup> Keele University, School of Chemical and Physical Sciences, Keele, Newcastle ST5 5BG, United Kingdom

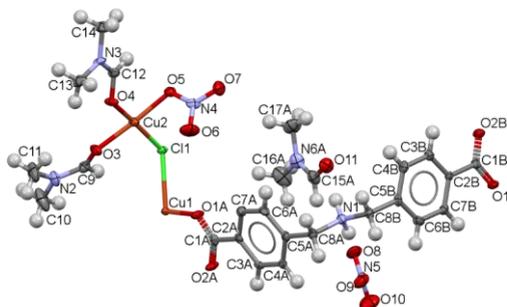
e-mail: nikola.radnovic@dh.uns.ac.rs

The reaction of bis(4-carboxy-benzyl)ammonium chloride, [H<sub>3</sub>L]Cl, with Cu(NO<sub>3</sub>)<sub>2</sub>·2.5H<sub>2</sub>O, in DMF solution under solvothermal conditions, yielded the two-dimensional coordination polymer {[Cu<sub>2</sub>(HL)(DMF)<sub>2</sub>NO<sub>3</sub>Cl]NO<sub>3</sub>·DMF}<sub>n</sub>.

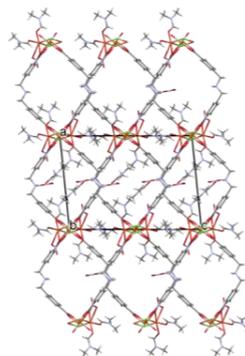
The asymmetric unit of the complex consists of two Cu<sup>2+</sup>, HL<sup>-</sup>, bridging chloride ion and three DMF molecules of which one is not coordinated and represents crystal solvent. Ligand HL<sup>-</sup> is tetradentantly coordinated and has a bridging role. The monoanionic form of the ligand is formed by deprotonation of both carboxyl groups, while the aliphatic amine group between the benzoxy groups being in the protonated form.

Both central atoms are situated in square pyramidal environment with different ligands. Cu1 form paddle-wheel type dimer where the basal positions of the Cu1 polyhedron are occupied by the carboxylate groups and the axial position is occupied by chloride ion which bridges Cu1 and Cu2 atoms. The coordination environment of Cu2 consists of a chloride ion, two DMF molecules and a nitrate ion in the basal positions, while in the apical position there is a chloride ion that belongs to another asymmetric unit.

The HL<sup>-</sup> ligands are bending to connect each Cu1 dimer to form 1D chains along *b*-axis and the chains are linked *via* chloride ions. As a result, the crystal structure has two kinds of straight 1D channels.



Asymmetric unit of complex  
 {[Cu<sub>2</sub>(HL)(DMF)<sub>2</sub>NO<sub>3</sub>Cl]NO<sub>3</sub>·DMF}<sub>n</sub>



Two kinds of 1D channels along  
*b*-axis in crystal structure of complex

Selected crystallographic data and refinement details: C<sub>25</sub>H<sub>35</sub>ClCu<sub>2</sub>N<sub>6</sub>O<sub>13</sub>, *P*2<sub>1</sub>/*c*, *a* = 14.8506(8) Å, *b* = 10.8286(6) Å, *c* = 20.8755(11) Å, β = 95.872(3)°, *V* = 3339.4(3) Å<sup>3</sup>, *Z* = 4, *R* = 6.02 %, *S* = 1.047, for 460 parameters and 5906 reflections.



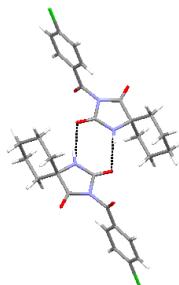
**POSTERSKA SAOPŠTENJA**  
**POSTER PRESENTATIONS**

## СУПРАМОЛЕКУЛСКА ОРГАНИЗАЦИЈА 3-(4-ХЛОРБЕНЗОИЛ)-1,3- ДИАЗАСПИРО[4.5]ДЕКАН-2,4-ДИОНА

**К. Гак Симић**<sup>a</sup>, **А. Лазић**<sup>a</sup>, **Л. Радовановић**<sup>a</sup>, **Ј. Роган**<sup>b</sup>, **Г. Јањић**<sup>c</sup>, **И. Ђорђевић**<sup>c</sup>,  
**Н. Тришовић**<sup>b</sup>

<sup>a</sup> Иновациони центар Технолошко-металуришког факултета, Београд, Србија; <sup>b</sup> Технолошко-металуришки факултет, Универзитет у Београду, Београд, Србија; <sup>c</sup> Универзитет у Београду-Институт за хемију, технологију и металургију, Центар за хемију, Београд, Србија  
e-mail: kgak@tmf.bg.ac.rs

Синтетисан је дериват циклохексан-5-спирохидантоина и одређена је његова кристална структура. Хијерархијски развој кристалног паковања дискутован је са аспекта кооперативности димерних мотива који настају преко различитих интермолекулских интеракција, и то: јаких N–H···O водоничних веза и слабих C–H···O, C–H···Cl и C–H···π интеракција. Кристално паковање задржава мотив, који се обично среће код деривата хидантоина, у коме су два инверзано оријентисана молекула повезана паром N–H···O водоничних веза (слика 1). Специфична структурна карактеристика јесу паралелни слојеви дуж ас-равни (слика 2). Пошто овај мотив повезује сваки други слој, растојање између слојева се наизменично мења. Накнадна анализа Хиршфелдове површине омогућила је разраду квалитативних и квантитативних доприноса интермолекулских интеракција проучаваном кристалном паковању.



Слика 1. Карактеристичан  $R_2^2(8)$  прстен 3-(4-хлорбензоил)-1,3-  
-дiazаспиро[4.5]декан-2,4-диона

*Кристаллографски подаци* 3-(4-хлорбензоил)-1,3-дiazаспиро[4.5]декан-2,4-диона:  $C_{15}H_{15}ClN_2O_3$ ,  $M_r = 306.7$ , триклинчан систем, просторна група  $P-1$ ,  $a = 6,2836(13)$ ,  $b = 10,928(2)$ ,  $c = 12,159(2)$  Å,  $\alpha = 108,19(3)$ ,  $\beta = 99,76(3)$ ,  $\gamma = 104,73(3)$  °,  $V = 738,4(3)$  Å<sup>3</sup>,  $Z = 2$ ,  $F(000) = 320$ ,  $\rho_x = 1,380$  g cm<sup>-3</sup>,  $\mu(\text{Mo } K\alpha) = 0,270$  mm<sup>-1</sup>. Утачњавање са  $F^2$  (190 параметара) дало је  $R_1 = 0,0821$ ,  $wR_2 = 0,1157$ ,  $S = 1,031$  за све податке и  $R_1 = 0,0548$  за 2707 уочених рефлексција са  $I \geq 2\sigma(I)$ .

## SUPRAMOLECULAR ASSOCIATION IN 3-(4-CHLOROBENZOYL)-1,3-DIAZASPIRO[4.5]DECANE-2,4-DIONE

**K. Gak Simić**<sup>a</sup>, **A. Lazić**<sup>a</sup>, **L. Radovanović**<sup>a</sup>, **J. Rogan**<sup>b</sup>, **G. Janjić**<sup>c</sup>, **I. Đorđević**<sup>c</sup>, **N. Trišović**<sup>b</sup>

<sup>a</sup> Innovation Centre of the Faculty of Technology and Metallurgy, Belgrade, Serbia; <sup>b</sup> Faculty of Technology and Metallurgy, University of Belgrade, Belgrade, Serbia; <sup>c</sup> University of Belgrade - Institute of Chemistry, Technology and Metallurgy, National Institute of the Republic of Serbia, Belgrade, Serbia

e-mail: kgak@tmf.bg.ac.rs

A derivative of cyclohexane-5-spirohydantoin was synthesized and its crystal structure was determined. The hierarchical development of the crystal packing was discussed through cooperativity of various dimeric motifs associated with the presence of different intermolecular interactions, namely strong N–H···O, and weaker C–H···O, C–H···Cl and C–H··· $\pi$  interactions. The crystal packing retained the motif commonly found in hydantoin derivatives where two molecules related by inversion are linked by a pair of N–H···O hydrogen bonds (Figure 1). A hallmark structural feature was a parallel layer arrangement to the *ac*-plane (Figure 2) with alternating perpendicular separation, whereby this motif connect every second layer. An analysis of the Hirshfeld surface further elaborated the qualitative and quantitative contributions of intermolecular interactions to the crystal packing.

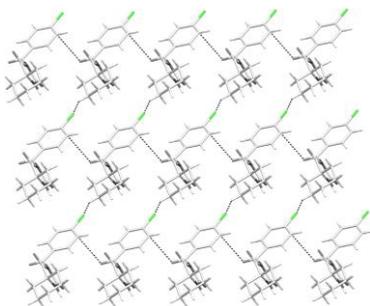


Figure 2. Part of the crystal packing of the investigated derivative of cyclohexane-5-spirohydantoin showing formation of a layer parallel to the *ac*-plane.

*Crystal data* for 3-(4-chlorobenzoyl)-1,3-diazaspiro[4.5]decane-2,4-dione: C<sub>15</sub>H<sub>15</sub>ClN<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, *M<sub>r</sub>* = 306.7, triclinic system, space group *P*-1, *a* = 6.2836(13), *b* = 10.928(2), *c* = 12.159(2) Å,  $\alpha$  = 108.19(3),  $\beta$  = 99.76(3),  $\gamma$  = 104.73(3) °, *V* = 738.4(3) Å<sup>3</sup>, *Z* = 2, *F*(000) = 320,  $\rho_x$  = 1.380 g cm<sup>-3</sup>,  $\mu$ (Mo *K* $\alpha$ ) = 0.270 mm<sup>-1</sup>. The refinement on *F*<sup>2</sup> (190 parameters) yielded *R*<sub>1</sub> = 0.0821, *wR*<sub>2</sub> = 0.1157, *S* = 1.031 for all data, and *R*<sub>1</sub> = 0.0548 for 2707 observed reflections with *I* ≥ 2 $\sigma$ (*I*).



## SYNTHESIS, CHARACTERIZATION AND DFT CALCULATIONS OF DINUCLEAR SCHIFF BASE Mn(II) COMPLEX

**T. Adejumo**<sup>a</sup>, **D. Radanović**<sup>b</sup>, **M. Zlatar**<sup>b</sup>, **M. Gruden**<sup>a</sup>, **K. Anđelković**<sup>a</sup>, **B. Čobeljić**<sup>a</sup>

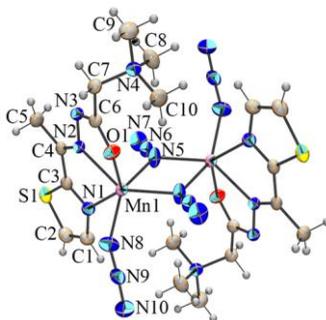
<sup>a</sup> Faculty of Chemistry, University of Belgrade, Studentski trg 12-16, 11000 Belgrade, Serbia;

<sup>b</sup> University of Belgrade-Institute of Chemistry, Technology and Metallurgy, Department of Chemistry, Njegoševa 12, 11000 Belgrade, Serbia;

e-mail: mima@chem.bg.ac.rs

The Mn(II) complex was synthesized by the reaction of *N,N,N*-trimethyl-2-oxo-2-(2-(1-(thiazol-2-yl)ethylidene)hydrazinyl)ethan-1-aminium chloride, **HL**<sup>1</sup>Cl (0.25 mmol), and MnCl<sub>2</sub>·4H<sub>2</sub>O (0.25 mmol) in methanol. After complete dissolution of Mn(II) salt, NaN<sub>3</sub> (1 mmol) was added. The mixture was stirred for 2 h at 60 °C. After slow evaporation of solvent in refrigerator for 14 days, pale orange crystals were obtained. The complex was characterized via elemental analysis, IR spectroscopy and X-Ray.

The crystal structure of [Mn<sub>2</sub>L<sub>2</sub>(μ-<sub>1,1</sub>-N<sub>3</sub>)<sub>2</sub>(N<sub>3</sub>)<sub>2</sub>] displays a centrosymmetric binuclear complex with the asymmetric unit comprising one Mn(II) center, one ligand L<sup>1</sup>, two azide anions (one bridging and one terminal) and one solvent (methanol) molecule. The Mn(II) ion is hexacoordinated with three donor atoms N1, N2 and O1 of ligand L<sup>1</sup>, two nitrogen atoms from bridging azide anions, and one nitrogen atom (N8) from terminal azide anion. The polyhedron around the Mn(II) ion is described as distorted trigonal prism (TPR-6) with the twist angle  $\Phi$  of 14.19° for the atom pairs N1N8, O1N2 and N5N5. Density functional theory (DFT) calculations at ZORA-M06-2X/TZP level of theory revealed weak ferromagnetic interactions between Mn(II) centers.



## SINTEZA I KRISTALNA STRUKTURA 2-ACETILBUTIROLAKTONA SA METIL ESTROM L-TRIPTOFANA

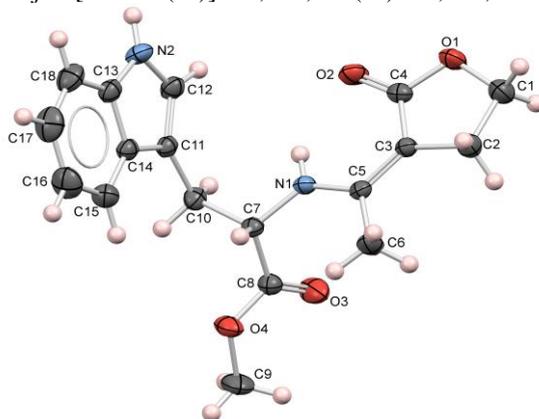
**D. Stojković<sup>a</sup>, V. Jevtić<sup>b</sup>, Đ. Petrović<sup>b</sup>, S. Jovičić Milić<sup>b</sup>, N. Vuković<sup>b</sup>, M. Vukić<sup>b</sup>,  
M. Đukić<sup>b</sup>, O. Klisurić<sup>c</sup>**

<sup>a</sup>Institut za informacione tehnologije, Univerzitet u Kragujevcu, Jovana Cvijića bb, 34000 Kragujevac, Srbija; <sup>b</sup>Institut za hemiju, Prirodno-matematički fakultet, Univerzitet u Kragujevcu, Radoja Domanovića 12, 34000 Kragujevac, Srbija; <sup>c</sup>Prirodno-matematički fakultet, Univerzitet u Novom Sadu, Trg Dositeja Obradovića 3, 21000 Novi Sad, Srbija  
e-mail: danijela.stojkovic@kg.ac.rs

Odmere se i u ultrazvučnoj kadi mešaju ekvimolarne količine 2-acetil butirolaktona i metil estra L-triptofana. Reakcija traje četiri sata. Nakon završene reakcije i hlađenja na sobnoj temperaturi dobija se proizvod u obliku viskozne smeše. Dobijena smeša se rastvara u metanolu, a zatim se vrši tečno-tečna ekstrakcija smešom hloroform : voda = 1:1. Organski sloj se kvantitativno prebaci u balon u kojem se proizvod suši anhidrovanim natrijum sulfatom preko noći.

Pretpostavljena struktura dobijenog jedinjenja potvrđena je na osnovu rezultata rendgenske strukturne analize.

Kristalografski podaci: monoklinični kristalni sistem, prostorna grupa  $P2_1$ , veličina kristala  $0,42 \times 0,28 \times 0,23 \text{ mm}^3$ ,  $a = 8,7171(3) \text{ \AA}$ ,  $b = 8,9806(5) \text{ \AA}$ ,  $c = 10,7833(4) \text{ \AA}$ ,  $V = 844,02(6) \text{ \AA}^3$  i  $Z = 2$ ,  $\rho_x = 1,292 \text{ g/cm}^3$ ,  $\mu = 0,09 \text{ mm}^{-1}$ . Utačnjavanje sa  $F^2$  (231 parametara i 2907 nezavisnih refleksija) dalo je  $R[F^2 > 2\sigma(F^2)] = 0,045$ ,  $wR(F^2) = 0,101$ ,  $S = 1,05$ .



Slika 1. Molekulska struktura 2-acetilbutirolaktona sa metil estrom L-triptofana

## SYNTHESIS AND CRYSTAL STRUCTURE OF 2-ACETYL BUTYROLACTONE WITH METHYL ESTER OF L-TRYPTOPHANE

**D. Stojković<sup>a</sup>, V. Jevtić<sup>b</sup>, Đ. Petrović<sup>b</sup>, S. Jovičić Milić<sup>b</sup>, N. Vuković<sup>b</sup>, M. Vukić<sup>b</sup>,  
M. Đukić<sup>b</sup>, O. Klisurić<sup>c</sup>**

<sup>a</sup>Institute for Information Technologies University of Kragujevac, Jovana Cvijića bb, 34000 Kragujevac, Serbia; <sup>b</sup>Faculty of Science, Department of Chemistry, University of Kragujevac, Radoja Domanovića 12, 34000 Kragujevac, Serbia; <sup>c</sup>Faculty of Sciences, University of Novi Sad, Trg Dositeja Obradovića 3, 21000 Novi Sad, Serbia  
e-mail: danijela.stojkovic@kg.ac.rs

An equimolar amount of 2-acetylbutyrolactone and methyl ester of L-tryptophane was mixed in an ultrasonic bath. The reaction took place for a period of 4 h. After completion of the reaction the flask was cooled at the room temperature and the product was obtained in the form of a viscous mixture. After cooling, the resulting viscous mixture was dissolved in methanol and clarified by liquid-liquid extraction in a mixture of chloroform : water = 1: 1. The organic layer was then quantitatively transferred to a flask and dried with anhydrous sodium sulfate, overnight.

Proposed structure of the obtained compound was confirmed by X-ray structural analysis.

Crystal data: monoclinic crystal system, space group  $P2_1$ , crystal size  $0.42 \times 0.28 \times 0.23 \text{ mm}^3$ ,  $a = 8.7171(3) \text{ \AA}$ ,  $b = 8.9806(5) \text{ \AA}$ ,  $c = 10.7833(4) \text{ \AA}$ ,  $V = 844.02(6) \text{ \AA}^3$  i  $Z = 2$ ,  $\rho_x = 1.292 \text{ g/cm}^3$ ,  $\mu = 0.09 \text{ mm}^{-1}$ . Refinement with  $F^2$  (231 parameters and 2907 independent reflections) are given  $R[F^2 > 2\sigma(F^2)] = 0.045$ ,  $wR(F^2) = 0.101$ ,  $S = 1.05$ .

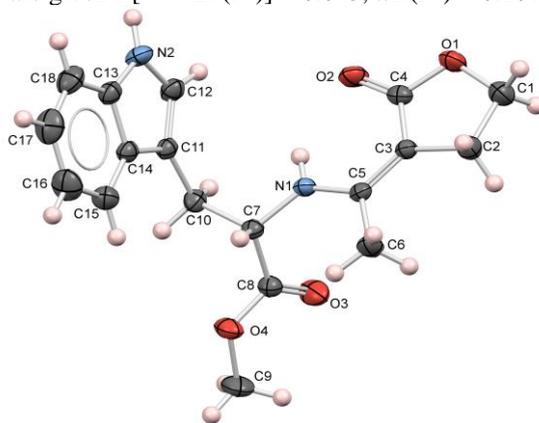


Figure 1. ORTEP plot for molecule 2-acetylbutyrolactone with methyl ester of L-tryptophane

## SINTEZA I KRISTALNA STRUKTURA PROPILENDIAMIN-*N,N'*-DI-2-(3-METIL)- BUTANSKE KISELINE

**D. Petrović<sup>a</sup>, V. Jevtić<sup>a</sup>, S. Jovičić Milić<sup>a</sup>, D. Stojković<sup>b</sup>, O. Klisurić<sup>c</sup>**

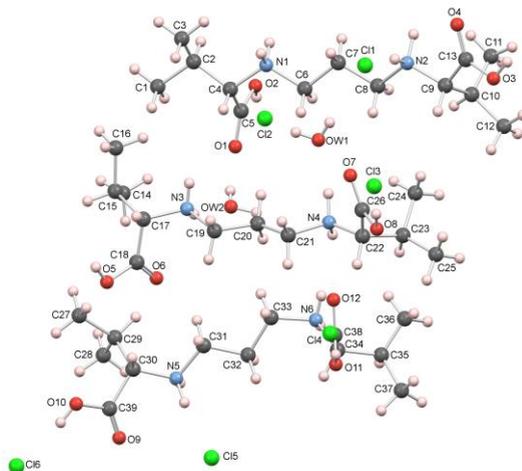
<sup>a</sup>Univerzitet u Kragujevcu, Prirodno-matematički fakultet, Institut za hemiju, Radoja Domanovića 12, 34000 Kragujevac, Srbija; <sup>b</sup>Univerzitet u Kragujevcu, Institut za informacione tehnologije, Jovana Cvijića bb, 34000 Kragujevac, Srbija; <sup>c</sup>Univerzitet u Novom Sadu, Prirodno-matematički fakultet, Trg Dositeja Obradovića 3, 21000 Novi Sad, Srbija

e-mail: djordje.petrovic@pmf.kg.ac.rs

U ovom radu smo predstavili sintezu i kristalnu strukturu novog liganda propilendiamin-*N,N'*-di-2-(3-metil)butanske kiseline hidrata dihidrohlorida. Ligand je okarakterisan infracrvenom, <sup>1</sup>H i <sup>13</sup>C NMR spektroskopijom. Pretpostavljena struktura potvrđena je rendgenskom strukturnom analizom.

S-Valin (2 mol) i NaOH (2 mol) su rastvoreni u 40 cm<sup>3</sup> vode. Reakciona smeša je zagrevana na uljanom kupatilu 4 sata, tokom tog perioda su dodavani 1,3-dibromopropan (1 mol) i Na<sub>2</sub>CO<sub>3</sub> (1 mol) u malim porcijama. Nakon završene reakcije i hlađenja na sobnoj temperaturi dodat je rastvor HCl (1:1) da bi se pH podesio na 4–5 i ostavio u frižideru tokom 24 sata. Hidrat dihidrohlorid propilendiamin-*N,N'*-di-2-(3-metil)butanske kiseline, H<sub>2</sub>-S,S-pddmba·H<sub>2</sub>O·2HCl, istaložen je u obliku belog praha, i odvojen je filtriranjem, ispran vodom, etanolom, etrom i sušen je na vazduhu. Beli talog je rastvoren u HCl (1:1) i ostavljen u frižideru. Nakon nedelju dana formirali su se kristali.

Kristalografski podaci: i kristalni sistem, prostorna grupa *P*2<sub>1</sub>2<sub>1</sub>2<sub>1</sub>, veličina kristala 0,59 × 0,33 × 0,30 mm<sup>3</sup>, *a* = 11,5379(3) Å, *b* = 17,1581(4) Å, *c* = 29,3690(9) Å, *V* = 5814,1 (3) Å<sup>3</sup> i *Z* = 4, ρ<sub>x</sub> = 1,231 g/cm<sup>3</sup>, μ = 0,35 mm<sup>-1</sup>. Utačnjavanje sa *F*<sup>2</sup> (668 parametara 12104 refleksija) dalo je *R*[*F*<sup>2</sup> > 2σ(*F*<sup>2</sup>)] = 0,052, w*R*(*F*<sup>2</sup>) = 0,118, *S* = 1,06.



Slika 1. Molekulska struktura propilendiamin-*N,N'*-di-2-(3-metil)butanske kiseline

## SYNTHESIS AND CRYSTAL STRUCTURE OF PROPYLENEDIAMINE-*N,N'*-DI-2-(3-METHYL)- BUTANOATE ACID

**D. Petrović<sup>a</sup>, V. Jevtić<sup>a</sup>, S. Jovičić Milić<sup>a</sup>, D. Stojković<sup>b</sup>, O. Klisurić<sup>c</sup>**

<sup>a</sup>University of Kragujevac, Faculty of Science, Department of Chemistry, Radoja Domanovića 12, 34000 Kragujevac, Republic of Serbia, <sup>b</sup>University of Kragujevac, Institute for Information Technologies, Department of Science, Jovana Cvijića bb, 34000 Kragujevac, Republic of Serbia, <sup>c</sup>University of Novi Sad, Faculty of Sciences, Trg Dositeja Obradovića 3, 21000 Novi Sad, e-mail: djordje.petrovic@pmf.kg.ac.rs

In this paper, we presented synthesis and crystal structure of new ligand propylenediamine-*N,N'*-di-2-(3-methyl)butanoate acid hydrate dihydrochloride. Ligand was characterized by infrared, <sup>1</sup>H and <sup>13</sup>C NMR spectroscopy. The assumed structure was confirmed by X-ray structural analysis.

S-Valine (2 mol) and NaOH (2 mol) were dissolved in 40 cm of water. The reaction mixture was heated on a oil bath for 4 h during which period 1,3-dibromopropane (1 mol) and Na<sub>2</sub>CO<sub>3</sub> (1 mol) were added in small portions. After that, the HCl solution (1:1) was added in the cold solution to adjusted pH on 4–5 and left in refrigerator over 24 h. The propylenediamine-*N,N'*-di-2-(3-methyl)butanoate acid hydrate dihydrochloride, H<sub>2</sub>-S,S-pddmba·H<sub>2</sub>O·2HCl precipitated as a white powder, and it was separated by filtration, washed with water, ethanol, ether and air dried. The white precipitate was dissolved in HCl (1: 1) and left in the refrigerator. After a week, crystals formed.

Crystal data: orthorhombic crystal system, space group *P*2<sub>1</sub>2<sub>1</sub>2<sub>1</sub>, crystal size 0.59 × 0.33 × 0.30 mm<sup>3</sup>, *a* = 11.5379(3) Å, *b* = 17.1581(4) Å, *c* = 29.3690(9) Å, *V* = 5814.1(3) Å<sup>3</sup> i *Z* = 4, ρ<sub>x</sub> = 1.231 g/cm<sup>3</sup>, μ = 0.35 mm<sup>-1</sup>. Refinement with *F*<sup>2</sup> (668 parameters and 12104 reflections) are given *R*[*F*<sup>2</sup> > 2σ(*F*<sup>2</sup>)] = 0.052, *wR*(*F*<sup>2</sup>) = 0.118, *S* = 1.06.

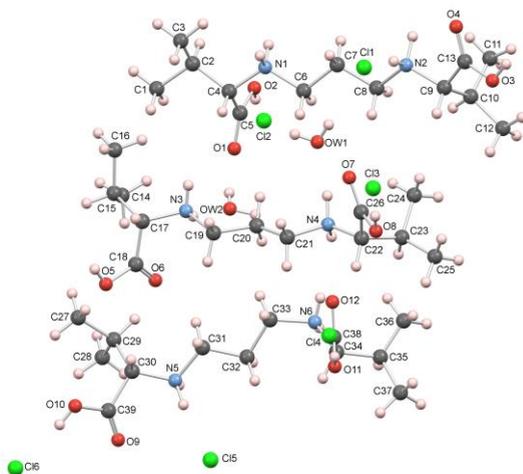


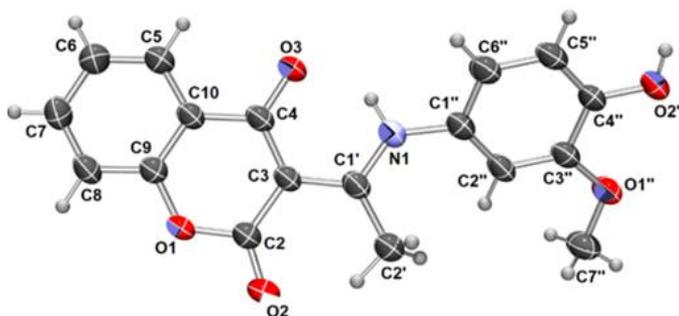
Figure 1. Molecular structure of propylenediamine-*N,N'*-di-2-(3-methyl)butanoate acid

## SINTEZA I KRISTALNA STRUKTURA (E)-3-(1-((4-HIDROKSI-3-METOKSIFENIL)AMINO)-ETILIDEN) HROMAN-2,4-DIONA

**E. H. Avdović**<sup>a</sup>, **K. Molčanov**<sup>c</sup>, **Ž. B. Milanović**<sup>a,b</sup>, **M. Antonijević**<sup>a,b</sup>,  
**D. Simijonović**<sup>a</sup>, **D. Milenković**<sup>a</sup>, **Z. S. Marković**<sup>a</sup>

<sup>a</sup>Institut za informacione tehnologije, Departman za prirodno matematičke nauke, Univerzitet u Kragujevcu, Jovana Cvijića bb, 34000 Kragujevac, Srbija; <sup>b</sup>Institut za hemiju, Prirodno-matematički fakultet, Univerzitet u Kragujevcu, Radoja Domanovića 12, 34000 Kragujevac, Srbija; <sup>c</sup>Institut Ruđer Bošković, Bijenička 54, 10000, Zagreb, Hrvatska.  
e-mail: edina.avdovic@pmf.kg.ac.rs

(E)-3-(1-((4-hidroksi-3-metoksifenil)amino)-etiliden) hroman-2,4-dion je novosintetisani derivat 4-hidroksikumarina dobijen mešanjem i refluktovanjem 3-acetil-4-hidroksikumarina (1 mmol) i 3-metoksi-4-hidroksi anilina (1 mmol) u metanolu [1,2]. Tok reakcije je praćen pomoću tankoslojne hromatografije (toluen : aceton = 7 : 3). Nakon završene reakcije rastvor je ohlađen, a dobijeni kristali su filtrirani i sušeni na vazduhu. Rekristalizacija je vršena iz acetonitrila, gde su dobijeni svetlo braon monokristali. Struktura dobijenog jedinjenja je potvrđena primenom rendgenske strukturne analize. Kristalografski podaci: prostorna grupa  $P\bar{1}$ , veličina kristala  $0,18 \times 0,08 \times 0,05 \text{ mm}^3$ ,  $a = 7,6241(9) \text{ \AA}$ ,  $b = 9,3739(9) \text{ \AA}$ ,  $c = 11,5204(13) \text{ \AA}$ ,  $\alpha = 90,304(9)^\circ$ ,  $\beta = 102,101(10)^\circ$ ,  $\gamma = 113,351(10)^\circ$ ,  $V = 735,52(15) \text{ \AA}^3$ ,  $Z = 2$ ,  $\rho_x = 1,469 \text{ g cm}^{-3}$ ,  $\mu = 0,903 \text{ mm}^{-1}$ ,  $R_1 = (1 \text{ mmol } 0,043, wR_2 = 0,128$ .



**Slika 1.** Struktura (E)-3-(1-((4-hidroksi-3-metoksifenil)amino)-etiliden) hroman-2,4-diona

- [1] E. H. Avdović, I. P. Petrović, M. J. Stevanović, L. Saso, J. M. Dimitrić Marković, N. D. Filipović, M. Ž. Živić, T. N. Cvetić Antić, M. V. Žižić, N. V. Todorović, M. Vukić, S. R. Trifunović, and Z. S. Marković, *Oxid. Med. Cell. Longev.*, 2021 (2021) 18–36.
- [2] E. H. Avdović, Ž. B. Milanović, M. N. Živanović, D. S. Šeklić, I. D. Radojević, Lj. R. Čomić, S. R. Trifunović, A. Amić, and Z. S. Marković, *Inorganica Chim. Acta*, 504 (2020) 119465.

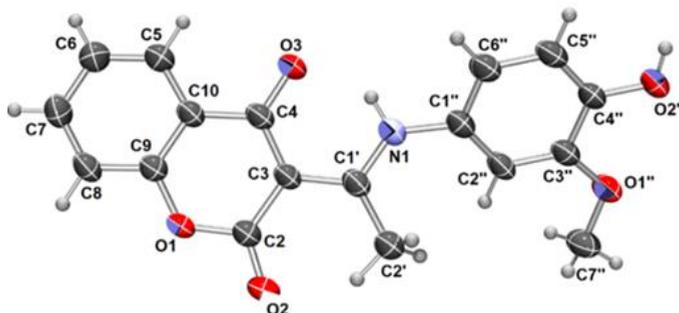
## SYNTHESIS AND CRYSTAL STRUCTURE (E)-3-(1-((4-HYDROXY-3-METHOXYPHENYL)AMINO)-ETHYLIDENE) CHROMANE-2,4-DIONE

**E. H. Avdović<sup>a</sup>, K. Molčanov<sup>c</sup>, Ž. B. Milanović<sup>a,b</sup>, M. Antonijević<sup>a,b</sup>, D. Simijonović<sup>a</sup>, D. Milenković<sup>a</sup>, Z. S. Marković<sup>a</sup>**

<sup>a</sup>Institut for Information Technologies, Department of Science, University of Kragujevac, Jovana Cvijića bb, 34000 Kragujevac, Serbia, <sup>b</sup>University of Kragujevac, Faculty of Science, Department of Chemistry, Radoja Domanovića 12, 34000 Kragujevac, Serbia, <sup>c</sup>Ruder Bošković Institute, Bijenička 54, 10000 Zagreb, Croatia  
e-mail: edina.avdovic@pmf.kg.ac.rs

(E)-3-(1-(4-hydroxy-3-methoxyphenyl)amino)-ethylidene) chromane-2,4-dione is a newly synthesized 4-hydroxycoumarin derivative obtained by mixing and refluxing 3-acetyl-4-hydroxycoumarin (2 mmol) and 3-methoxy-4-hydroxy aniline (2 mmol) in methanol [1,2]. The reaction was monitored by thin layer chromatography (toluene : acetone = 7 : 3). When the reaction was completed, the solution was cooled, and the resulting crystals were filtered and air-dried. Recrystallization was performed from acetonitrile, where light brown single crystals were obtained. The structure of the obtained compound was confirmed using X-ray structural analysis.

Crystallographic data: space group  $P\bar{1}$ , crystal dimensions  $0.18 \times 0.08 \times 0.05$  mm<sup>3</sup>,  $a = 7.6241(9)$  Å,  $b = 9.3739(9)$  Å,  $c = 11.5204(13)$  Å,  $\alpha = 90.304(9)^\circ$ ,  $\beta = 102.101(10)^\circ$ ,  $\gamma = 113.351(10)^\circ$ ,  $V = 735.52(15)$  Å<sup>3</sup>,  $Z = 2$ ,  $\rho_x = 1.469$  g cm<sup>-3</sup>,  $\mu = 0.903$  mm<sup>-1</sup>,  $R_1 = 0.043$ ,  $wR_2 = 0.128$ .



**Figure 1:** Structure (E)-3-(1-(4-hydroxy-3-methoxyphenyl)amino)-ethylidene) chromane-2,4-dione

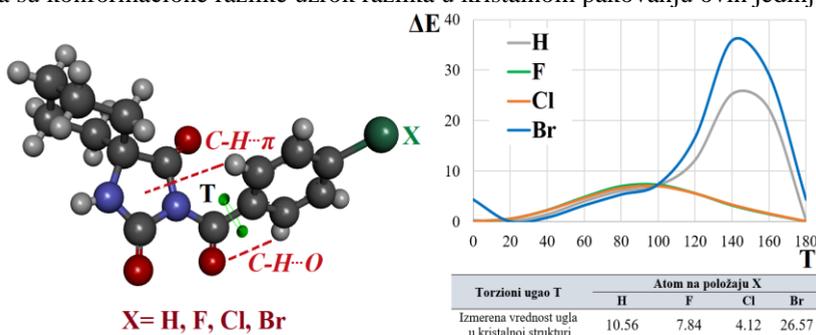
- [1] E. H. Avdović, I. P. Petrović, M. J. Stevanović, L. Saso, J. M. Dimitrić Marković, N. D. Filipović, M. Ž. Živić, T. N. Cvetić Antić, M. V. Žižić, N. V. Todorović, M. Vukić, S. R. Trifunović, and Z. S. Marković, *Oxid. Med. Cell. Longev.*, 2021 (2021) 18–36.
- [2] E. H. Avdović, Ž. B. Milanović, M. N. Živanović, D. S. Šeklić, I. D. Radojević, Lj. R. Čomić, S. R. Trifunović, A. Amić, and Z. S. Marković, *Inorganica Chim. Acta*, 504 (2020) 119465.

## UTICAJ HALOGENOVANJA AROMATIČNOG PRSTENA NA KONFORMACIJU SPIROHIDANTOINSKIH JEDINJENJA

**G. Janjić,<sup>a</sup> I. Đorđević,<sup>a</sup> A. Lazić,<sup>b</sup> L. Radovanović,<sup>b</sup> M. Petković-Benazzouz,<sup>c</sup> J. Rogan,<sup>d</sup> N. Trišović,<sup>d</sup>**

<sup>a</sup> Univerzitet u Beogradu, Institut za hemiju, tehnologiju i metalurgiju, Institut od nacionalnog značaja za Republiku Srbiju, Beograd, Srbija; <sup>b</sup> Inovacioni Centar Tehnološko-Metalurškog Fakulteta, Beograd, Srbija; <sup>c</sup> Fizički fakultet, Univerzitet u Beogradu, Beograd, Srbija; <sup>d</sup> Tehnološko-metalurški fakultet, Univerzitet u Beogradu, Srbija  
e-mail: goran.janjic@ihtm.bg.ac.rs

Kristalografska i kvantnohemijska studija, koja je usmerena na proučavanje efekata fluorovanja benzoil-grupe vezane za cikloheksan-5-spirohiantoin, pokazala je da aromatični prsten ima najveći afinitet prema cikloheksanskom prstenu (nepolarnim grupama), sa kojim gradi C–H $\cdots\pi$  i paralelne interakcije sa velikim pomakom. Uvođenje atoma fluora na aromatični prsten dovodi do povećanog afiniteta, usled stvaranja dodatnih C–H $\cdots$ F interakcija [1]. Dodatno, ova studija je proširena na hlorovane i bromovane derivate. Analizom kristalnog pakovanja četiri derivata spirohidantoina (slika) pokazano je da orijentacija aromatičnog prstena, koja je preko rotabilne C(aromatični)–C(karbonilni) veze odvojena od rigidnog spirohidantoinskog jezgra, određuje trodimenzionalnu supramolekulsku arhitekturu. Energijski profil rotabilne veze (slika) jako zavisi od vrste halogenog atoma vezanog za aromatični prsten (X). Najvišu barijeru (najmanju rotacionu slobodu) ima aromatični prsten sa Br atomom (oko 36 kcal/mol), dok najnižu barijeru imaju prstenovi sa vezanim Cl ili F atomom (oko 7 kcal/mol). Izmerene vrednosti torzionog ugla T (slika) u kristalnim stukturama, koji definiše rotabilnost ove veze, odgovaraju minimumima energije na energijskim profilima. Kod ovih orijentacija aromatični prstenovi istovremeno grade C–H $\cdots\pi$  interakcije sa hidantoinским prstenom i C–H $\cdots$ O interakciju sa karbonilnom grupom koja premošćuje dva prstena. Na osnovu ovih rezultata može se zaključiti da su orijentacije aromatičnog prstena određene unutarmolekulskim interakcijama, a ne međumolekulskim interakcijama, kao i da su konformacione razlike uzrok razlika u kristalnom pakovanju ovih jedinjenja.



[1] K. Gak Simić, I. Đorđević, A. Lazić, L. Radovanović, M. Petković-Benazzouz, J. Rogan, N. Trišović, G. Janjić, *CrystEngComm*, **23** (2021) 2606–2622.

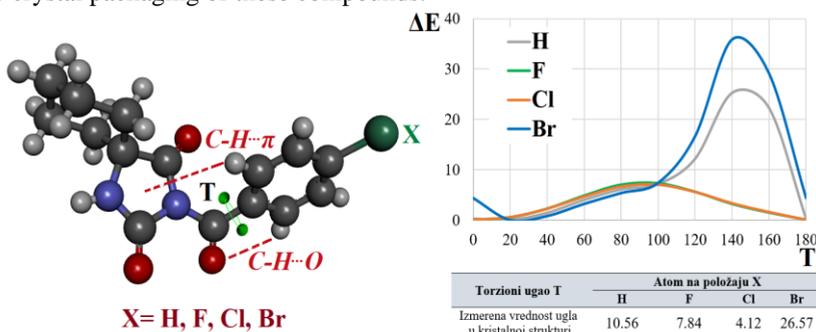
## INFLUENCE OF HALOGENATION OF AROMATIC RING ON THE CONFORMATION OF SPIROHYDANTOIN COMPOUNDS

G. Janjić,<sup>a</sup> I. Đorđević,<sup>a</sup> A. Lazić,<sup>b</sup> L. Radovanović,<sup>b</sup> M. Petković-Benazzouz,<sup>c</sup> J. Rogan,<sup>d</sup> N. Trišović,<sup>d</sup>

<sup>a</sup> Institute of Chemistry, Technology and Metallurgy, National Institute of the Republic of Serbia, University of Belgrade, Belgrade, Serbia; <sup>b</sup> Innovation Centre of the Faculty of Technology and Metallurgy, Belgrade, Serbia; <sup>c</sup> Faculty of Physics, University of Belgrade, Belgrade, Serbia; <sup>d</sup> Faculty of Technology and Metallurgy, University of Belgrade, Belgrade, Serbia  
e-mail: goran.janjic@ihtm.bg.ac.rs

The crystallographic and quantum chemical study, focused on the effects of fluorination of the benzoyl group bound to the spirohydantoin moiety, showed that the aromatic ring has the highest affinity towards the cyclohexene ring (nonpolar groups), thus forming C–H $\cdots\pi$  and parallel interactions at large offset. Introduction of a fluorine atom into the aromatic ring leads to higher affinity, due to formation of additional C–H $\cdots$ F interactions [1].

Subsequently, the present study has been extended to chlorinated and brominated derivatives. An analysis of the crystal packaging of four spirohydantoin derivatives (Figure) has shown that the orientation of the aromatic ring, bound to the rigid spirohydantoin moiety by the rotatable C(aromatic)–C(carbonyl) bond, determines the three-dimensional supramolecular architecture. The energy profile of the rotatable bond (Figure) strongly depends on the halogen atom bound to the aromatic ring (X). The highest barrier (the lowest rotational freedom) has been found for the aromatic ring with the Br atom (36 kcal/mol), while the rings with the Cl or F atom have the lowest barrier (7 kcal/mol). The measured values of the torsion angle T in the crystal structures (Figure), which defines the rotability of the mentioned bond, correspond to the energy minima on the energy profiles. In these orientations, the aromatic ring simultaneously forms C–H $\cdots\pi$  interactions with the hydantoin ring and C–H $\cdots$ O interaction with the carbonyl spacer group. Based on these results, one can conclude that the orientation of the aromatic ring is defined by intramolecular interactions, not by intermolecular interactions, as well as that the conformational differences further cause differences in the crystal packaging of these compounds.



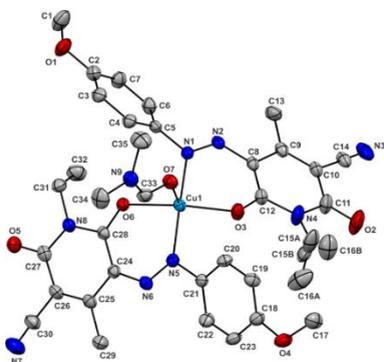
[1] K. Gak Simić, I. Đorđević, A. Lazić, L. Radovanović, M. Petković-Benazzouz, Jelena Rogan, N. Trišović, G. Janjić, *CrystEngComm*, **23** (2021) 2606–2622.

## KRISTALNA STRUKTURA I ANTIOKSIDATIVNA AKTIVNOST Cu(II)-KOMPLEKSA AZO PIRIDONSKE BOJE

J. Ladarević<sup>a</sup>, L. Radovanović<sup>b</sup>, B. Božić<sup>c</sup>, A. Mašulović<sup>a</sup>, J. Rogan<sup>a</sup>, D. Mijin<sup>a</sup>

<sup>a</sup> Tehnološko-metalurški fakultet, Univerzitet u Beogradu, Karnegijeva 4, Beograd, Srbija; <sup>b</sup> Inovacioni centar Tehnološko-metalurškog fakulteta, Univerzitet u Beogradu, Karnegijeva 4, Beograd, Srbija; <sup>c</sup> Institut za fiziologiju i biohemiju „Ivan Đaja”, Biološki fakultet, Univerzitet u Beogradu, Studentski trg 16, Beograd, Srbija  
e-mail: jmirkovic@tmf.bg.ac.rs

Heterociklične azo boje zauzimaju značajno mesto u oblasti koordinacione hemije, usled njihove široke upotrebe u elektrohemijskim i optičkim istraživanjima [1]. Sa druge strane, kompleksi metala sa heterocikličnim ligandima imaju značajan biološki potencijal, jer ispoljavaju citotoksičnost, antimikrobnu i antioksidativnu aktivnost [2]. U ovom radu, azoboja na bazi piridona (5-(4-metoksifenilazo)-1-etil-3-cijano-6-hidroksi-4-metil-2-piridon, HL) je upotrebljena za kompleksiranje sa Cu(II)-jonima u *N,N*-dimetilformamidu (DMF) na sobnoj temperaturi. Dobijeni kompleks (CuL<sub>2</sub>(DMF)) je okarakterisan UV-Vis i ATR-FTIR spektroskopijom, kao i rendgenskom strukturnom analizom. Asimetrična jedinica kompleksa se sastoji iz jednog Cu(II)-atoma, dva helatna L-liganda i jednog koordiniranog molekula DMF (slika 1). Geometrija oko Cu(II)-atoma je kvadratno-piramidalna, čiju bazu ravan čine dva O-atoma i dva N-atoma iz dva L-liganda, dok apikalni položaj zauzima O-atom iz koordiniranog molekula DMF. Kristalno pakovanje uspostavljeno je prisustvom različitih nekovalentnih interakcija među diskretnim jedinkama kompleksa (C–H···O,  $\pi$ – $\pi$  i slobodan elektronski par– $\pi$ ).



Asimetrična jedinica Cu(II)-kompleksa. Termalni elipsoidi nacrtani su sa verovatnoćom 30 %. H atomi nisu prikazani.

Asimetrična jedinica kompleksa se sastoji iz jednog Cu(II)-atoma, dva helatna L-liganda i jednog koordiniranog molekula DMF (slika 1). Geometrija oko Cu(II)-atoma je kvadratno-piramidalna, čiju bazu ravan čine dva O-atoma i dva N-atoma iz dva L-liganda, dok apikalni položaj zauzima O-atom iz koordiniranog molekula DMF. Kristalno pakovanje uspostavljeno je prisustvom različitih nekovalentnih interakcija među diskretnim jedinkama kompleksa (C–H···O,  $\pi$ – $\pi$  i slobodan elektronski par– $\pi$ ).

Antioksidativna aktivnost polazne azo boje i kompleksa je određena pomoću ABTS (2,2'-azinobis(3-etilbenzotiazolin-6-sulfonat) testa. Kompleks je pokazao značajniju antioksidativnu aktivnost u odnosu na polaznu azo boju i askorbinsku kiselinu korišćenu kao standard.

*Kristalografski podaci:* C<sub>70</sub>H<sub>74</sub>N<sub>18</sub>O<sub>14</sub>Cu<sub>2</sub>, *M*<sub>r</sub> = 1518,55, trikliničan sistem, prostorna grupa *P* $\bar{1}$ , *a* = 10,191(2), *b* = 13,012(3), *c* = 14,692(3) Å,  $\alpha$  = 79,73(3),  $\beta$  = 71,96(3),  $\gamma$  = 80,20(3) °, *V* = 1808,9(7) Å<sup>3</sup>, *R*<sub>1</sub> = 0,0539 za 4663 refleksija sa *I* ≥ 2σ(*I*).

[1] X. Zhao, H. Qian, W. Huang, *DyesPigments*, **149** (2018) 796–803.

[2] N.M. Mallikarjuna, J. Keshavayya, M.R. Maliyappa, R.A. S. Ali, T. Venkatesh, *J. Mol. Struct.*, **1165** (2018) 28–36.

## CRYSTAL STRUCTURE AND ANTIOXIDANT ACTIVITY OF Cu(II) COMPLEX OF AZO PYRIDONE DYE

J. Ladarević<sup>a</sup>, L. Radovanović<sup>b</sup>, B. Božić<sup>c</sup>, A. Mašulović<sup>a</sup>, J. Rogan<sup>a</sup>, D. Mijin<sup>a</sup>

<sup>a</sup> Faculty of Technology and Metallurgy, University of Belgrade, Karnegijeva 4, Belgrade, Serbia; <sup>b</sup> Innovation Centre of the Faculty of Technology and Metallurgy, University of Belgrade, Karnegijeva 4, Belgrade, Serbia; <sup>c</sup> Institute of Physiology and Biochemistry "Ivan Đaja", Faculty of Biology, University of Belgrade, Studentskitrg 16, Belgrade, Serbia  
e-mail: jmirkovic@tmf.bg.ac.rs

In recent years, heterocyclic azo dyes have played significant role in the development of the coordination chemistry, due to their wide application in the different fields of electrochemical and optical studies [1]. Moreover, metal complexes with heterocyclic ligands in their architecture have great biological potential since they exhibit cytotoxicity, antimicrobial and antioxidant activity [2]. In this work, pyridone azo dye (5-(4-methoxyphenylazo)-1-ethyl-3-cyano-6 hydroxy-4-methyl-2-pyridone, HL) is used for the complexation with Cu(II) ions in *N,N*-dimethylformamide (DMF) at room temperature. The obtained complex (CuL<sub>2</sub>(DMF)) is characterized by UV-Vis and ATR-FTIR spectroscopy and single-crystal X-ray analysis. The asymmetric unit of complex is comprised of one Cu(II) atom, two chelate L ligands and one coordinated DMF molecule (Figure 1). The coordination geometry of Cu(II) atom is square-pyramidal with basal plane comprised of two O and two N atoms originating from L ligands while apical position is occupied by one O atom from coordinated DMF. The crystal packing is established with the presence of different non-covalent interactions between discrete complex units (C–H···O/N,  $\pi$ - $\pi$  and lone pair- $\pi$ ).

Furthermore, antioxidant activities of the starting azo dye and the complex have been evaluated by the ABTS (2,2'-azinobis-(3-ethylbenzothiazoline-6-sulfonate)) radical-scavenging assay. The complex exhibited more potent antioxidant activity than the starting dye and ascorbic acid used as standard.

*Crystal data:* C<sub>70</sub>H<sub>74</sub>N<sub>18</sub>O<sub>14</sub>Cu<sub>2</sub>, *M*<sub>r</sub> = 1518.55, triclinic, space group *P*  $\bar{1}$ , *a* = 10.191(2), *b* = 13.012(3), *c* = 14.692(3) Å,  $\alpha$  = 79.73(3),  $\beta$  = 71.96(3),  $\gamma$  = 80.20(3)°, *V* = 1808.9(7) Å<sup>3</sup>, *R*<sub>1</sub> = 0.0539 for 4663 observed reflections with *I* ≥ 2σ(*I*).

[1] X. Zhao, H. Qian, W. Huang, *Dyes Pigments*, **149** (2018) 796–803.

[2] N.M. Mallikarjuna, J. Keshavayya, M.R. Maliyappa, R.A. S. Ali, T. Venkatesh, *J. Mol. Struct.*, **1165** (2018) 28–36.

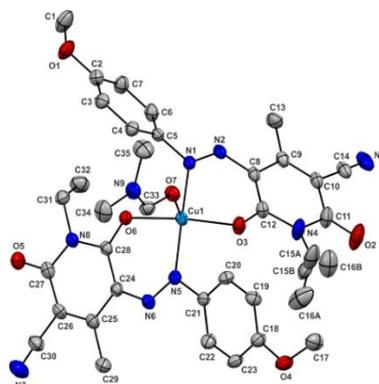


Figure 1. Asimetric unit of Cu(II) complex. Thermal ellipsoids were drawn at the 30 % probability level. H are not presented.

## МОЛЕКУЛСКЕ И КРИСТАЛНЕ СТРУКТУРЕ КОМПЛЕКСА Zn(II) СА ТИАЗОЛИЛ-ХИДРАЗОНИМА

**Јована Арашков<sup>а</sup>, Александар Вишњевац<sup>б</sup>, Тамара Тодоровић<sup>а</sup>, Ненад Филиповић<sup>в</sup>**

<sup>а</sup>Универзитет у Београду – Хемијски факултет, Студентски трг 12-16, Београд, Србија;

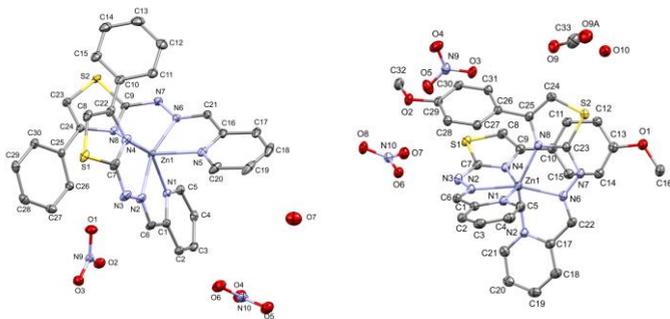
<sup>б</sup>Институт Руђер Бошковић, Бјеничка цеста 54, Загреб, Хрватска;

<sup>в</sup>Универзитет у Београду – Пољопривредни факултет, Немањина 6, Београд – Земун, Србија

e-mail: araskovj@chem.bg.ac.rs

Нови комплекси цинка(II) са лигандима на бази тиазолил-хидразона (HLS<sup>1</sup> и HLS<sup>2</sup>) су синтетисани директном реакцијом лиганата са Zn(NO<sub>3</sub>)<sub>2</sub> · 4H<sub>2</sub>O у метанолу. Комплекси су добијени у облику монокристала и структура им је решена применом рендгенске структурне анализе. Комплекси [Zn(HLS<sup>1</sup>)<sub>2</sub>](NO<sub>3</sub>)<sub>2</sub> · H<sub>2</sub>O (**1-NO3**) и [Zn(HLS<sup>2</sup>)<sub>2</sub>](NO<sub>3</sub>)<sub>2</sub> · CH<sub>3</sub>OH · H<sub>2</sub>O (**2-NO3**) имају дисторговану октаедарску геометрију при чему су за јон Zn(II) меридијално координована два неутрална лиганда (Слика 1). У спољној сфери комплекса се налазе нитратни јони и молекули кристалних растварача. Лиганди су координовани триденатно преко пиридинског, иминског и тиазоловог атома азота, формирајући два петочлана хелатна прстена око централног јона метала. Кристално паковање комплекса засновано је на класичним и некласичним водоничним интеракцијама, као и ароматичним стекинг интеракцијама. Експерименти дифракције X-зрака са узорка праха потврдили су да су добијени једнофазни производи. Анализа типова и дистрибуције нековалентних интеракција у чврстом агрегатном стању је урађена рачунарским методама конструкције Хиршфилдових површина и дводимензионалних псеудосиметричних графикана отисака прстију.

**Слика 1.** ORTEP приказ молекулске структуре **1-NO3** (лево) и **2-NO3** (десно). Термални елипсоиди су приказани са 30% вероватноће. Атоми Н су изостављени ради прегледности.



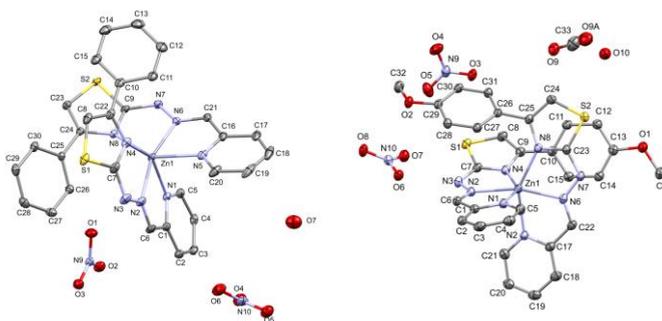
## MOLECULAR AND CRYSTAL STRUCTURES OF Zn(II) COMPLEXES WITH THIAZOLYL-HYDRAZONES

**Jovana Araškov<sup>a</sup>, Aleksandar Višnjevac<sup>b</sup>, Tamara Todorović<sup>a</sup>, Nenad Filipović<sup>c</sup>**

<sup>a</sup>University of Belgrade – Faculty of Chemistry, Studentski trg 12-16, Belgrade, Serbia; <sup>b</sup>Institute Ruđer Bošković, Bjenička cesta 54, Zagreb, Croatia; <sup>c</sup>University of Belgrade – Faculty of Agriculture, Nemanjina 6, Belgrade – Zemun, Serbia  
e-mail: araskovj@chem.bg.ac.rs

New zinc (II) complexes with thiazolyl-hydrazone-based ligands (HLS<sup>1</sup> and HLS<sup>2</sup>) were synthesized by direct reaction of ligands with Zn(NO<sub>3</sub>)<sub>2</sub> · 4H<sub>2</sub>O in methanol. The complexes were obtained in the form of single crystals and their structures were solved by X-ray structural analysis. Complexes [Zn(HLS<sup>1</sup>)<sub>2</sub>](NO<sub>3</sub>)<sub>2</sub> · H<sub>2</sub>O (**1-NO3**) and [Zn(HLS<sup>2</sup>)<sub>2</sub>](NO<sub>3</sub>)<sub>2</sub> · CH<sub>3</sub>OH · H<sub>2</sub>O (**2-NO3**) have a distorted octahedral geometry with two neutral meridionally coordinated ligands (Figure 1). In the outer sphere of the complexes there are nitrate ions and molecules of crystalline solvents. The ligands were coordinated tridentally *via* the pyridine, imine, and thiazole nitrogen atoms, forming two five-membered chelate rings around the central metal ion. The crystal packaging of the complex is based on classical and non-classical hydrogen interactions, as well as aromatic stacking interactions. Powder X-ray diffraction experiments confirmed that single-phase products were obtained. The analysis of types and distribution of noncovalent interactions in the solid state was performed by computational methods of construction of Hirschfeld surfaces and two-dimensional pseudo-symmetric fingerprint plots.

**Figure 1.** ORTEP drawings of molecular structures of **1-NO3** (left) and **2-NO3** (right). Thermal ellipsoids are shown at the 30% probability level. Hydrogen atoms are omitted for clarity.



## КОМПЛЕКСИ Zn(II) СА ШИФОВИМ БАЗАМА КООРДИНАЦИОНОГ БРОЈА ПЕТ

**М. Јевтовић<sup>а</sup>, Н. Стевановић<sup>б</sup>, Д. Радановић<sup>в</sup>, Д. Сладић<sup>б</sup>, К. Анђелковић<sup>б</sup>, Б. Чобелјић<sup>б</sup>**

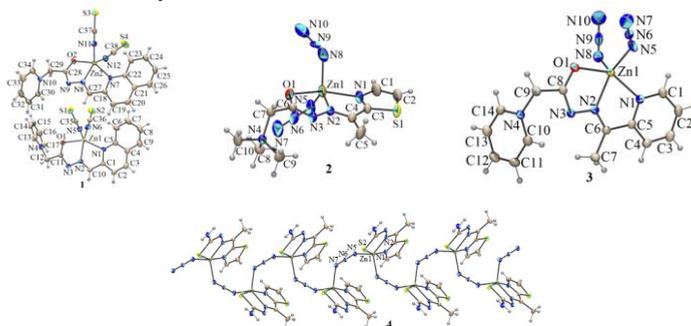
<sup>а</sup> Иновациони центар Хемички факултет, Универзитет у Београду, Студентски трг 12–16, 11000 Београд, Србија

<sup>б</sup> Хемички факултет, Универзитет у Београду, Студентски трг 12–16, 11000 Београд, Србија

<sup>в</sup> Универзитет у Београду – Институт за хемију, зехнологију и металургију, Центар за хемију, Негошева 12, 11000 Београд, Србија

e-mail: mima@chem.bg.ac.rs

Четири нова  $[ZnLX_2]$  комплекса:  $[ZnL^1(NCS)_2]$  (**1**),  $[ZnL^2(N_3)_2]$  (**2**),  $[ZnL^3(N_3)_2]$  (**3**) и  $[ZnL^4(N_3)]_n$  (**4**) су синтетисана и окарактерисана помоћу SC-XRD метода. У комплексима **1**–**4** Zn(II) јон је пентакоординан са тридентатним Шифовим базама и два псеудохалидна лиганда. У комплексима **2** и **3**, азидо лиганд има улогу монодентатног лиганда, док у комплексу **4** функционише као  $\mu_{1,3}$  мосни лиганд формирајући 1D полимерну структуру. Комплекс **1** кристалише са два независна молекула у асиметричној јединици триклиничне просторне групе *P*-1. Два симетријски независна молекула имају исту координациону геометрију, а различиту конформацију лиганда. Комплекси **2**–**4** кристалишу са једним молекулом у асиметричној јединици моноклиничне *P*2<sub>1</sub>/*c* просторне групе. Геометрија око Zn(II) јона је дисторгована квадратно пирамидална за комплексе **1** и **3** са  $\tau$  индексом у области 0.08–0.36 и практично интермедијарна SQP и ТВР у случају комплекса **2** ( $\tau = 0.43$ ) и **4** ( $\tau = 0.46$ ).  $[ZnLX_2]$  комплекси координационог броја пет са тридентатним хидразонским лигандима који имају структурне промене у ароматичном делу или хидразонском фрагменту су интересантни са аспекта њиховог потенцијала да служе као катализатори у реакцији кетон-амин-алкин купловања.



## SCHIFF BASE Zn(II) COMPLEXES WITH COORDINATION NUMBER FIVE

**M. Jevtović<sup>a</sup>, N. Stevanović<sup>b</sup>, D. Radanović<sup>c</sup>, D. Sladić<sup>b</sup>, K. Anđelković<sup>b</sup>, B. Čobeljić<sup>b</sup>**

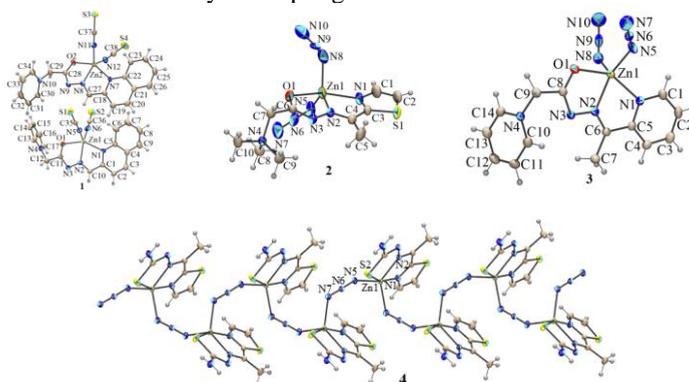
<sup>a</sup> *Inovacion center Faculty of Chemistry, University of Belgrade, Studentski trg 12-16, 11000 Belgrade, Serbia;*

<sup>b</sup> *Faculty of Chemistry, University of Belgrade, Studentski trg 12-16, 11000 Belgrade, Serbia;*

<sup>c</sup> *University of Belgrade-Institute of Chemistry, Technology and Metallurgy, Department of Chemistry, Njegoševa 12, 11000 Belgrade, Serbia;*

e-mail: mima@chem.bg.ac.rs

Four new  $[\text{ZnLX}_2]$  complexes:  $[\text{ZnL}^1(\text{NCS})_2]$  (**1**),  $[\text{ZnL}^2(\text{N}_3)_2]$  (**2**),  $[\text{ZnL}^3(\text{N}_3)_2]$  (**3**) and  $[\text{ZnL}^4(\text{N}_3)]_n$  (**4**) have been prepared and characterized by SC-XRD methods. The Zn(II) ion in **1–4** has fivefold coordination with tridentate Schiff base ligand and two pseudohalide ligands. In **2** and **3**, the azide anions act as monodentate ligands, while in **4** display single  $\mu_{1,3}$  bridging mode forming 1D polymeric chains. Complex **1** crystallizes with two independent molecules in the asymmetric unit of the triclinic  $P-1$  space group. The two independent molecules differ for the ligand conformation, but present the same coordination geometry. The complexes **2–4** crystallize with a single molecule in the asymmetric unit of the monoclinic  $P2_1/c$  space group. The geometry around Zn(II) is distorted square-based pyramidal for **1** and **3** with  $\tau$  index in the range 0.08–0.36 and almost intermediate SQP and TBP in the case of **2** ( $\tau = 0.43$ ) and **4** ( $\tau = 0.46$ ). The five-coordinate  $[\text{ZnLX}_2]$  complexes with tridentate hydrazone-based ligands having structural changes in the aromatic part or hydrazone moiety are interesting from the aspect of their potentials to serve as catalysts in the ketone-amine-alkyne coupling reaction.

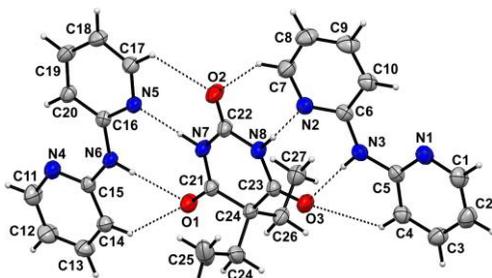


## KRISTALNA STRUKTURA KOKRISTALA 2,2'-DIPIRIDILAMIN–DIETIL-BARBITURNE KISELINE

**L. Radovanović<sup>a</sup>, I. Đorđević<sup>b</sup>, M. V. Rodić<sup>c</sup>, J. Rogan<sup>d</sup>**

<sup>a</sup> Inovacioni centar Tehnološko-metalurškog fakulteta, Univerzitet u Beogradu, Beograd, Srbija; <sup>b</sup> Institut za hemiju, tehnologiju i metalurgiju, Univerzitet u Beogradu, Beograd, Srbija; <sup>c</sup> Prirodno-matematički fakultet, Univerzitet u Novom Sadu, Novi Sad, Srbija; <sup>d</sup> Tehnološko-metalurški fakultet, Univerzitet u Beogradu, Beograd, Srbija  
e-mail: lradovanovic@tmf.bg.ac.rs

Dietil derivat barbiturne kiseline (H<sub>2</sub>debarb) pripada klasi lekova koji se koriste u lečenju anksioznosti, epilepsije i nekih psihijatrijskih poremećaja i predstavlja jak donor vodonične veze preko dve –NH grupe, kao i slab akceptor preko tri karbonilna O-atoma [1]. 2,2'-Dipiridilamin (dipya) je organska baza sa svojstvom prenosa naelektrisanja koja se može javiti u nekoliko protonovanih oblika i uspostaviti jedan od devet načina koordinacije [2]. Kokristal (H<sub>2</sub>debarb)(dipya)<sub>2</sub>, **1**, dobijen je metodom isparavanja rastvarača iz H<sub>2</sub>O/EtOH reakcione smeše koja je sadržala Na(Hdebarb) i dipya u molskom odnosu 1:1. Rendgenska strukturna analiza pokazala je da se asimetrična jedinica **1** sastoji od jedne H<sub>2</sub>debarb i dve dipya jedinice povezane jakim N/C–H···O/N interakcijama (slika 1). Glavna strukturna karakteristika **1** jeste sloj formiran preko N/C–H···O/N interakcija, dok su između slojeva uočene slabe π···π interakcije. Izračunate površine elektrostatičkog potencijala molekula **1** pokazale su najelektrofilnije i najnukleofilne delove, dok su Hiršfildova površina (slika 2) i 2D grafički prikazi otisaka omogućili analizu intermolekulskih interakcija i kvantifikaciju doprinosa različitih intermolekulskih kontakata prisutnih u kristalnoj strukturi.



Slika 1. Asimetrična jedinica kokristala **1**. Termalni elipsoidi nacrtani su sa verovatnoćom 30 %.

*Kristalografski podaci:* C<sub>28</sub>H<sub>30</sub>N<sub>8</sub>O<sub>3</sub>, M<sub>r</sub> = 526,6, trikliničan sistem, prostorna grupa P–1, a = 11,4015(5), b = 12,1485(4), c = 12,1839(5) Å, α = 70,012(3), β = 64,655(4), γ = 64,500(4) °, V = 1350,68(11) Å<sup>3</sup>, Z = 2, F(000) = 556, ρ<sub>x</sub> = 1,295 g cm<sup>-3</sup>, μ(Mo Kα) = 0,088 mm<sup>-1</sup>. Utačnjavanje sa F<sup>2</sup> (358 parametara) dalo je R<sub>1</sub> = 0,0555, wR<sub>2</sub> = 0,1099, S = 1,029 za sve podatke i R<sub>1</sub> = 0,041 za 3835 uočenih refleksija sa I ≥ 2σ(I).

[1] K.T. Mahmudov, M.N. Kopylovich, A.M. Maharramov, M.M. Kurbanova, A.V. Gurbanov, A.J.L. Pombeiro, *Coordination Chemistry Reviews*, **265** (2014) 1–37.

[2] D.W. Brogden, J.F. Berry, *Comments on Inorganic Chemistry*, **36** (2016) 17–37.

## CRYSTAL STRUCTURE OF 2,2'-DIPYRIDYLAMINE– DIETHYLBARBITURIC ACID CO-CRYSTAL

**L. Radovanović<sup>a</sup>, I. Đorđević<sup>b</sup>, M. V. Rodić<sup>c</sup>, J. Rogan<sup>d</sup>**

<sup>a</sup> Innovation Centre of the Faculty of Technology and Metallurgy, University of Belgrade, Belgrade, Serbia; <sup>b</sup> Institute of Chemistry, Technology and Metallurgy, University of Belgrade, Belgrade, Serbia; <sup>c</sup> Faculty of Sciences, University of Novi Sad, Novi Sad, Serbia; <sup>d</sup> Faculty of Technology and Metallurgy, University of Belgrade, Belgrade, Serbia  
e-mail: lradovanovic@tmf.bg.ac.rs

Diethyl derivative of barbituric acid (H<sub>2</sub>debarb), that belongs to a class of drugs used in treatment of anxiety, epilepsy and some psychiatric disorders, is strong hydrogen bond donor *via* two –NH groups and weak acceptor through its three carbonyl O atoms [1]. 2,2'-Dipyridylamine (dipya) is a charge transfer organic base that can exist in several protonation states adopting one of nine coordination modes [2]. A co-crystal (H<sub>2</sub>debarb)(dipya)<sub>2</sub>, **1**, was prepared by solvent evaporation method from the H<sub>2</sub>O/EtOH reaction mixture containing Na(Hdebarb) and dipya in molar ratio 1:1. The single crystal X-ray analysis revealed that asymmetric unit of **1** is comprised of one H<sub>2</sub>debarb and two dipya moieties connected by strong N/C–H···O/N interactions (Figure 1). The main structural feature is layer formed by N/C–H···O/N interactions, while among the layers the weak  $\pi\cdots\pi$  stacking interactions were observed. Computed the molecular electrostatic potential surfaces of **1** revealed the most electrophilic and nucleophilic parts, while the Hirshfeld surfaces (Figure 2) and 2D fingerprint plots enabled the analysis of intermolecular interactions and quantify the contribution of various intermolecular contacts present in the crystal structure of **1**.

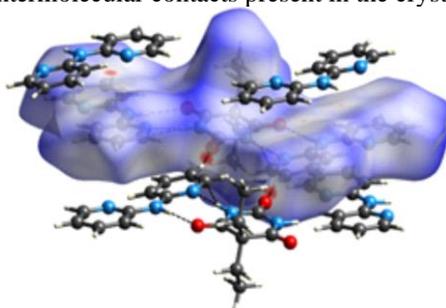


Figure 2. Interactions and calculated Hirshfeld surface in **1**.

*Crystal data:* C<sub>28</sub>H<sub>30</sub>N<sub>8</sub>O<sub>3</sub>, *M<sub>r</sub>* = 526.6, triclinic system, space group *P*–1, *a* = 11.4015(5), *b* = 12.1485(4), *c* = 12.1839(5) Å,  $\alpha$  = 70.012(3),  $\beta$  = 64.655(4),  $\gamma$  = 64.500(4) °, *V* = 1350.68(11) Å<sup>3</sup>, *Z* = 2, *F*(000) = 556,  $\rho_x$  = 1.295 g cm<sup>-3</sup>,  $\mu$ (Mo *K* $\alpha$ ) = 0.088 mm<sup>-1</sup>. The refinement on *F*<sup>2</sup> (358 parameters) yielded *R*<sub>1</sub> = 0.0555, *wR*<sub>2</sub> = 0.1099, *S* = 1.029 for all data, and *R*<sub>1</sub> = 0.041 for 3835 observed reflections with *I* ≥ 2 $\sigma$ (*I*).

[1] K.T. Mahmudov, M.N. Kopylovich, A.M. Maharramov, M.M. Kurbanova, A.V. Gurbanov, A.J.L. Pombeiro, *Coordination Chemistry Reviews*, **265** (2014) 1–37.

[2] D.W. Brogden, J.F. Berry, *Comments on Inorganic Chemistry*, **36** (2016) 17–37.

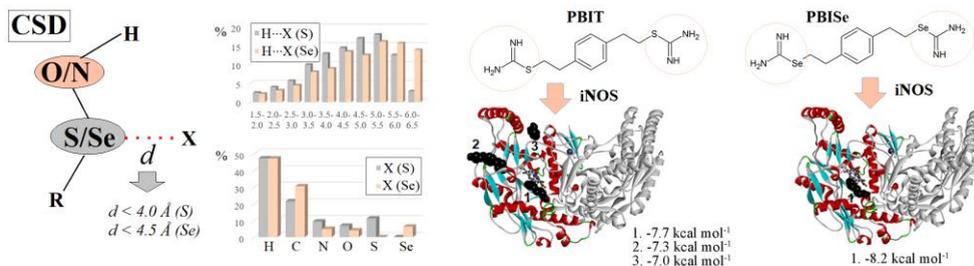
## ZAMENA SUMPORA SELENOM. EFEKAT POLARNIH GRUPA IZ OKRUŽENJA

Lj. Suručić<sup>a</sup>, T. Tadić<sup>b</sup>, A. Nastasović<sup>b</sup>, B. Marković<sup>b</sup>, Z. Sandić<sup>c</sup>, A. Onjia<sup>d</sup>, G. Janjić<sup>b</sup>

<sup>a</sup>Univerzitet u Banjoj Luci, Medicinski fakultet, Save Mrkalja 14, Banja Luka, Republika Srpska, Bosna i Hercegovina; <sup>b</sup>Univerzitet u Beogradu – Institut za hemiju, tehnologiju i metalurgiju – IHTM, Njegoševa 12, Beograd, Srbija; <sup>c</sup>Univerzitet u Banjoj Luci, Prirodno matematički fakultet, Mladena Stojanovića 2, Banja Luka, Republika Srpska, Bosna i Hercegovina; <sup>d</sup>Univerzitet u Beogradu, Tehnološko-metalurški fakultet, Karnegijeva 4, Beograd, Srbija  
e-mail: ljiljana.surucic@med.unibl.org

Statistička analiza podataka dobijenih iz kristalnih struktura, ekstrahovanih iz Kembričke baze strukturnih podataka (eng. CSD), pokazala je da atomi S i Se u nepolarnom okruženju pokazuju sličnu tendenciju ka pojedinim tipovima interakcija [1]. Najbrojnije su strukture sa C-H...S i C-H...Se interakcijama (~ 80%), dok su Se...Se i S...S interakcije druge po zastupljenosti (~ 5%). Kada se S ili Se nalaze u polarnom okruženju (u neposrednoj blizini imaju O-H ili N-H grupu) raspodela pojedinih tipova interakcija je nešto drugačija. Statistička analiza interakcija S i Se (kriterijumi:  $d < 4.0 \text{ \AA}$  (za S)  $d < 4.5 \text{ \AA}$  (za Se), Slika) pokazala je da su najbrojnije interakcije sa H atomom (u oba slučaja oko 47%), dok su interakcije koje uključuju C atome (interakcije sa nepolarnim grupama) druge po zastupljenosti. Interakcije sa nepolarnim C-H grupama su nešto zastupljenije kod Se (30%) nego kod S atoma (21%), dok su interakcije sa polarnim O-H i N-H grupama manje brojne kod Se (ukupno 10%) nego kod S atoma (ukupno 16%). Neočekivano, simultane interakcije X atoma sa S/Se atomom i polarnom O-H/N-H grupom ( $H \cdots X < 3.5 \text{ \AA}$ ) su zastupljene u udelu od samo 20% (Slika).

Rezultati doking studije sugerišu da bi PBiSe (Se jedinjenje) moglo biti bolji inhibitor iNOS (inducibilne azot-monoksid sintaze) nego njegov S derivat (PBIT). Sve orijentacije PBiSe su grupisane na istom mestu (aktivno mesto, Slika) što dovodi do mnogo bolje efikasnosti ovog molekula u odnosu na PBIT, za kojeg su nađena tri mesta vezivanja (Slika). Ovo se slaže sa eksperimentalnim rezultatima koji ukazuju na to da PBiSe ubija ćelije melanoma više od 10 puta efikasnije od drugog iNOS inhibitora (PBIT).



[1] I. Đorđević, M. Popadić, M. Sarvan, M. Petković-Benazzouz, G. Janjić, *Acta Cryst.* **B76** (2020) 122-136.

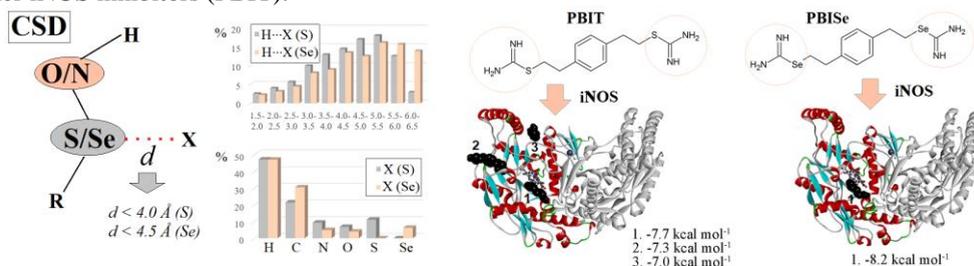
## SUBSTITUTION OF SULFUR BY SELENIUM. EFFECT OF POLAR GROUPS FROM THE ENVIRONMENT

Lj. Suručić<sup>a</sup>, T. Tadić<sup>b</sup>, A. Nastasović<sup>b</sup>, B. Marković<sup>b</sup>, Z. Sandić<sup>c</sup>, A. Onjia<sup>d</sup>, G. Janjić<sup>b</sup>

<sup>a</sup>University of Banja Luka, Faculty of Medicine, Save Mrkalja 14, Banja Luka, Republic of Srpska, Bosnia and Herzegovina; <sup>b</sup>University of Belgrade – Institute of Chemistry, Technology and Metallurgy – National Institute of the Republic of Serbia, ICTM, Njegoševa 12, Belgrade, Republic of Serbia; <sup>c</sup>University of Banja Luka, Faculty of Science, Mladena Stojanovića 2, Banja Luka, Republic of Srpska, Bosnia and Herzegovina; <sup>d</sup>University of Belgrade, Faculty of Technology and Metallurgy, Karnegijeva 4, Belgrade, Republic of Serbia  
e-mail: ljiljana.surucic@med.unibl.org

Statistical analysis of data from crystal structures, extracted from Cambridge Structural Database (CSD) have shown that S and Se atoms in nonpolar environment display similar tendency toward specified type interactions [1]. The most numerous are structures with C–H···Se and C–H···S interactions (~80%), while structures with Se···Se and S···S interactions (~5%) are notably less numerous (second type of interactions). When S or Se atoms is in a polar environment (there is OH or NH groups in the vicinity), the distribution of certain types of interactions is slightly different. Statistical analysis of S and Se interactions (criteria:  $d < 4.0 \text{ \AA}$  (for S)  $d < 4.5 \text{ \AA}$  (for Se), Figure) showed the most numerous interactions with the H atom (in both cases about 47%), while interactions involving C atoms (interactions with non-polar groups) are second in prevalence. Interactions with non-polar C-H groups are slightly more numerous for Se (30%) than for S atom (21%), while interactions with polar O-H and N-H groups are less numerous for Se (10% in total) than in case of S atom (16% in total). Unexpectedly, the simultaneous interactions of X atom with the S/Se atom and the polar OH/N-H group ( $H \cdots X < 3.5 \text{ \AA}$ ) are only present in an amount of about 20%.

Results from docking study suggested that PBiSe (Se compound) could be better inhibitor of iNOS (inducible nitric oxide synthase) than its S derivative (PBIT). All orientations of PBiSe are clustered at the same site (active site, Figure) leading to much better efficiency of this molecule compared to PBIT, where three binding sites can be observed (Figure). This is in strong agreement with experimental results pointing that PBiSe kills melanoma cells >10-fold more effectively than other iNOS inhibitors (PBIT).



[1] I. Đorđević, M. Popadić, M. Sarvan, M. Petković-Benazzouz, G. Janjić, *Acta Cryst.* **B76** (2020) 122-136.

## ПРИМЕНА ФОТОНСКИХ КРИСТАЛА У ОПТИЧКИМ ВЛАКНИМА

**Љ. Кузмановић<sup>a</sup>, М. Ковачевић<sup>a</sup>**

<sup>a</sup> Природно-математички факултет, Радоја Домановића 12, 34000 Крагујевац  
e-mail: ljubica.kuzmanovic@pmf.kg.ac.rs

Оптички аналогон кристалној решетки је фотонска кристална решетка. Фотонска решетка представља периодичну решетку која се карактерише периодичном променом диелектричне константе у одређеним правцима. У односу на обичну кристалну решетку, атоми или молекули су замењени макроскопским материјалима који имају различите диелектричне константе (индексе преламања), док је потенцијал замењен периодичном диелектричном функцијом. У фреквентном спектру фотонских кристала могу се видети одређени фреквентни процепи [1]. Електромагнетни таласи који имају фреквенцију која припада забрањеној зони се не могу простирати кроз фотонски кристал. Ово се може искористити за контролисање простирања светлости [2]. Типични представник дводимензионалних фотонских кристала су фотонско кристална оптичка влакна [3]. У овом раду је представљен утицај параметара фотонског кристала на промену нормализоване угаоне расподеле на излазу са дужином, за влакна сачињена од стакленог језгра и два слоја фотонских кристала која чине омотаче језгра [4]. Ширина расподеле се мења дуж влакна до постизања стационарне расподеле модова. Овај процес зависи од параметара фотонског кристала који чини унутрашњи омотач, као и од услова побуђивања светлости на улазу. Испитани су случајеви када се у унутрашњем омотачу налазе два и четири прстена ваздушних шупљина, које заправо представљају фотонски кристал. Растојање на којем долази до стационарне расподеле модова је мање за влакна са два него за влакна са четири прстена ваздушних шупљина у унутрашњем омотачу.

[1] Philip St. J. Russell, Photonic crystal fibers, *Science*, **299** (2003) 358–362

[2] J. D. Joannopoulos, R. D. Meade, and J. N. Winn, Photonic Crystals: Molding the Flow of Light (Princeton U. Press, Princeton, N. J., 1995)

[3] J. C. Knight, T. A. Birks, R. F. Cregan, P. St. J. Russell, J.-P. de Sandro, Large mode area photonic crystal fibre, *Electronics Letters*, **34(13)** (1998) 1347–1348

[4] М. Ковачевић, Љ. Кузмановић, А. Симовић, С. Савовић, А. Дјорђевић, Transients of modal-power distribution in multimode solid-core W-type photonic crystal fibers, *Journal of Lightwave Technology*, **35(20)** (2017) 4352–4357

## APPLICATION OF PHOTONIC CRYSTALS IN OPTICAL FIBERS

**Lj. Kuzmanović<sup>a</sup>, M. Kovačević<sup>a</sup>**

<sup>a</sup> Faculty of Science, Radoja Domanovića 12, 34000 Kragujevac

e-mail: ljubica.kuzmanovic@pmf.kg.ac.rs

The optical counterpart of the crystal lattice is the photonic crystal lattice. Photonic lattice is the periodical lattice characterized by a periodical variation of dielectric constant in one or more directions. Compared to a regular crystal lattice, atoms and molecules are replaced by macroscopic materials that have different dielectric constants (indices of refraction), and the electric potential is replaced by a periodical dielectric function. There are photonic bandgaps in the frequency spectrum of the photonic crystal fibers [1]. Electromagnetic waves of a frequency belonging to a bandgap of a photonic crystal fiber cannot be transferred through that fiber. This quality can be used for controlling the propagation of light [2]. Typical representatives of two-dimensional photonic crystals are photonic crystal fibers [3]. In this paper, we have shown the influence of the photonic crystal parameters on the evolution of the normalized output angular power distribution with fiber length, for fibers made of a solid silica core and two layers of photonic crystals that make the claddings of the photonic crystal fiber [4]. The distribution width varies along the fiber length until reaching its steady-state. This process varies with the intermediate layer's parameters as well as with the excitation conditions. We have investigated the cases when there are two or four rings of air-holes in the intermediate layer. These rings of air-holes actually make the photonic crystal. The distance at which the steady-state occurs is shorter for fibers with two than for those with four rings of air-holes in the intermediate layer.

[1] Philip St. J. Russell, Photonic crystal fibers, *Science*, **299** (2003) 358–362

[2] J. D. Joannopoulos, R. D. Meade, and J. N. Winn, *Photonic Crystals: Molding the Flow of Light* (Princeton U. Press, Princeton, N. J., 1995)

[3] J. C. Knight, T. A. Birks, R. F. Cregan, P. St. J. Russell, J.-P. de Sandro, Large mode area photonic crystal fibre, *Electronics Letters*, **34(13)** (1998) 1347–1348

[4] M. Kovačević, Lj. Kuzmanović, A. Simović, S. Savović, A. Djordjevich, Transients of modal-power distribution in multimode solid-core W-type photonic crystal fibers, *Journal of Lightwave Technology*, **35(20)** (2017) 4352–4357

## FLUORINACIJA AROMATIČNIH GRUPA. EFEKAT KOORDINOVANJA NA ATOM FLUORA

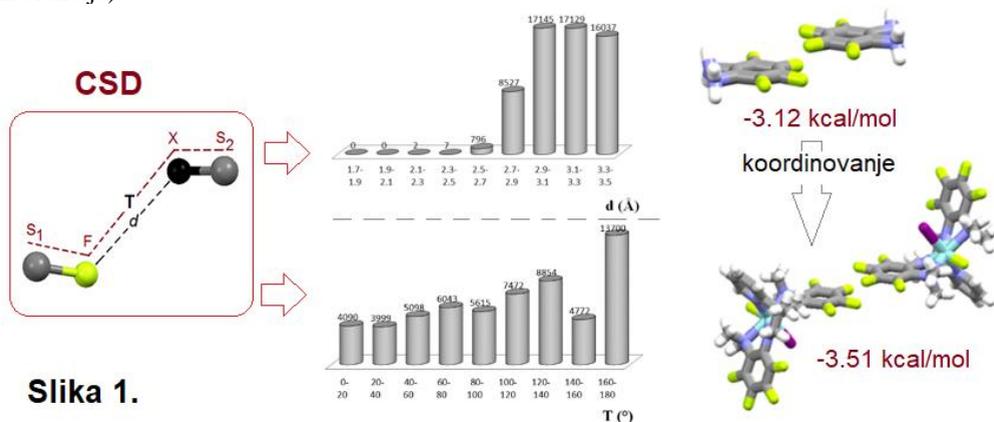
**M. Petković Benazzouz**<sup>a</sup>, **A. Rakić**<sup>b</sup>, **N. Trišović**<sup>c</sup>, **G. Janjić**<sup>d</sup>, **M. Sarvan**<sup>a</sup>

<sup>a</sup> Fizički fakultet, Univerzitet u Beogradu, Studentski trg 12-16, Beograd, Srbija; <sup>b</sup> Fakultet za fizičku hemiju, Univerzitet u Beogradu, Studentski trg 12-16, 11000 Beograd, Srbija; <sup>c</sup> Tehnološko-metalurški fakultet, Univerzitet u Beogradu, Karnegijeva 4, 11120 Beograd, Srbija; <sup>d</sup> Institut za hemiju, tehnologiju i metalurgiju, Univerzitet u Beogradu, Njegoševa 12, Beograd, Srbija; e-mail: marijapetkovic@ff.bg.ac.rs

Zamena vodonikovog atoma atomom fluora ima značajne elektronske posledice i može dramatično da promeni osobine i supramolekulski profil jedinjenja [1].

Statistička analiza kristalnih struktura iz Kembričke baze strukturnih podataka pokazuje da su najbrojnije one strukture kod kojih je ugljenikov atom vezan za interagujući atom fluora. One u kojima je fluor vezan za aromatičnu grupu su malo manje zastupljene. Distribucija geometrijskih parametara (Slika 1) ukazuje na nedostatak jasne tendencije prema nekim određenim vrednostima parametra  $d$ . Opaža se da aromatične grupe imaju malo izraženiju tendenciju ka kraćim  $d$  rastojanjima (Slika 1) u poređenju sa kontaktima sa alkil grupama (maksimumi  $d$  rastojanja su u opsegu od 3,1 Å do 3,3 Å). U oba slučaja, strukture sa trans orijentacijom (torzioni ugao  $T$  je u opsegu od 160° do 180°) su učestalije u odnosu na strukture sa cis orijentacijom (0° <  $T$  < 160°). Brojne su i strukture sa uvijenom geometrijom (20° <  $T$  < 160°).

Efekat koordinovanja je praćen na uobičajenim C-H/F i F/F interakcijama u kristalnim strukturama fluoro-jedinjenja. Ne postoji značajna promena u elektrostatičkom potencijalu F atoma izazvana koordinovanjem aromatičnih fluorida a to rezultuje malim promenama u jačini C-H/F i F/F interakcija i приметnim jačanjem onih interakcija koje uključuju  $\pi$ -sisteme ((F/ $\pi$  i C-H/ $\pi$  interakcije).



[1] K. Gak Simić, I. Đorđević, A. Lazić, L. Radovanović, M. Petković-Benazzouz, J. Rogan, N. Trišović, G. Janjić, *CrystEngComm*, **23** (2021) 2606-2622.

## FLUORINATION OF AROMATIC GROUPS. THE EFFECTS OF COORDINATION ON FLUORINE INTERACTIONS

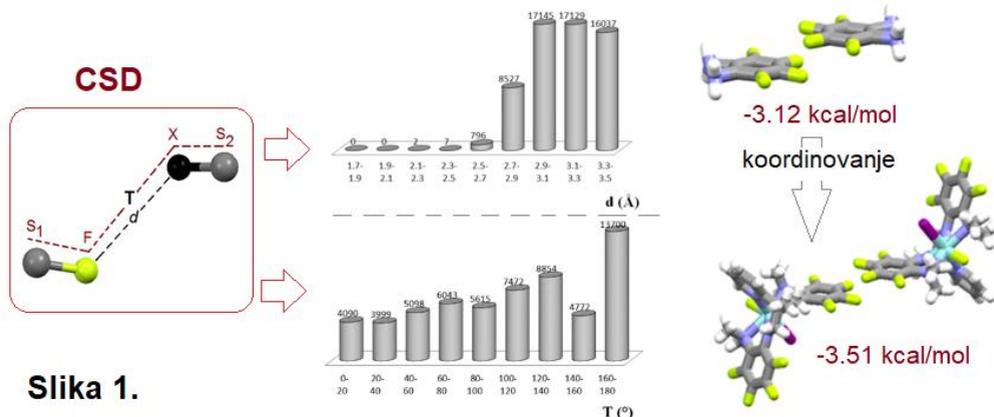
**M. Petković Benazzouz**<sup>a</sup>, **A. Rakić**<sup>b</sup>, **N. Trišović**<sup>c</sup>, **G. Janjić**<sup>d</sup>, **M. Sarvan**<sup>a</sup>

<sup>a</sup> Faculty of Physics, University of Belgrade, Studentski trg 12-16, 11000 Belgrade, Serbia; <sup>b</sup> Faculty of Physical Chemistry, University of Belgrade, Studentski trg 12-16, 11000 Belgrade, Serbia; <sup>c</sup> Faculty of Technology and Metallurgy, University of Belgrade, Karnegijeva 4, 11120 Belgrade, Serbia; <sup>d</sup> Institute of Chemistry, Technology and Metallurgy, National Institute of the Republic of Serbia, University of Belgrade, Njegoševa 12, 11000 Belgrade, Serbia; e-mail: marijapetkovic@ff.bg.ac.rs

The replacement of hydrogen atom by fluorine has significant electronic consequences and can dramatically change the properties and supramolecular profile of compounds [1].

Statistical analysis of crystal structures obtained from Cambridge Structural Database (CSD) showed that the most numerous are structures in which carbon atom is bound to interacting fluorine atom. The structures in which fluorine is bound to aromatic group are slightly less represented. The distribution of geometrical parameters (Figure 1) shows that there is no clear tendency toward some certain values of  $d$  distance, however, the aromatic groups have a slightly pronounced tendency toward the shorter  $d$  distances (Figure 1) in comparison to contacts with the alkyl groups (maximum is in the range from 3.1 to 3.3 Å). In both cases, structures with trans orientation (torsional angle  $T$  is in range from 160 to 180°) are more frequent than structures with cis orientation ( $0 < T < 20^\circ$ ). The structures with twisted geometry ( $20 < T < 160^\circ$ ) are also very numerous.

The effect of coordination have been considered through the most common C-H/F and F/F interactions of fluoro compounds in the crystal structures. There is no a significant change in the electrostatic potential of the F atoms due to coordination of aromatic fluorides, resulting in slight changes in the strengths of the C-H/F and F/F interactions, and in noticeable enhancement of interactions involving the  $\pi$ -system (F/ $\pi$  and C-H/ $\pi$  interactions).



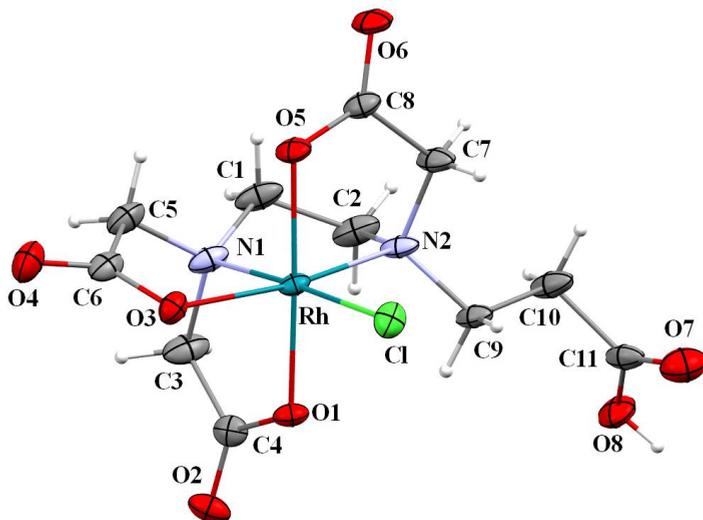
[1] K. Gak Simić, I. Đorđević, A. Lazić, L. Radovanović, M. Petković-Benazzouz, J. Rogan, N. Trišović, G. Janjić, *CrystEngComm*, **23** (2021) 2606-2622.

## СИНТЕЗА И КРИСТАЛНА СТРУКТУРА *cis*-equatorial-Na[Rh(Hed3ap)Cl]·2,22H<sub>2</sub>O КОМПЛЕКСА

**Марко Радовановић<sup>a</sup>, Марија Ристић<sup>a</sup>, Маја Ђукић<sup>a</sup>, Игњат Филиповић<sup>a</sup>,  
Frank W. Heinemann<sup>b</sup>, Зоран Матовић<sup>a</sup>**

<sup>a</sup>Универзитет у Крагујевцу, Природно-математички факултет, Институт за хемију, Радоја Домановића 12, 34000 Крагујевац, Србија; <sup>b</sup>Департман за хемију и фармацију, Неорганска хемија, Friedrich-Alexander University Erlangen-Nürnberg (FAU), Egerlandstraße 1, 91058 Ерлангер, Немачка  
e-mail: mjeremic@kg.ac.rs

Овај комплекс је синтетисан по процедури која је примењена за добијање Rh(III) комплекса са хексадентатним EDTA типом лиганата [1]. Након елуирања са 0,1 М NaCl, на хроматографској колони је детектовано пет жутих трака. Све траке су изоловане, упарене до малих запремина, обесољене коришћењем Sephadex G-10 смоле, а онда упарене до запремине око 5 ml. Након додатка 3-4 ml етанола у сваку траку, раствори су остављени у фрижидеру неколико дана. Жути кристали траке IV су сакупљени и осушени на ваздуху. Добијени кристали представљају комплекс *cis*-equatorial-Na[Rh(Hed3ap)Cl]·2,22H<sub>2</sub>O. Кристалографски подаци: триклинични систем, просторна група  $P\bar{1}$ , величина кристала  $0,23 \times 0,11 \times 0,07$  mm<sup>3</sup>,  $a = 6,4533(3)$ ,  $b = 8,0947(5)$ ,  $c = 16,8953(12)$  Å,  $\alpha = 100,709(5)$ ,  $\beta = 91,127(5)$ ,  $\gamma = 93,069(6)^\circ$ ,  $V = 865,56(9)$  Å<sup>3</sup>,  $Z = 2$ ,  $\rho = 1,936$  g cm<sup>-3</sup>,  $\mu = 1,22$  mm<sup>-1</sup>,  $R = 0,017$ ,  $wR = 0,041$ .



Слика 1. Асиметрична јединица *cis*-equatorial-Na[Rh(Hed3ap)Cl]·2,22H<sub>2</sub>O

[1] M. S. Jeremić, M. D. Radovanović, F. W. Heinemann, M. M. Vasojević, Z. D. Matović, Polyhedron, **169** (2019) 89-101.

## SYNTHESIS AND CRYSTAL STRUCTURE OF *cis*-equatorial-Na[Rh(Hed3ap)Cl]·2.22H<sub>2</sub>O COMPLEX

**Marko Radovanović<sup>a</sup>, Marija Ristić<sup>a</sup>, Maja Đukić<sup>a</sup>, Ignjat Filipović<sup>a</sup>, Frank W. Heinemann<sup>b</sup>, Zoran Matović<sup>a</sup>**

<sup>a</sup>University of Kragujevac, Faculty of Science, Department of Chemistry, Radoja Domanovića 12, 34000 Kragujevac, Serbia; <sup>b</sup>Department of Chemistry and Pharmacy, Inorganic Chemistry, Friedrich-Alexander University Erlangen-Nürnberg (FAU), Egerlandstraße 1, 91058 Erlangen, Germany

e-mail: mjeremic@kg.ac.rs

This complex was prepared by the procedure used to make Rh(III) complexes with hexadentate edta-type of ligands [1]. After elution with 0.1 M NaCl, five yellow bands were detected on the chromatographic column. All bands were separated, evaporated, desalted using Sephadex G-10 resin and evaporated to ca. 5 ml. After the addition of 3 to 4 ml of ethanol, the solutions were left in a refrigerator for several days. After several days, the yellow crystals of the band IV were collected and air-dried. The obtained crystals represent a complex of *cis*-equatorial-Na[Rh(Hed3ap)Cl]·2.22H<sub>2</sub>O. Crystal data: triclinic, space group  $P\bar{1}$ , crystal size 0.23 × 0.11 × 0.07 mm<sup>3</sup>,  $a = 6.4533(3)$ ,  $b = 8.0947(5)$ ,  $c = 16.8953(12)$  Å,  $\alpha = 100.709(5)$ ,  $\beta = 91.127(5)$ ,  $\gamma = 93.069(6)^\circ$ ,  $V = 865.56(9)$  Å<sup>3</sup>,  $Z = 2$ ,  $\rho = 1.936$  g cm<sup>-3</sup>,  $\mu = 1.22$  mm<sup>-1</sup>,  $R = 0.017$ ,  $wR = 0.041$ .

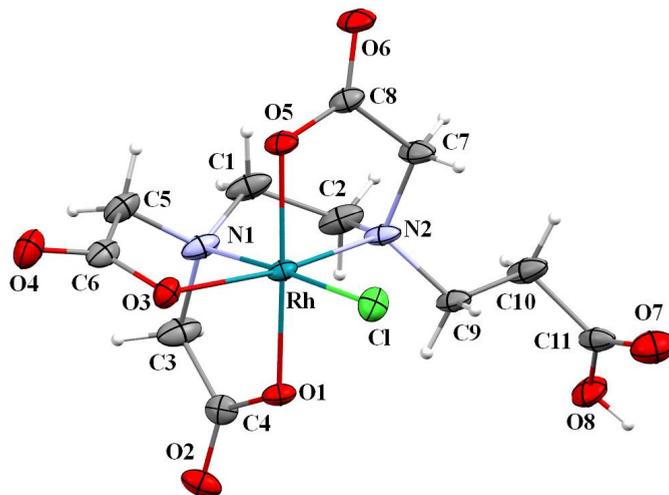


Figure 1. The asymmetric unit of *cis*-equatorial-Na[Rh(Hed3ap)Cl]·2.22H<sub>2</sub>O

[1] M. S. Jeremić, M. D. Radovanović, F. W. Heinemann, M. M. Vasojević, Z. D. Matović, *Polyhedron*, **169** (2019) 89-101.

**MOLEKULSKI, JONSKI I POLIMERNI KOMPLEKSI CINKA SA  
NITRODERIVATIMA HINOLIN-8-OL****M. Harmošová<sup>a</sup>, E. Samol'ová<sup>b</sup>, M. Litecká<sup>c</sup>, N. Kuncová<sup>a</sup>, I. Potočňák<sup>a</sup>**

<sup>a</sup>Department za neorgansku hemiju, Prirodno-matematički fakultet, P. J. Šafárik University, Moyzesova 11, 04154 Košice, Slovakia; <sup>b</sup> Institut za fiziku Češke akademije nauka, Na Slovance 2, 182 21 Prague 8, Češka; <sup>c</sup> Centar instrumentalnih tehnika, Institut za neorgansku hemiju Češke akademije nauka, Řež, Republika Češka  
e-mail: michaela.krescankova@student.upjs.sk

U ovom radu opisano je pet novih kompleksa cinka(II),  $[\text{Zn}(\text{dNQ})_2(\text{H}_2\text{O})_2] \cdot 1,4\text{-dioxane}$  (**1**),  $[\text{Zn}(\text{dNQ})_2(\text{H}_2\text{O})_2]$  (**2**),  $\text{NH}_2(\text{CH}_3)_2[\text{Zn}(\text{CINQ})_3] \cdot \text{DMF}$  (**3**),  $\text{K}[\text{Zn}(\text{CINQ})_3] \cdot 2\text{DMF}$  (**4**) i  $\{\text{Na}[\text{Zn}(\text{CINQ})(\text{SO}_4)(\text{H}_2\text{O})]\}_n$  (**5**), koji sadrže molekule nitro-derivata 8-hidroksihinolina:  $\text{HdNQ} = 5,7\text{-dinitrohinolin-8-ol}$  i  $\text{HCINQ} = 5\text{-hloro-7--nitrohinolin-8-ol}$ . Svi kompleksi su okarakterisani IC spektroskopijom, elementarnom analizom i rendgenskom strukturnom analizom. Kompleksi **1** i **2** imaju slične molekularne strukture, u kojima je atom  $\text{Zn}(\text{II})$  trans-koordinovan sa dva N,O-koordinovana dNQ molekula u ekvatorijalnoj ravni. Aksijalne položaje zauzimaju dva molekula vode, formirajući deformisanu oktaedarsku geometriju. Osim toga, kompleks **1** sadrži jedan rastvoreni molekul 1,4-dioksana. Kompleksi **3** i **4** su jonski sa istim  $[\text{Zn}(\text{CINQ})_3]^-$  anjonom u kome se za atom  $\text{Zn}(\text{II})$  koordinuju tri molekula CINQ sa atomima azota i kiseonika koji su koordinovani na *mer*-način. Negativno naelektrisanje anjona uravnoteženo je nekoordinovanim  $\text{NH}_2(\text{CH}_3)_2^+$  (**3**) i  $\text{K}^+$ -katjonima (**4**). Kompleks **4** takođe sadrži još jedan nekoordinovani molekul DMF. Kompleks **5** ima polimernu strukturu, u kojoj je atom  $\text{Zn}(\text{II})$  penta-koordinovan sa jednim bidentatnim molekulom CINQ, jednim molekulom vode i sa par kristalografski ekvivalentnih sulfatnih anjona, koji međusobno povezuju susedne atome cinka i formiraju *cik-cak* lanac. Osim toga, kompleksni anjoni su takođe povezani jonskim interakcijama između atoma kiseonika sa delimičnim negativnim naelektrisanjem i katjonom natrijuma.

Zahvalnica: Ovaj rad je finansijski podržan od strane Slovak Grant Agencies (VEGA 1/0148/19, APVV-18-0016, VVGS-PF-2020-1425 i VVGS-PF-2021-1772).

## MOLECULAR, IONIC AND POLYMERIC COMPLEXES OF ZINC WITH NITRODERIVATIVES OF QUINOLIN-8-OL

**M. Harmošová<sup>a</sup>, E. Samoľová<sup>b</sup>, M. Litecká<sup>c</sup>, N. Kuncová<sup>a</sup>, I. Potočník<sup>a</sup>**

<sup>a</sup> Department of Inorganic Chemistry, Faculty of Science, P. J. Šafárik University, Moyzesova 11, 04154 Košice, Slovakia; <sup>b</sup> Institute of Physics of the Czech Academy of Sciences, Na Slovance 2, 182 21 Prague 8, Czech Republic; <sup>c</sup> Centre of Instrumental Techniques, Institute of Inorganic Chemistry, Czech Academy of Sciences, Řež, Czech Republic  
e-mail: michaela.krescankova@student.upjs.sk

In this work we describe five new zinc(II) complexes,  $[\text{Zn}(\text{dNQ})_2(\text{H}_2\text{O})_2] \cdot 1,4\text{-dioxane}$  (**1**),  $[\text{Zn}(\text{dNQ})_2(\text{H}_2\text{O})_2]$  (**2**),  $\text{NH}_2(\text{CH}_3)_2[\text{Zn}(\text{ClNQ})_3] \cdot \text{DMF}$  (**3**),  $\text{K}[\text{Zn}(\text{ClNQ})_3] \cdot 2\text{DMF}$  (**4**) and  $\{\text{Na}[\text{Zn}(\text{ClNQ})(\text{SO}_4)(\text{H}_2\text{O})]\}_n$  (**5**), containing molecules of nitroderivatives of 8-hydroxyquinoline: HdNQ = 5,7-dinitroquinolin-8-ol and HClNQ = 5-chloro-7-nitroquinolin-8-ol. All complexes were characterized by IR spectroscopy, elemental analysis and X-ray structure analysis.

Complexes **1** and **2** have similar molecular structures, in which Zn(II) atom is *trans*-coordinated by two N,O-coordinated dNQ molecules in the equatorial plane. Axial positions are occupied by two water molecules, forming a deformed octahedral geometry. In addition, complex **1** contains one solvated molecule of 1,4-dioxane.

Complexes **3** and **4** are ionic with the same  $[\text{Zn}(\text{ClNQ})_3]^-$  anion in which Zn(II) atom is coordinated by three molecules of ClNQ with nitrogen and oxygen donor atoms coordinated in *mer*-fashion. The negative charge of the anions is counterbalanced by uncoordinated  $\text{NH}_2(\text{CH}_3)_2^+$  (**3**) and  $\text{K}^+$  cations (**4**). Complex **4** also contains one more uncoordinated molecule of DMF.

Complex **5** has polymeric structure, in which Zn(II) atom is penta-coordinated by one bidentate molecule of ClNQ ligand, one molecule of water and a pair of crystallographically equivalent sulfate anions, which interconnect adjacent zinc atoms to form a *zigzag* chain. In addition, complex anions are also connected through ionic interactions between oxygen atoms with a partial negative charge and sodium cation.

Slovak Grant Agencies (VEGA 1/0148/19, APVV-18-0016, VVGS-PF-2020-1425 and VVGS-PF-2021-1772) are acknowledged for financial support.

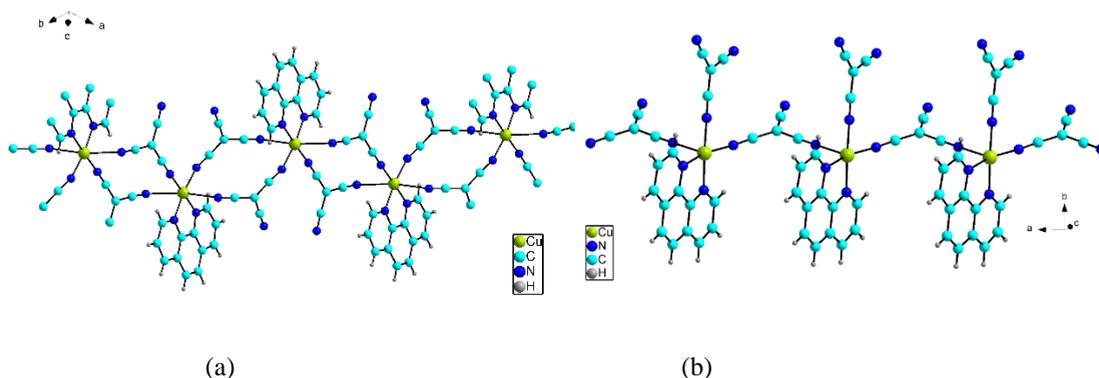
## STRUKTURNA RAZLIČITOST Cu(II)-phen-C(CN)<sub>3</sub> SISTEMA

M. Matiková Mařarová<sup>a</sup>, K. Lacková<sup>a</sup>, I. Potočňák<sup>a</sup>

<sup>a</sup>Departman za neorgansku hemiju, Institut za Hemiju, P. J. Šafárik University in Košice, Moyzesova 11, 041 54 Košice, Slovačka

e-mail: miroslava.matikova.malarova@upjs.sk

Seriya od pet kompleksa bakra(II) pripremljena je iz sistema koji sadrži Cu(ClO<sub>4</sub>)<sub>2</sub>-phen-C(CN)<sub>3</sub> u vodenom/metanolnom ili vodenom/etanolnom rastvoru (*phen*, od engl. 1,10<sup>2</sup>-phenanthroline). Različiti moljski odnos Cu : *phen* : C(CN)<sub>3</sub> i različita temperatura sinteze dovode do stvaranja jonskih i polimernih struktura, sa monodentatnom ili bidentatnom koordinacijom tricijano-metanida (*tcm*). U nekim slučajevima ovaj molekul je prisutan kao slobodni anjon. Strukturna raznolikost ovog anjona je dobro poznata i zapažena su zanimljiva magnetna svojstva za *tcm*-komplekse [1]. Jedan od ovih kompleksa opšte formule [Cu(*phen*)(μ-C(CN)<sub>3</sub>)<sub>2</sub>] formira dva izomera sa različitom polimernom strukturom (slika 1). Svi pripremljeni kompleksi su okarakterisani CHN analizom, infracrvenom spektroskopijom i ispitana je njihova kristalna struktura.



Slika 1. Jednodimenzionalne kristalne strukture izomera [Cu(*phen*){μ-C(CN)<sub>3</sub>}<sub>2</sub>] u  $P\bar{1}$  prostornoj grupi (a) [Cu(*phen*){μ-C(CN)<sub>3</sub>}C(CN)<sub>3</sub>] u  $P2_1/n$  prostornoj grupi (b).

Zahvalnica: Ovaj rad je podržan od strane APVV-18-0016 VEGA 1/0148/19.

[1] S. R. Batten, K. S. Murray, *Coordination Chemistry Reviews*, **246** (2003) 103–130.

## STRUCTURAL DIVERSITY OF Cu(II)-phen-C(CN)<sub>3</sub> SYSTEM

M. Matiková Maľarová<sup>a</sup>, K. Lacková<sup>a</sup>, I. Potočník<sup>a</sup>

<sup>a</sup>Department of Inorganic Chemistry, Institute of Chemistry, P. J. Šafárik University in Košice, Moyzesova 11, 041 54 Košice, Slovakia

e-mail: miroslava.matikova.malarova@upjs.sk

The series of five copper(II) complexes was prepared from system containing Cu(ClO<sub>4</sub>)<sub>2</sub> – phen – C(CN)<sub>3</sub> in aqueous/methanolic or aqueous/ethanolic solution (phen = 1,10<sup>7</sup>-phenanthroline). Different molar ratio Cu : phen : C(CN)<sub>3</sub> and different temperature of syntheses lead to formation of ionic and polymeric structures, with monodentate or bidentate coordination of tricyanomethanide (*tcm*). In some cases this molecule is present as free anion. The structural diversity of this anion is well known and interesting magnetic properties were observed for *tcm* complexes [1]. One of this complexes with general formula [Cu(phen)(μ-C(CN)<sub>3</sub>)<sub>2</sub>] forms two isomers with different polymeric structures (Figure 1). All prepared complexes were characterized by CHN analyses, infrared spectroscopy and their crystal structures were investigated.

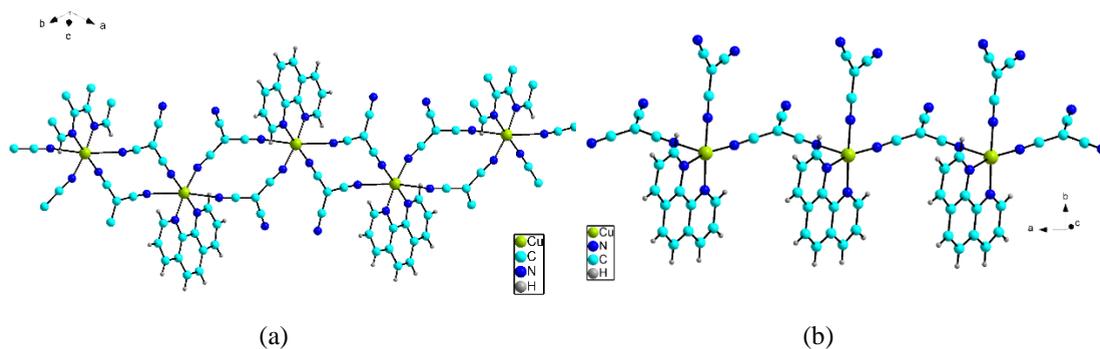


Figure 1. The one-dimensional crystal structures of izomers [Cu(phen){μ-C(CN)<sub>3</sub>}<sub>2</sub>] in  $P\bar{1}$  space group (a) and [Cu(phen){μ-C(CN)<sub>3</sub>}C(CN)<sub>3</sub>] in  $P2_1/n$  space group (b)

Acknowledgement: This work was supported by the APVV-18-0016 grant and VEGA grant 1/0148/19.

[1] S. R. Batten, K. S. Murray, *Coordination Chemistry Reviews*, **246** (2003) 103–130.

## ЦИНКОМ СУПСТИТУИСАНЕ НАНОЧЕСТИЦЕ ГВОЖЂЕ ОКСИДА ОБЛИКА ОБЛУТКА ЗА МАГНЕТНУ ХИПЕРТЕРМИЈУ - ИЗ ОРГАНСКЕ У ВОДЕНУ СУСПЕНЗИЈУ ГРАЂЕЊЕМ TiO<sub>2</sub>-ГВОЖЂЕ ОКСИД КОМПОЗИТА

**Н. Јовић Орсини<sup>а</sup>, М. М. Милић<sup>а</sup>**

<sup>а</sup> *Институт за нуклеарне науке "ВИНЧА", Институт од националног значаја за Републику Србију, Универзитет у Београду, ПП 522, 11001 Београд, Србија*

e-mail: natasaj@vin.bg.ac.rs

Хидрофобне наночестице на бази магнетног гвожђе оксида обложене олеинском киселином (ОА), добијене термичким разлагањем соли метал ацетилацетоната, показују добар потенцијал за примену у магнетној хипертермији [1]. Њихова уска расподела величина, добра кристаличност и магнетна својства омогућавају ефикасну трансформацију електромагнетне енергије у топлоту. За употребу у медицинској дијагностици и лечењу, наночестице морају бити биокompatibilне. Превођење хидрофобних наночестица у водену суспензију обично се изводи поступком размене или додавања лиганда.

У овом раду смо проучавали хипертермијску способност наночестица гвожђе оксида допираних цинком и обложених ОА молекулима, облика облутка. Већина наночестица је величине од 7 до 20 nm (ТЕМ). Узорак кристалише у кубној решетци спинела са параметром решетке  $a = 8,4116(2) \text{ \AA}$ . Микроструктурна анализа је показала да постоји ограничен раст кристалита дуж правца [1], што указује на могуће померање (промену положаја) октаедарски координисаног Fe(III) јона дуж правца [1]. Усредњена величина кристалита је 12(1) nm.

С друге стране, пробе ради, процес облагања биокompatibilним и нетоксичним слојем анатаса (TiO<sub>2</sub>) изведен је на наночестицама магнетита (Fe<sub>3</sub>O<sub>4</sub>) у хидротермалним условима. Титанијум тетрабутоксид је коришћен као извор Ti јона. Након испирања и жарења на  $T > 400 \text{ }^\circ\text{C}$ , аморфни слој титанијум оксида прелази у кристални слој анатас фазе, док се кубична Fe<sub>3</sub>O<sub>4</sub> фаза делимично трансформише у  $\alpha$ -Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub> фазу.

Како би се постигле максималне перформансе за примену у апсорпцији магнетних и електромагнетних таласа потребно је успоставити одговарајући поступак облагања магнетних наночестица оксида гвожђа слојем TiO<sub>2</sub>. Хибридне структуре типа језгро/љуска на бази гвожђе-оксид/TiO<sub>2</sub>, поред тога што се могу користити као агенси у магнетној хипертермији, могу наћи примену и у фото-елиминацији патогених бактерија захваљујући фотокаталитичким особинама титанијум оксидног слоја.

[1] N. Jović Orsini, M. M. Milić and T. E. Torres, *Nanotechnology*, **31** (2020) 225707.

## ZINC SUBSTITUTED IRON OXIDE NANOPEBBLES FOR MAGNETIC HYPERTHERMIA - FROM ORGANIC TO AQUEOUS MEDIUM BY BUILDING TiO<sub>2</sub>-IRON OXIDE COMPOSITES

**N. Jović Orsini<sup>a</sup>, M. M. Milić<sup>a</sup>**

<sup>a</sup> *Institute of Nuclear Sciences "VINČA", National Institute of the Republic of Serbia, University of Belgrade, P.O. Box 522, 11001 Belgrade, Serbia*

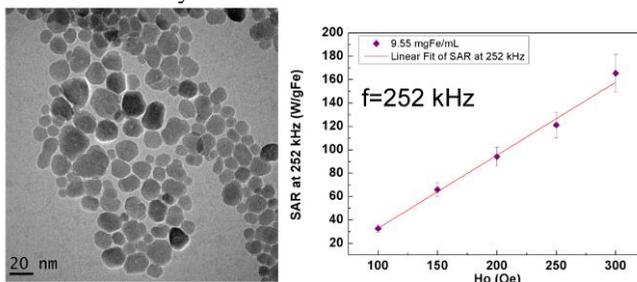
e-mail: natasaj@vin.bg.ac.rs

Hydrophobic, oleic acid (OA) coated magnetic iron oxide-based nanoparticles, produced by thermal decomposition of metal acetylacetonate precursors, is good candidate for magnetic hyperthermia [1]. Their narrow size distribution, good crystallinity and magnetic performances, enable efficient transformation of electromagnetic energy into heat. For used in medical diagnosis and treatments, nanoparticles must be biocompatible. Transfer of hydrophobic nanoparticles into the water usually consider ligand exchange or ligand adding approaches.

Herein, we studied magnetic hyperthermia performances of OA-coated zinc-substituted iron oxide nanoparticles, pebbles-like in shape. The size of most nanoparticles is in the range 7-20 nm (TEM). The sample crystallized in the cubic spinel lattice with the lattice parameter  $a = 8.4116(2)$  Å. Microstructural analysis revealed suppression of the crystallite growth along [1] direction, indicating on a possible displacement of the octahedrally coordinated Fe<sup>3+</sup> ion along a [1] direction. The average apparent size has been found to be 12(1) nm.

For the sake of evidence, the process of coating with biocompatible and non-toxic anatase TiO<sub>2</sub> layer has been performed on pure magnetite (Fe<sub>3</sub>O<sub>4</sub>) nanoparticles under hydrothermal conditions. Titanium tetrabutoxide has been used as a Ti source. After washing and annealing at  $T > 400$  °C, the amorphous titania layer changed into crystalline TiO<sub>2</sub> layer, while, cubic Fe<sub>3</sub>O<sub>4</sub> phase partially transferred into  $\alpha$ -Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub>.

The procedure of coating magnetic iron oxide nanoparticles with TiO<sub>2</sub> layer should be properly established in order to get maximum performances for the magnetic and electromagnetic wave absorption applications. Besides possible use as magnetic hyperthermia agents, iron oxide/TiO<sub>2</sub> core/shell structures can also find application in photokilling of pathogenic bacteria thanks to photocatalytic performance of titania layer.



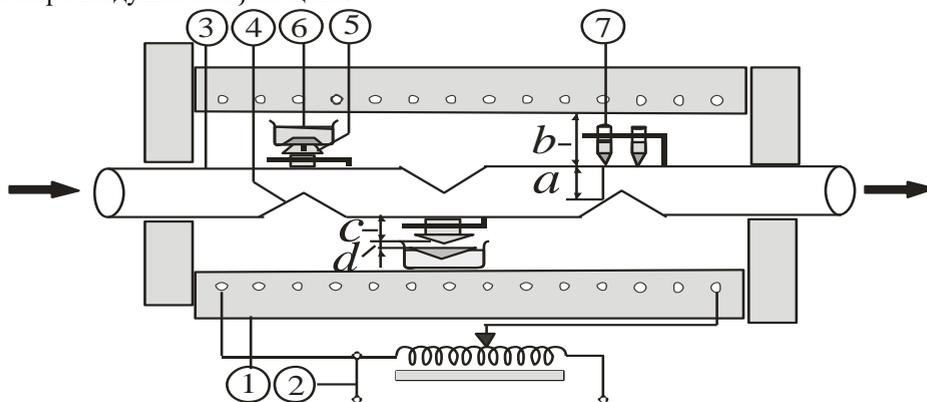
[1] N. Jović Orsini, M. M. Milić and T. E. Torres, *Nanotechnology*, **31** (2020) 225707.

## КРИСТАЛИЗАЦИОНА ПОЛИЦА

**Н. Даниловић<sup>а</sup>, А. Јанићијевић<sup>б</sup>, Т. Б. Миладиновић<sup>в</sup>**

<sup>а</sup>Природно-математички факултет, Универзитет у Крагујевцу, Радоја Домановића 12, 34000 Крагујевац, Србија; <sup>б</sup>Технолошко-металуришки факултет, Универзитет у Београду, Карнегијева 4, 11000 Београд, Србија, <sup>в</sup>Институт за информационе технологије, Универзитет у Крагујевцу, Јована Цвијића бб, 34000 Крагујевац, Србија  
e-mail: nebojsadanilovic01@gmail.com

У претходним радовима [1] и [2] описали смо modele ваздушно хлађене цеви инсталиране у лабораторијској цилиндричној пећи. Овде смо описали нов модел ваздушног хладњака (Сл.1). Хладњак омогућава лаку регулацију и симултане тестове различитих кристализационих параметара и кристализацију супстанци у лабораторијској цилиндричној пећи. Изведене су и нумерички анализирани релације између брзине кристализације и параметара ваздушно хлађене цеви.



Слика 1. Кристализациона полица. (1) лабораторијска цилиндрична пећ, (2) континуално променљиви трансформатор, (3) ваздушно хлађена цев ("кристализациона полица") (4) "хладни праг", (5) покретан "хладни чеп" (6) тигл, и (7) Таманова тест епрувета .

Интервал брзине кристализације у свакој Тамановој тест епрувети и тиглу може да буде регулисан помоћу попречног пресека ваздушне струје  $a$ . Градијент температуре може да буде регулисан помоћу растојања између ваздушно хлађене цеви и зида пећи  $b$ . Интервал брзине кристализације у сваком тиглу може такође да буде регулисан помоћу дужине чепа  $c$  и растојања главе чепа од површина растопа  $d$ .

[1] B. Cabric, A. Janicijevic, N. Danilovic, *Crystallography Reports.*, **58** (2013) 198-200

[2] A. Janicijevic, N. Danilovic, *Kragujevac J.Sci.*, **40** (2018) 19-22

## CRYSTALLIZATION SHELF

**N. Danilović<sup>a</sup>, A. Janićijević<sup>b</sup>, T. B. Miladinović<sup>c</sup>**

<sup>a</sup>Faculty of Science, University of Kragujevac, Radoja Domanovića 12, 34000 Kragujevac, Serbia, <sup>b</sup>Faculty of Technology and Metallurgy, University of Belgrade, Karnegijeva 4, 11000 Belgrade, Serbia, <sup>c</sup>Institute for Information Technologies, University of Kragujevac, Jovana Cvijica bb, 34000 Kragujevac, Serbia  
e-mail: nebojsadanilovic01@gmail.com

In previous papers [1] and [2] we have described a models of air cooled tube installed in a laboratory tube furnace. Here we describe the new model of air cooler (Fig. 1). The cooler allows easy regulation and simultaneous tests of different crystallization parameters and crystallization of substances in laboratory tube furnace. The relationships between the crystallization rate and parameters of air-cooled tube are derived and numerically analyzed.

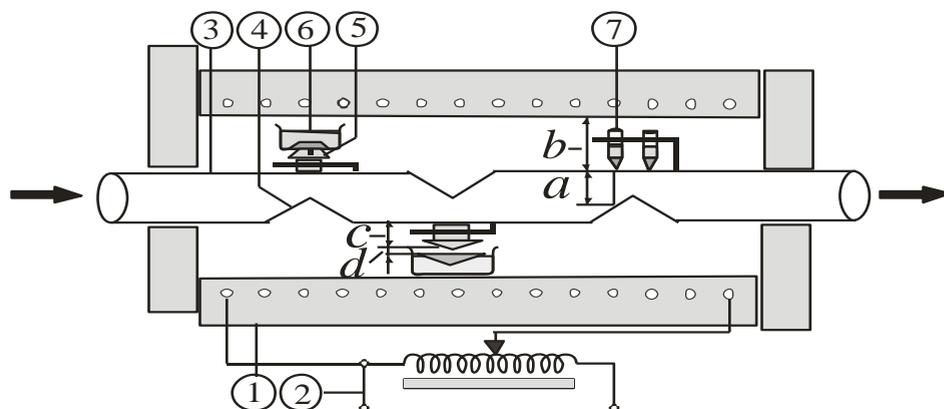


Figure 1. Crystallization shelf. (1) laboratory tube furnace, (2) continuously changeable transformer, (3) air cooled tube ("crystallization shelf"), (4) "cold threshold", (5) movable "cold plug", (6) crucible, and (7) Tamman test tube.

The crystallization rate interval in each Tamman test tube and crucible can be regulated by the cross section of the airflow  $a$ . The temperature gradient can be regulated by the distance between air cooled tube and wall of the furnace  $b$ . The crystallization rate interval in each crucible can also be regulated by the plug height  $c$  and the distance of the plug head from the surface of the melt  $d$ .

[1] B. Cabric, A. Janicijevic, N. Danilovic, *Crystallography Reports.*, **58** (2013) 198-200

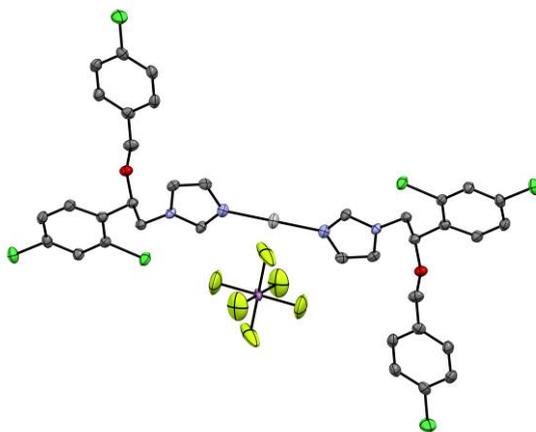
[2] A. Janicijevic, N. Danilovic, *Kragujevac J.Sci.*, **40** (2018) 19-22

**SINTEZA I KRISTALNA STRUKTURA KOMPLEKSA SREBRA(I) SA ANTIFUNGALNIM AGENSOM EKONAZOLOM****N. Stevanović<sup>a</sup>, J. Kljun<sup>b</sup>, T. Andrejević<sup>a</sup>, D. Ašanin<sup>c</sup>, I. Turel<sup>b</sup>, M. Djuran<sup>d</sup>, B. Glišić<sup>a</sup>**

<sup>a</sup>Univerzitet u Kragujevcu, Prirodno-matematički fakultet, Radoja Domanovića 12, 34000 Kragujevac, Srbija; <sup>b</sup>Univerzitet u Ljubljani, Fakultet za hemiju i hemijsku tehnologiju, Večna pot 113, 1000 Ljubljana Slovenija; <sup>c</sup>Univerzitet u Kragujevcu, Institut za informacione tehnologije, Jovana Cvijića bb, 34000 Kragujevac, Srbija; <sup>d</sup>Srpska akademija nauka i umetnosti, Knez Mihailova 35, 11000 Beograd, Srbija  
e-mail: nevena.stevanovic@pmf.kg.ac.rs

Sintetisan je novi kompleks srebra(I) sa antifungalnim agensom ekonazolom (ecz),  $[\text{Ag}(\text{ecz})_2]\text{SbF}_6$ . Kompleks je dobijen u reakciji  $\text{AgSbF}_6$  i ecz u molskom odnosu 1 : 2 u etanolu na sobnoj temperaturi, a njegova karakterizacija izvršena je primenom spektroskopskih (NMR, IR, UV-Vis), elektrohemijskih metoda (ciklična voltametrija) i rendgenske strukturne analize. U ovom kompleksu, dva molekula ekonazola su monodentatno koordinovana za Ag(I) jon preko atoma azota imidazolovog prstena, formirajući  $[\text{Ag}(\text{ecz})_2]^+$  katjon, koji je neutralisan  $\text{SbF}_6^-$  kontra-anjonom.

Kristalografski podaci: monoklinični sistem, prostorna grupa  $P2_1/n$ , veličina kristala  $0,1918 \times 0,0712 \times 0,0460 \text{ mm}^3$ ,  $a = 15,8651(10)$ ,  $b = 9,0452(4)$ ,  $c = 16,4734(12) \text{ \AA}$ ,  $\alpha = 90^\circ$ ,  $\beta = 118,245(9)^\circ$ ,  $\gamma = 90^\circ$ ,  $V = 2082,51$ ,  $Z = 2$ ,  $Z' = 2$ ,  $\rho_x = 2,047 \text{ g cm}^{-3}$ ,  $\mu = 1,462 \text{ mm}^{-1}$ ,  $R = 4,34\%$ .



Kristalna struktura  $[\text{Ag}(\text{ecz})_2]\text{SbF}_6$  kompleksa. Termalni elipsoidi su dati sa 35% verovatnoće, dok vodonikovi atomi nisu prikazani.

## SYNTHESIS AND CRYSTAL STRUCTURE OF A SILVER(I) COMPLEX WITH ANTIFUNGAL AGENT ECONAZOLE

**N. Stevanović<sup>a</sup>, J. Kljun<sup>b</sup>, T. Andrejević<sup>a</sup>, D. Ašanin<sup>c</sup>, I. Turel<sup>b</sup>, M. Djuran<sup>d</sup>, B. Glišić<sup>a</sup>**

<sup>a</sup>University of Kragujevac, Faculty of Science, Radoja Domanovića 12, 34000 Kragujevac, Serbia;

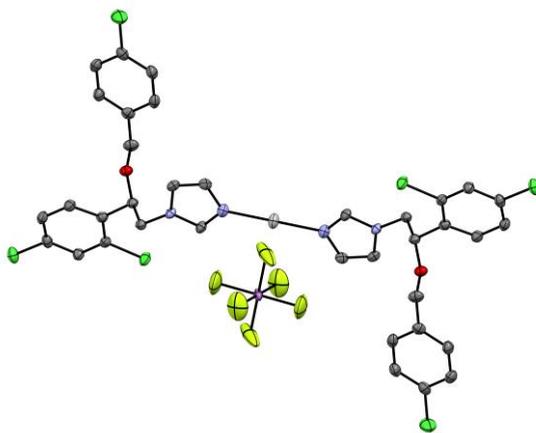
<sup>b</sup>University of Ljubljana, Faculty of Chemistry and Chemical Technology, Večna pot 113, SI-1000,

Ljubljana, Slovenia; <sup>c</sup>University of Kragujevac, Institute for Information Technologies, Jovana Cvijića bb, 34000 Kragujevac, Serbia, <sup>d</sup>Serbian Academy of Sciences and Arts, Knez Mihailova 35, 11000 Belgrade, Serbia

e-mail: nevena.stevanovic@pmf.kg.ac.rs

A new silver(I) complex with the antifungal agent econazole (ecz), [Ag(ecz)<sub>2</sub>]SbF<sub>6</sub>, was obtained from the reaction of AgSbF<sub>6</sub> and ecz in 1 : 2 molar ratio in ethanol at room temperature. The synthesized silver(I) complex was characterized by spectroscopic (NMR, IR, UV-Vis) and electrochemical methods (cyclic voltammetry), while its crystal structure was determined by single-crystal X-ray diffraction analysis. In this complex, two molecules of econazole are monodentately coordinated to the Ag(I) ion *via* the imidazole nitrogen atom, forming an [Ag(ecz)<sub>2</sub>]<sup>+</sup> cation which is neutralized by the SbF<sub>6</sub><sup>-</sup> counterion.

Crystal data: monoclinic crystal system, space group *P*2<sub>1</sub>/*n*, crystal size 0.1918 × 0.0712 × 0.0460 mm<sup>3</sup>, *a* = 15.8651(10), *b* = 9.0452(4), *c* = 16.4734(12) Å, α = 90°, β = 118.245(9)°, γ = 90°, *V* = 2082.51, *Z* = 2, *Z'* = 2 ρ<sub>x</sub> = 2.047 g cm<sup>-3</sup>, μ = 1.462 mm<sup>-1</sup>, *R* = 4.34%.



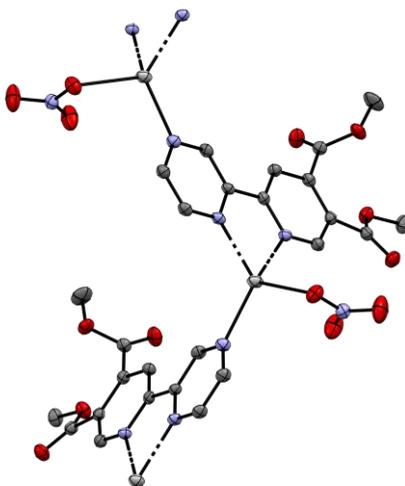
The crystal structure of [Ag(ecz)<sub>2</sub>]SbF<sub>6</sub> complex. Thermal ellipsoids are drawn at 35% probability level and hydrogen atoms are omitted for clarity.

**SINTEZA I KRISTALNA STRUKTURA KOMPLEKSA SREBRA(I) SA DIMETIL 6-(PIRAZIN-2-IL)PIRIDIN-3,4-DIKARBOKSILATOM**

**T. P. Andrejević<sup>a</sup>, J. Kljun<sup>b</sup>, D. P. Ašanin<sup>c</sup>, N. Lj. Stevanović<sup>a</sup>, I. Turel<sup>b</sup>, M. I. Djuran<sup>d</sup>, B. Đ. Glišić<sup>a</sup>**

<sup>a</sup>Univerzitet u Kragujevcu, Prirodno-matematički fakultet, Radoja Domanovića 12, 34000 Kragujevac, Srbija; <sup>b</sup>Univerzitet u Ljubljani, Fakultet za hemiju i hemijsku tehnologiju, Večna pot 113, 1000 Ljubljana Slovenija; <sup>c</sup>Univerzitet u Kragujevcu, Institut za informacione tehnologije, Jovana Cvijića bb, 34000 Kragujevac, Srbija; <sup>d</sup>Srpska akademija nauka i umetnosti, Knez Mihailova 35, 11000 Beograd, Srbija  
e-mail: nevena.stevanovic@pmf.kg.ac.rs

Novi kompleks srebra(I),  $[\text{Ag}(\text{NO}_3)(\text{py-2pz})]_n$ , dobijen je u reakciji ekvimolarnih količina  $\text{AgNO}_3$  i dimetil 6-(pirazin-2-il)piridin-3,4-dikarboksilata (py-2pz) u etanolu na sobnoj temperaturi. Sintetisani kompleks srebra(I) je okarakterisan primenom spektroskopskih i elektrohemijskih metoda, dok je njegova kristalna struktura određena pomoću rendgenske strukturne analize. U  $[\text{Ag}(\text{NO}_3)(\text{py-2pz})]_n$  kompleksu, py-2pz ligand je bidentatno koordinovan za Ag(I) jon preko atoma azota piridinskog i pirazinskog prstena. Dimetil 6-(pirazin-2-il)piridin-3,4-dikarboksilat ima ulogu mostnog liganda između dva Ag(I) jona, formirajući polinuklearan kompleks. Koordinacioni broj jona srebra(I) je četiri, dok geometrija ispitivanog kompleksa odgovara distorgovanom tetraedru sa  $\tau_4$  i  $\tau_4'$  vrednostima od 0.76 i 0.73.



Kristalna struktura  $[\text{Ag}(\text{NO}_3)(\text{py-2pz})]_n$  kompleksa. Termalni elipsoidi su dati sa 35% verovatnoće, dok vodonikovi atomi nisu prikazani.

## SYNTHESIS AND CRYSTAL STRUCTURE OF A SILVER(I) COMPLEX WITH DIMETHYL 6-(PYRAZIN-2-YL)PYRIDINE-3,4-DICARBOXYLATE

T. P. Andrejević<sup>a</sup>, J. Kljun<sup>b</sup>, D. P. Ašanin<sup>c</sup>, N. Lj. Stevanović<sup>a</sup>, I. Turel<sup>b</sup>, M. I. Djuran<sup>d</sup>, B. Đ. Glišić<sup>a</sup>

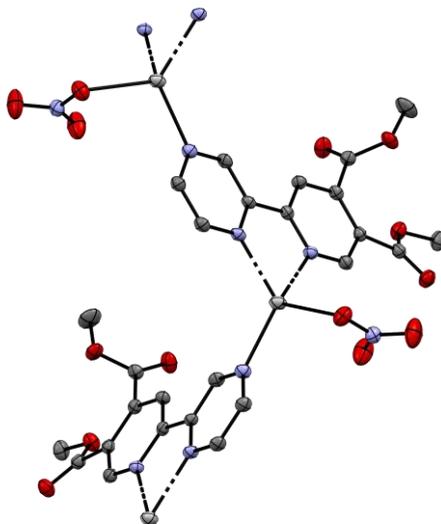
<sup>a</sup>University of Kragujevac, Faculty of Science, Radoja Domanovića 12, 34000 Kragujevac, Serbia;

<sup>b</sup>University of Ljubljana, Faculty of Chemistry and Chemical Technology, Večna pot 113, SI-1000,

Ljubljana, Slovenia; <sup>c</sup>University of Kragujevac, Institute for Information Technologies, Jovana Cvijića bb, 34000 Kragujevac, Serbia, <sup>d</sup>Serbian Academy of Sciences and Arts, Knez Mihailova 35, 11000 Belgrade, Serbia

e-mail: nevena.stevanovic@pmf.kg.ac.rs

A new silver(I) complex,  $[\text{Ag}(\text{NO}_3)(\text{py-2pz})]_n$ , was obtained in the reaction of equimolar amounts of  $\text{AgNO}_3$  and dimethyl 6-(pyrazin-2-yl)pyridine-3,4-dicarboxylate (py-2pz) carried out in ethanol at room temperature. The synthesized silver(I) complex was characterized by spectroscopic and electrochemical methods, while its crystal structure was determined by single-crystal X-ray diffraction analysis. In this complex, the py-2pz ligand is bidentately coordinated to the Ag(I) ion through the pyridine and pyrazine nitrogen atoms. The structure of this complex is polymeric, in which the py-2pz ligand also acts as a bridging ligand between two Ag(I) ions. Silver(I) ions are four-coordinate with a distorted tetrahedral geometry with  $\tau_4$  and  $\tau_4'$  values of 0.76 and 0.73, respectively.



The crystal structure of  $[\text{Ag}(\text{NO}_3)(\text{py-2pz})]_n$  complex. Thermal ellipsoids are drawn at 35% probability level and hydrogen atoms are omitted for clarity.

## УТИЦАЈ АНЈОНА, ПУФЕРА И ДЕТЕРГЕНТА НА ТОПОЛОГИЈУ И МОРФОЛОГИЈУ ZIF-8 КРИСТАЛИТА

**Предраг Ристић<sup>а</sup>, Павле Павловић<sup>а</sup>, Марија Станишић<sup>а</sup>, Радивоје Продановић<sup>а</sup>,  
Милош Огњановић<sup>б</sup>, Вељко Ђокић<sup>в</sup>, Тамара Годоровић<sup>а</sup>**

<sup>а</sup> Универзитет у Београду – Хемијски факултет, Студентски трг 12-16, Београд;

<sup>б</sup> Институт за нуклеарне науке „Винча”, Мике Петровића Аласа 12-14, Винча – Београд;

<sup>в</sup> Иновациони центар Технолошко-металуришког факултета, Универзитет у Београду,  
Карнегијева 4, Београд

e-mail: predrag@chem.bg.ac.rs

Метал-органске умрежене структуре (МОФ) су класа неорганских материјала са потенцијалном применом у адсорпцији гасова, биосензибилизацији, биокатализи и испоруци лекова [1]. Зеолитске имидазолске умрежене структуре (ZIF) су поткласа МОФ-ова посебно погодна за имобилизацију ензима методом биомиметичке минерализације [1]. У ову сврху се најчешће користи ZIF-8 који се састоји тетраедарских јона Zn(II) повезаних преко мостних 2-метилимидазолских лиганата. Међутим, топологија и морфологија кристала ZIF-8 варира у зависности од експерименталних услова синтезе. Такође, током процеса биомиметичке минерализације, биокомпозит састављен од ензима имобилизованог у ZIF-8 се испира пуферима и детергентима ради уклањања вишка адсорбованог ензима, при чему може доћи до хемијске трансформације површине и непожељног отпуштања ензима. Стога је у овом раду испитиван утицај природе анјона на топологију и морфологију ZIF-8, а стабилност кристалита ZIF-8 је тестирана у ацетатном пуферу (0,1 М; рН = 5,5) и раствору натријум-додецилсулфата ( $\omega = 10 \%$ ). Морфологија кристала је праћена скенирајућом електронском микроскопијом, док је топологија одређена применом рендгенске дифракције праха.

[1] С.-Х. Jin, Н.-В. Shang, *Journal of Solid State Chemistry*, **297** (2021) 122040.

### Захвалница

Рад је финансиран од стране Фонда за науку Републике Србије (програм ПРОМИС, пројекат SYMBIOSIS, #6066997).

## INFLUENCE OF ANIONS, BUFFER AND DETERGENT ON TOPOLOGY AND MORPHOLOGY OF ZIF-8 CRYSTALLITES

**Predrag Ristić<sup>a</sup>, Pavle Pavlović<sup>a</sup>, Marija Stanišić<sup>a</sup>, Radivoje Prodanović<sup>a</sup>, Miloš Ognjanović<sup>b</sup>, Veljko Đokić<sup>c</sup>, Tamara Todorović<sup>a</sup>**

<sup>a</sup> University of Belgrade – Faculty of Chemistry, Studentski trg 12-16, Belgrade, Serbia; <sup>b</sup> Institute of Nuclear Sciences “Vinča”, University of Belgrade, Mike Petrovića Alasa 12-14, Vinča – Belgrade, Serbia; <sup>c</sup> Innovation Center of the Faculty of Technology and Metallurgy University of Belgrade, Karnegijeva 4, Belgrade, Serbia

e-mail: predrag@chem.bg.ac.rs

Metal-organic frameworks (MOFs) are a class of inorganic materials with potential application in gas adsorption, biosensitization, biocatalysis, and drug delivery [1]. Zeolitic imidazolate frameworks (ZIFs) are a subclass of MOFs, particularly suitable for enzyme immobilization by biomimetic mineralization [1]. ZIF-8 consisting of tetrahedral Zn(II) ions bridged *via* 2-methylimidazole ligands (mIM) is most commonly used for this purpose. However, the topology and morphology of ZIF-8 crystals vary depending on the experimental synthesis conditions. In addition, during the process of biomimetic mineralization, the biocomposite composed of the enzyme immobilized in ZIF-8 is washed with buffers and detergents to remove excess of an adsorbed enzyme, which can lead to the chemical transformation of the surface and undesirable release of the enzyme. Therefore, the influence of anion nature on the topology and morphology of ZIF-8 was investigated in this work, and the stability of ZIF-8 crystallites was tested in acetate buffer (0.1 M; pH = 5.5) and sodium dodecyl sulfate solution ( $\omega = 10\%$ ). Crystal morphology was monitored by scanning electron microscopy, while topology was determined using powder X-ray diffraction.

[1] C.-X. Jin, H.-B. Shang, *Journal of Solid State Chemistry*, **297** (2021) 122040.

### *Acknowledgement*

The work was funded by the Science Fund of the Republic of Serbia (program PROMIS, project SYMBIOSIS, #6066997).

## SINTEZA I KRISTALNA STRUKTURA KOMPLEKSA PALADIJUM(II) JONA SA 2-AMINO-6-HLOROBENZOTIAZOLOM

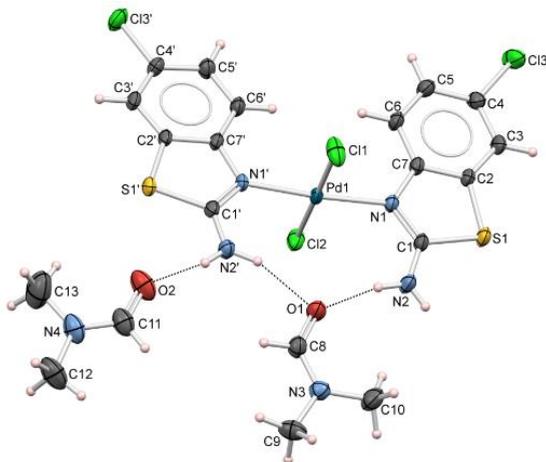
S. Jovičić<sup>a</sup>, V. Jevtić<sup>a</sup>, Đ. Petrović<sup>a</sup>, D. Stojković<sup>b</sup>, N. Vuković<sup>a</sup>, M. Vukić<sup>a</sup>,  
O. Klisurić<sup>c</sup>, M. Kačaniová<sup>d</sup>

<sup>a</sup>Institut za hemiju, Prirodno-matematički fakultet, Univerzitet u Kragujevcu, Radoja Domanovića 12, 34000 Kragujevac, Srbija; <sup>b</sup>Institut za informacione tehnologije, Univerzitet u Kragujevcu, Jovana Cvijica bb, 34000 Kragujevac, Srbija; <sup>c</sup>Prirodno-matematički fakultet, Univerzitet u Novom Sadu, Trg Dositeja Obradovića 3, 21000 Novi Sad, Srbija; <sup>d</sup>Institut za Mikrobiologiju, Fakultet za biotehnologiju i prehrambene nauke, Univerzitet za poljoprivredu u Nitri, Tr. A. Hlinku 2 Slovačka, 949 76 Nitra, Republika Slovačka  
e-mail: sandra.jovicic@pmf.kg.ac.rs

0,050 g (0,0015 mol)  $K_2PdCl_4$  se rastvori u vodi i postavi na magnetnu mešalicu. 0,051 g (0,031 mol) liganda, 2-amino-6-hlorobenzotiazola, rastvori se u 10 mL metanola i u porcijama se dodaje u vodeni rastvor  $K_2PdCl_4$ . Ligand i  $K_2PdCl_4$  reaguju u odnosu 2:1. Reakcija se izvodi na sobnoj temperaturi i reakciona smeša se meša 1 h. Dobijeni talog je profiltriran, ispran vodom i sušen na vazduhu. Mala količina taloga je rastvorena u smeši DMF : etanol = 1:1 i rastvor je čuvan na sobnoj temperaturi nekoliko dana, nakon čega su dobijeni žuti kristali.

Pretpostavljena struktura dobijenog jedinjenja potvrđena je na osnovu rezultata rendgenske strukturne analize.

Kristalografski podaci: triklinični kristalni sistem, prostorna grupa  $P\bar{1}$ , veličina kristala  $0,29 \times 0,22 \times 0,20 \text{ mm}^3$ ,  $a = 11,4816(7) \text{ \AA}$ ,  $b = 11,8477(6) \text{ \AA}$ ,  $c = 12,2358(9) \text{ \AA}$ ,  $V = 1403,82(17) \text{ \AA}^3$  i  $Z = 2$ ,  $\rho_x = 1,639 \text{ g/cm}^3$ ,  $\mu = 1,22 \text{ mm}^{-1}$ . Utačnjavanje sa  $F^2$  (336 parametara i 6484 nezavisnih refleksija) dalo je  $R[F^2 > 2\sigma(F^2)] = 0,036$ ,  $wR(F^2) = 0,071$ ,  $S = 1,052$ .



Slika 1. Molekulska struktura kompleksa paladijum(II) jona sa 2-amino-6-hlorobenzotiazolom



## МОЛЕКУЛСКЕ И КРИСТАЛНЕ СТРУКТУРЕ КОМПЛЕКСА Cd(II) СА ТИАЗОЛИЛ-ХИДРАЗОНИМА

**С. Марковић<sup>а</sup>, А. Вишњевац<sup>б</sup>, Т. Тодоровић<sup>а</sup>, Н. Филиповић<sup>в</sup>**

<sup>а</sup> Универзитет у Београду – Хемијски факултет, Студентски трг 12-16, Београд, Србија;

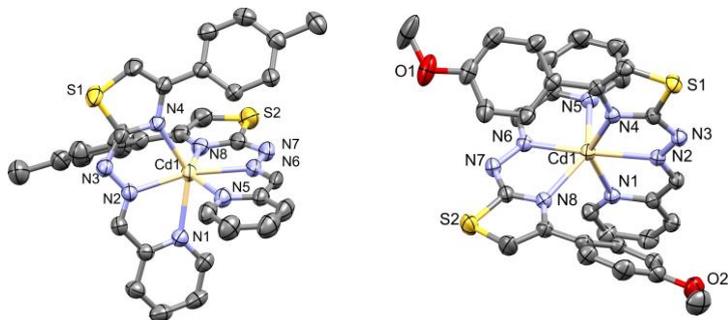
<sup>б</sup> Институт Руђер Бошковић, Бјеничка цеста 54, Загреб, Хрватска;

<sup>в</sup> Универзитет у Београду – Пољопривредни факултет, Немањина 6, Београд – Земун, Србија

e-mail: markovics@chem.bg.ac.rs

Директном реакцијом лиганата на бази тиазолил-хидразона са  $\text{Cd}(\text{CH}_3\text{COO})_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$  у метанолу добијени су неутрални комплекси  $[\text{Cd}(\text{L1})_2]$  (**1**) и  $[\text{Cd}(\text{L2})_2]$  (**2**). Монокристали црвене боје погодни за рендгенску структурну анализу су добијени дифузијом пара циклопентана у раствор комплекса у метилен-хлориду. Комплекс **1** кристалише у просторној групи  $P2_1/c$  моноклиничног кристалног система, док комплекс **2** кристалише у просторној групи  $P-1$  триклиничног кристалног система. У оба комплекса лиганди су координовани у моноанјонском облику пиридинског, иминског и тиазоловог атома азота, формирајући два петочлана хелатна прстена око централног металног јона октаедарске геометрије (Слика 1). Главни допринос стабилности кристалног паковања комплекса **1** дају ароматичне пиридин-пиридин интеракције. Поред тога заступљене су и неklasичне  $\text{C}-\text{H} \cdots \pi$  и  $\text{C}-\text{H} \cdots \text{N}$  водоничне интеракције. Кристално паковање комплекса **2** се базира на аналогним пиридин-пиридин ароматичним интеракцијама.

**Слика 1.** ORTEP приказ молекулске структуре **1** (лево) и **2** (десно). Термални елипсоиди су приказани са 30% вероватноће. Атоми Н су изостављени ради прегледности.



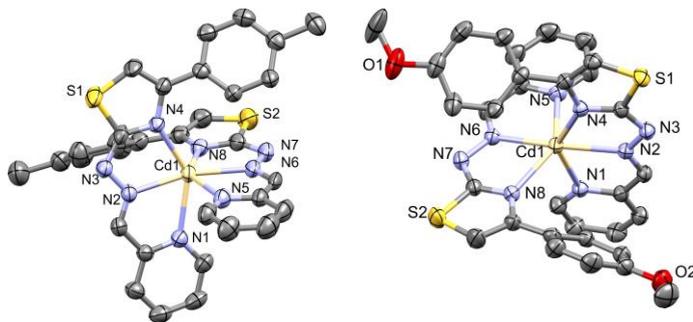
## MOLECULAR AND CRYSTAL STRUCTURES OF Cd(II) COMPLEXES WITH THIAZOLYL-HYDRAZONES

**S. Marković<sup>a</sup>, A. Višnjec<sup>b</sup>, T. Todorović<sup>a</sup>, N. Filipović<sup>c</sup>**

<sup>a</sup> *University of Belgrade – Faculty of Chemistry, Studentski trg 12-16, Belgrade, Serbia;* <sup>b</sup> *Institute Ruđer Bošković, Bjenička cesta 54, Zagreb, Croatia;* <sup>c</sup> *University of Belgrade – Faculty of Agriculture, Nemanjina 6, Belgrade – Zemun, Serbia*  
e-mail: markovics@chem.bg.ac.rs

By direct reaction of thiazolyl-hydrazone based ligands with  $\text{Cd}(\text{CH}_3\text{COO})_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$  in methanol the neutral complexes  $[\text{Cd}(\text{L}1)_2]$  (**1**) and  $[\text{Cd}(\text{L}2)_2]$  (**2**) were obtained. Red single crystals suitable for X-ray structural analysis were obtained by diffusion of cyclopentane vapor into a solution of the complexes in methylene chloride. Complex **1** crystallizes in the space group  $P2_1/c$  of the monoclinic crystal system, while complex **2** crystallizes in the space group  $P-1$  of the triclinic crystal system. In both complexes, the ligands are coordinated in monoanionic form *via* a pyridine, imine, and thiazole nitrogen atom, forming two five-membered chelate rings around the central metal ion of octahedral geometry (Figure 1). The main interactions contributing to the stability of the crystal packing of **1** are aromatic pyridine-pyridine interactions. In addition, non-classical  $\text{C}-\text{H} \cdots \pi$  and  $\text{C}-\text{H} \cdots \text{N}$  hydrogen interactions are present. The crystal packing of **2** is based on analogous pyridine-pyridine aromatic interactions.

**Figure 1.** ORTEP drawings of molecular structures of **1** (left) and **2** (right). Thermal ellipsoids are shown at the 30% probability level. Hydrogen atoms are omitted for clarity.



## КРИСТАЛНЕ СТРУКТУРЕ ДВА МЕТОКСИБЕНЗЕН- ПИРАЗОЛОНСКА ДЕРИВАТА

**С. Б. Новаковић<sup>a</sup>, Г. А. Богдановић<sup>a</sup>, З. Д. Петровић<sup>b</sup>, Д. Симијонових<sup>c</sup>,  
В. М. Миловановић<sup>b</sup>, Ј. Бранковић<sup>b</sup>, В. П. Петровић<sup>b</sup>**

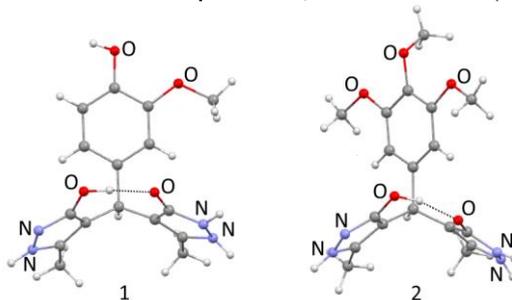
<sup>a</sup> Лабораторија за теоријску физику и физику кондензоване материје, Институт за нуклеарне науке “ВИНЧА” – Институт од националног значаја за Републику Србију, Универзитет у Београду, Београд, Србија

<sup>b</sup> Универзитет у Крагујевцу, Природно-математички факултет, Институт за хемију, Радоја Домановића 12, 34000 Крагујевац, Србија

<sup>c</sup> Универзитет у Крагујевцу, Институт за информационе технологије, Одсек за науку, Јована Цвијића бб, 34000 Крагујевац, Србија

e-mail: snovak@vin.bg.ac.rs

Пиразолонски деривати ванилина и триметоксibenзалдехида добијени су у реакцији 5-метил-2,4-дихидро-3H-пиразол-3-она са одговарајућим алдехидима у присуству јонске течности диетаноламонијум-хидрогенсулфата као катализатора. За прекристализацију производа **1** коришћена је смеша метанола и воде (2:1), а за прекристализацију производа **2** смеша пропанола, етанола и воде (1:1:1).



Структурна анализа је показала да добијена једињења садрже супституисани бензен прстен повезан са две таутомерне форме полазног пиразолонa. Хидроксилни донор и карбонилни акцептор формирају јаку унутармолекулску водоничну везу (Н...О растојања од 1.64(5) и 1.59(6) Å у једињењу **1**, односно у једињењу **2**). Поред различитих супституената присутних на бензеновом прстену, главна структурна разлика између молекула је у различитој ротацији бензеновог у односу на пиразолонске прстенове. Обе кристалне структуре су стабиловане О–Н...N и N–H...O водоничним везама. Присуство молекула пропанола као солвента у кристалној структури **2** значајно мења шему међумолекулских интеракција у односу на структуру **1**.

Овај рад је подржан од стране Министарства просвете, науке и технолошког развоја Републике Србије (пројекати: 451-03-9/2021-14/200122 и 451-03-9/2021-14/200378).

## CRYSTAL STRUCTURES OF TWO METHOXYBENZENE-PYRAZOLONE DERIVATIVES

**S. B. Novaković<sup>a</sup>, G. A. Bogdanović<sup>a</sup>, Z. D. Petrović<sup>b</sup>, D. Simijonović<sup>c</sup>, V. M. Milovanović<sup>b</sup>, J. Branković<sup>b</sup>, V. P. Petrović<sup>b</sup>**

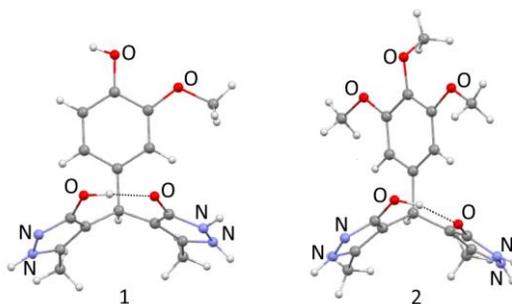
<sup>a</sup>*Department of Theoretical Physics and Condensed Matter Physics, VINČA” Institute of Nuclear Sciences - National Institute of the Republic of Serbia, University of Belgrade, Belgrade, Serbia*

<sup>b</sup>*University of Kragujevac, Faculty of Science, Department of Chemistry, 12 Radoja Domanovića, 34000 Kragujevac, Serbia*

<sup>c</sup>*University of Kragujevac, Institute for Informational Technologies, Department of Science, Jovana Cvijića bb, 34000 Kragujevac, Serbia*

e-mail: snovak@vin.bg.ac.rs

Pyrazolone derivatives of vanilline and trimethoxybenzaldehyde were obtained in the reaction of 5-methyl-2,4-dihydro-3H-pyrazol-3-one with the corresponding aldehydes in the presence of diethanolammonium hydrogensulfate as a catalyst. A mixture of methanol and water (2:1) was used for the crystallization of product **1**, and a mixture of propanol, ethanol, and water (1:1:1) was used for crystallization of product **2**.



Single crystal X-ray diffraction analysis shows that both compounds consist of a substituted benzene ring connected with two tautomeric forms of starting pyrazolone. Hydroxy donor and carbonyl acceptor form a strong intramolecular hydrogen bond (H...O distances are 1.64(5) and 1.59(6) Å in **1** and **2** respectively). Apart from the different substituents on the benzene ring, the main structural difference between the molecules **1** and **2** is related to a different relative rotation of the corresponding benzene and pyrazolone rings. Both crystal structures are stabilized by O–H...N and N–H...O hydrogen bonds. The presence of propanole molecule as a solvent in structure **2** significantly changes the intermolecular hydrogen bonding pattern in comparison to **1**.

*This research was supported by the Serbian Ministry of Education, Science and Technological Development (Agreements No. 451-03-9/2021-14/200122 and 451-03-9/2021-14/200378).*

## FOTOKATALITIČKA RAZGRADNJA BOJE RO16 POMOĆU HIDROTHERMALNO SINTETISANIH KOMPOZITA CeO<sub>2</sub>/ZnO

**B. Simović<sup>a</sup>, G. Branković<sup>a</sup>, A. Dapčević<sup>b</sup>**

<sup>a</sup> Institut za multidisciplinarna istraživanja, Univerzitet u Beogradu, Kneza Višeslava 1, 11030 Beograd, Srbija; <sup>b</sup> Tehnološko-metalurški fakultet, Univerzitet u Beogradu, Karnegijeva 4, 11120 Beograd, Srbija  
e-mail: bojanasimovic@imsi.bg.ac.rs

Cink-oksidi su poznati fotokatalizatori koji se uglavnom koriste za razgradnju organskih zagađujućih supstanci u vodi uz pomoć veštačke ili sunčeve svetlosti [1, 2]. S druge strane, modifikovanje poluprovodnog fotokatalizatora drugim oksidima može poboljšati fotokatalitičku aktivnost usled sinergijskog efekta pojedinačnih oksida u smislu povećanja adsorpcije i širenja oblasti mogućih talasnih dužina za apsorpciju svetlosti.

Da bi se odredio optimalan sadržaj CeO<sub>2</sub> za najbolju fotokatalitičku aktivnost ZnO, vodeni rastvor Zn(NO<sub>3</sub>)<sub>2</sub> sa različitim sadržajem Ce(NO<sub>3</sub>)<sub>3</sub> (0; 2,5; 5 i 10 mol.%) tretiran je hidrotermalnim postupkom na 180 °C tokom 18 h u prisustvu NH<sub>3</sub>(aq). Dobijeni uzorci ispirani su destilovanom vodom i etanolom, centrifugirani i sušeni na 105 °C tokom 3 h. Strukturna, mikrostrukturna, optička i fotokatalitička svojstva dobijenih prahova ispitana su rendgenskom difrakcijom praha (XRPD), skenirajućom elektronskom mikroskopijom (FESEM), transmisivnom elektronskom mikroskopijom (TEM) i UV-Vis spektroskopijom. Fotokatalitička aktivnost dobijenih kompozita ispitana je na tekstilnoj azo-boji reaktivno narandžasta 16 (RO16, od engl. Reactive Orange 16) i upoređena je sa jednofaznim ZnO.

XRPD rezultati su pokazali da je jednofazni ZnO (heksagonalna struktura vircita, prostorna grupa *P63mc*) dobijen u sintezi bez Ce(NO<sub>3</sub>)<sub>3</sub>. Ako je sadržaj Ce(NO<sub>3</sub>)<sub>3</sub> bio 2,5; 5 ili 10 mol.%, dobijeni uzorci sadržali su smešu ZnO i CeO<sub>2</sub> (struktura fluorita, prostorna grupa *Fm $\bar{3}$ m*). Izračunati fazni sastavi proizvoda dobro odgovaraju polaznim sastavima, čime je potvrđeno nastajanje kompozita CeO<sub>2</sub>/ZnO sa različitim molarnim odnosima. Kako se sadržaj CeO<sub>2</sub> povećavao primećeno je blago smanjenje zapremine jedinične ćelije ZnO, sa 47,950(4) Å<sup>3</sup> za jednofazni ZnO na 47,726(4) Å<sup>3</sup> za 10% CeO<sub>2</sub>/ZnO, zbog blagog smanjenja parametara jedinične ćelije: *a* od 3,2566(1) do 3,2519(1) Å i *c* od 5,2206(4) do 5,2114(4) Å, redom. Krajnji fazni sastav, kao i nenarušena vircitna struktura ZnO ukazali su da je CeO<sub>2</sub> raspoređen po površini ZnO, što su potvrdili FESEM i TEM. Mikroskopski rezultati su pokazali da je veličina sfernih kristalita CeO<sub>2</sub> bila 5 ± 1 nm, dok je ZnO imao bimodalnu raspodelu veličine kristalita od 5 nm do 4 μm. Stoga morfologija ZnO praha varira od izduženih nanozrna do mikroštapića koji dalje grade 3-D morfologiju nalik mašnjama. Kompozit 5%CeO<sub>2</sub>/ZnO je pokazao najbolju fotokatalitičku aktivnost razgradivši RO16 za 180 minuta. Nanokompoziti CeO<sub>2</sub>/ZnO sa 2,5 i 10 mol.% CeO<sub>2</sub> pokazali su sličnu fotoaktivnost kao nemodifikovani ZnO. Može se zaključiti da optimalan sadržaj CeO<sub>2</sub> iznosi 5 mol.%.

[1] B. Simović, A. Golubović, I. Veljković, D. Poleti, J. Zdravković, D. Mijin, A. Bjelajac, *Journal of the Serbian Chemical Society*, **79** (2014) 1433–1443.

[2] B. Simović, D. Poleti, A. Golubović, A. Matković, M. Šćepanović, B. Babić, G. Branković, *Processing and Application of Ceramics*, **11** (2017) 27–38.

## PHOTOCATALYTIC DEGRADATION OF RO16 DYE USING HYDROTHERMALLY SYNTHESIZED CeO<sub>2</sub>/ZnO COMPOSITES

**B. Simović<sup>a</sup>, G. Branković<sup>a</sup>, A. Dapčević<sup>b</sup>**

<sup>a</sup> Institute for Multidisciplinary Research, University of Belgrade, Kneza Višeslava 1, 11030 Belgrade, Serbia; <sup>b</sup> Faculty of Technology and Metallurgy, University of Belgrade, Karnegijeva 4, 11120 Belgrade, Serbia  
e-mail: bojanasimovic@imsi.bg.ac.rs

Zinc oxide is a well-known photocatalyst mainly used to degrade organic water pollutants using artificial or sunlight [1, 2]. On the other hand, the modification of semiconductor photocatalysts by other oxides can improve their photocatalytic activity regarding synergistic effect of single oxides in the sense of increasing the adsorption and broadening region of possible wavelengths for light absorption.

In order to find the optimal CeO<sub>2</sub> content for the best photocatalytic activity of ZnO, the aqueous solution of Zn(NO<sub>3</sub>)<sub>2</sub> with different Ce(NO<sub>3</sub>)<sub>3</sub> content (0, 2.5, 5 and 10 mole%) was hydrothermally treated at 180 °C for 18 h in the presence of NH<sub>3</sub>(aq). The obtained samples were rinsed out with distilled water and ethanol, centrifuged and dried at 105 °C for 3h. The structural, microstructural, optical and photocatalytic properties of resulting powders have been investigated by the XRPD, FESEM, TEM and UV-vis techniques. The photocatalytic activity of obtained composites was tested on the Reactive Orange 16 (RO16) textile azo dye and compared to the single-phase ZnO.

Based on XRPD results, the single-phase ZnO (hexagonal wurtzite structure, space group *P63mc*) was obtained without addition of Ce(NO<sub>3</sub>)<sub>3</sub>. If Ce(NO<sub>3</sub>)<sub>3</sub> content was 2.5, 5 or 10 mole.%, the obtained samples consisted of ZnO and CeO<sub>2</sub> (fluorite structure, space group *Fm  $\bar{3}$  m*) mixed phases. The calculated final phase compositions corresponded well with starting compositions, which confirmed the formation of CeO<sub>2</sub>/ZnO composites with different molar ratios. As CeO<sub>2</sub> content increased, the slight decrease in ZnO unit cell volume, from 47.950(4) Å<sup>3</sup> for single-phase ZnO to 47.726(4) Å<sup>3</sup> for 10% CeO<sub>2</sub>/ZnO, was noticed due to negligible decrease in unit cell parameters: *a* from 3.2566(1) to 3.2519(1) Å and *c* from 5.2206(4) to 5.2114(4) Å, respectively. The final phase compositions as well as preserved ZnO wurtzite structure indicated that CeO<sub>2</sub> was distributed onto ZnO surface, which was confirmed by FESEM and TEM. The microscopic results showed that the size of spherical CeO<sub>2</sub> crystallites was 5 ± 1 nm, while ZnO had a bimodal distribution of the crystallite size from 5 nm to 4 μm. Hence the morphology of ZnO varies from elongated nanograins to microrods that further build a 3-D tie-like morphology. The 5% CeO<sub>2</sub>/ZnO composite demonstrated the best photocatalytic activity by degrading RO16 for 180 minutes. CeO<sub>2</sub>/ZnO composites with 2.5 and 10 mole.% CeO<sub>2</sub> showed similar photoactivity as unmodified ZnO. It could be concluded that the optimal CeO<sub>2</sub> content is 5 mole.%.

- [1] B. Simović, A. Golubović, I. Veljković, D. Poleti, J. Zdravković, D. Mijin, A. Bjelajac, *Journal of the Serbian Chemical Society*, **79** (2014) 1433–1443.  
[2] B. Simović, D. Poleti, A. Golubović, A. Matković, M. Šćepanović, B. Babić, G. Branković, *Processing and Application of Ceramics*, **11** (2017) 27–38.

## УРЕЂЕЊЕ КИСЕОНИКА И ФОРМИРАЊЕ $-U$ ЦЕНТАРА У $YBa_2Cu_3O_{6+x}$ СУПЕРПРОВОДНИКУ

**М. М. Милић**

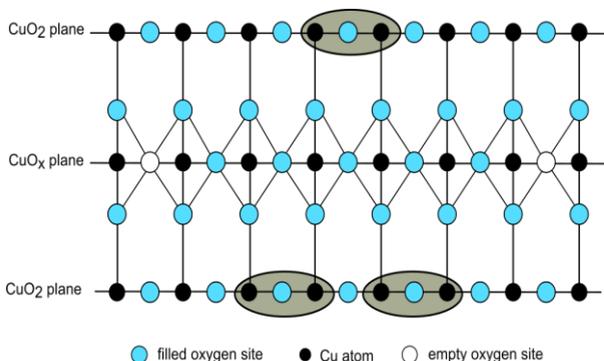
Институт за нуклеарне науке „ВИНЧА“ (020), Институт од националног значаја за Републику Србију, Универзитет у Београду, ПП 522 11001, Београд, Србија  
e-mail: mikac@vin.bg.ac.rs

Проводне особине високотемпературног суперпроводника (ВТС)  $YBa_2Cu_3O_{6+x}$  (YBCO) првенствено су одређене нивоом допирања суперпроводних равни електронским шупљинама (носиоци суперпроводне струје у ВТС). YBCO суперпроводник се карактерише слојевитом структуром, коју чине CuO равни и кисеоником дефицитарне  $CuO_x$  равни, при чему се свака  $CuO_x$  раван налази између две CuO равни. Верује се да  $CuO_x$  равни служе као резервоар електронских шупљина, које при одређеним условима бивају допирене у CuO равни, али тачан механизам на који се ово допирање одвија још увек није разјашњен.

Модел  $-U$  центара (NUC модел) предвиђа формирање електронских парова на паровима Cu атома у CuO равнима, који затим делују као привлачни центри за електронске шупљине и тако омогућавају њихов пренос из  $CuO_x$  ка CuO равнима [1]. Овај модел такође предлаже, да до настанка електронских парова у CuO равнима долази само онда када Cu и O атоми у  $CuO_x$  равнима формирају низове (CuO ланци) који садрже барем три атома кисеоника.

У овом раду је помоћу нумеричке Монте Карло методе, извршен прорачун

броја формираних NUC-ова у CuO равнима у оквиру Изинговог модела са асиметричним интеракцијама других суседа (ASYNNNI модел) као модела уређења атома кисеоника у базичним равнима. Одређено је допирање CuO равни за различите вредности садржаја кисеоника,  $x$ , и упоређено је са оним добијеним за случајну расподелу кисеоникових атома. Показано је да се у оквиру NUC модела тачно одређивање допирања CuO равни YBCO суперпроводника, може постићи само ако се узме у обзир експериментално утврђено постојање различитих уређења атома кисеоника у  $CuO_x$  равнима.



**Слика 1.** Формирање NUC-ова на паровима Cu атома у CuO равнима. CuO ланац у  $CuO_x$  равни, дужине 5 атома кисеоника, доводи до стварања три NUC-а.

[1] K. V. Mitsen, O. M. Ivanenko, Mechanism of carrier generation and the origin of the pseudogap and 60 K phases in YBCO, *JETP Letters* **82** (2005) 129-133.

## OXYGEN ORDERING AND FORMATION OF $-U$ CENTERS IN THE $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6+x}$ SUPERCONDUCTOR

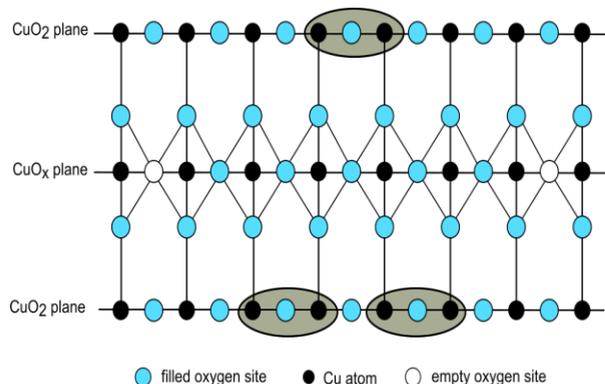
**M. M. Milić**

*Vinča Institute of Nuclear Sciences (020), National Institute of the Republic of Serbia, University of Belgrade, P.O. Box 522, RS-11001 Belgrade, Serbia*  
e-mail: mikac@vin.bg.ac.rs

Conducting properties of the high- $T_c$  cuprate superconductor  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6+x}$  (YBCO) are primarily determined by the degree of doping of the conducting  $\text{CuO}$  planes by electronic holes, carriers of the superconducting current in high- $T_c$  superconductors. The YBCO superconductor is characterized by layered structure formed by the stacking of  $\text{CuO}$  and oxygen deficient  $\text{CuO}_x$  planes, each of the  $\text{CuO}_x$  planes being sandwiched between two  $\text{CuO}$  planes. It is generally accepted that  $\text{CuO}_x$  planes serve as a reservoirs of holes, which are under appropriate conditions doped to the  $\text{CuO}$  planes. Exact mechanism of hole transfer from the  $\text{CuO}_x$  to the  $\text{CuO}$  planes is not established yet.

The  $-U$  centers model (NUC model) assumes formation of electron pairs (NUCs) at certain Cu pairs in the  $\text{CuO}$  planes, which serve as attracting sites for the electronic holes, thus providing transfer of electronic holes from  $\text{CuO}_x$  to  $\text{CuO}$  planes [1]. This model also suggests, that the electron pairs in the  $\text{CuO}$  planes are formed only when the Cu and O atoms in the  $\text{CuO}_x$  planes form continuous sequences ( $\text{CuO}$  chains) containing at least three oxygen atoms.

In this work, using Monte Carlo numerical method, number of the NUCs formed in the  $\text{CuO}$  planes have been calculated in the frame of the Ising model with asymmetric next nearest neighbor interactions (ASYNNNI model) as a model of oxygen ordering in the  $\text{CuO}_x$  planes. Doping of  $\text{CuO}$  planes have been evaluated for various values of oxygen content,  $x$ , and compared to the one obtained assuming random distribution of oxygen atoms. It has been shown that in the frame of NUC model, correct estimation of the hole doping of the  $\text{CuO}$  planes of YBCO superconductor can be achieved only taking into account, experimentally observed, various arrangements of oxygen atoms in the  $\text{CuO}_x$  planes.



**Figure 1.** Formation of NUCs on the pairs of Cu atoms in the  $\text{CuO}$  planes.  $\text{CuO}$  chain in the  $\text{CuO}_x$  plane of length 5 oxygen atoms leads to the formation of three NUCs

[1] K. V. Mitsen, O. M. Ivanenko, Mechanism of carrier generation and the origin of the pseudogap and 60 K phases in YBCO, *JETP Letters* 82 (2005) 129-133.

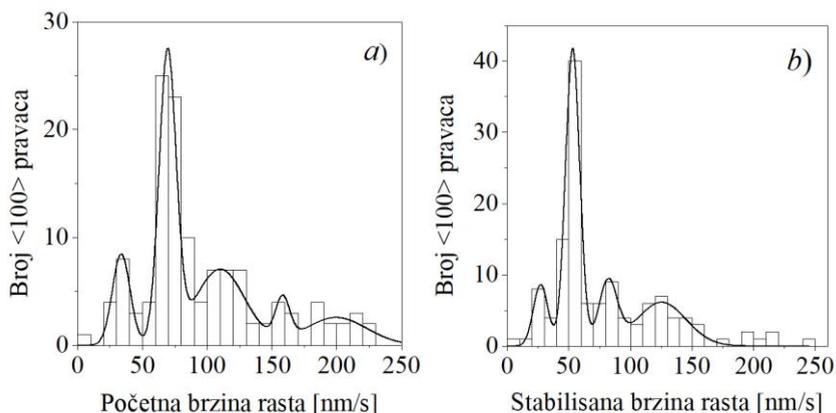
## UTICAJ MAGNETNOG POLJA NA RASPODELE BRZINA RASTA MALIH KRISTALA NATRIJUM-HLORATA

**M. Milojević, B. Maksimović, B. Vučetić, M. Mitrović, A. Žekić**

*Fizički fakultet, Univerzitet u Beogradu*

e-mail: andrijana@ff.bg.ac.rs

Dosadašnja istraživanja su pokazala da spoljašnje magnetno polje može da poveća, smanji [1], ali i da ne menja [2] brzine rasta različitih kristala. Ovde će biti predstavljeni rezultati proučavanja uticaja homogenog magnetnog polja jačine  $B = 55\text{mT}$  na brzine rasta malih kristala natrijum-hlorata u pravcu  $\langle 100 \rangle$  iz vodenih rastvora zasićenih na temperaturi  $T_0 = (31.0 \pm 0.1)^\circ\text{C}$ . Pravac polja bio je normalan na tok rastvora u ćeliji u kojoj su realizovani nukleacija i rast kristala na temperaturi  $T = (28.0 \pm 0.1)^\circ\text{C}$ . Na slici 1 prikazane su raspodele brzina rasta proučavanih kristala rasliih u prisustvu magnetnog polja: (a) početnih, u prvih 30 min rasta, i (b) stabilisanih, nakon 30 min.



Slika 1.

Poređenjem raspodela prikazanih na slici 1 (rast kristala u prisustvu magnetnog polja) i raspodela u radu [3] (bez magnetnog polja), primećuje se značajno pomeranje vrednosti brzina koje odgovaraju maksimumima raspodela ka većim vrednostima. Mehanizmi kojima magnetno polje utiče na brzine rasta kristala još uvek nisu jasni. Jedan od predloženih mehanizama podrazumeva da magnetno polje menja parametar rešetke i na taj način utiče na rast kristala iz rastvora [4].

[1] F. Kuschel, A.N. König, R. Groop, *Crystal Res. Technolog.* **17**(1982) 793.

[2] M.M. Mitrović, B.B. Žižić, M.Lj. Napijalo, *J. Crystal Growth* **87**(1988) 439–445.

[3] B.M. Misailović, D.A. Malivuk, A.A. Žekić, M.M. Mitrović, *Crysta. Growth Des.* **14**(2014) 972–978.

[4] B.B. Žižić, S.E. Božin, S.I. Žegarac, Ž.M. Nikolić, *J. Crystal Growth* **54**(1981) 439–442.

## INFLUENCE OF MAGNETIC FIELD ON GROWTH RATE DISTRIBUTIONS OF SMALL SODIUM CHLORATE CRYSTALS

**M. Milojević, B. Maksimović, B. Vučetić, M. Mitrović, A. Žekić**

*Faculty of Physics, University of Belgrade*  
e-mail: andrijana@ff.bg.ac.rs

Previous studies have shown that the external magnetic field can increase, decrease [1], but also not change [2] the growth rates of different crystals. Here will be presented the results of studying the influence of a homogeneous magnetic field  $B = 55 \text{ mT}$  on the growth rates of small crystals of sodium chlorate in the  $\langle 100 \rangle$  direction grown from aqueous solutions saturated at temperature  $T_0 = (31.0 \pm 0.1)^\circ\text{C}$ . The applied field was perpendicular to the direction of the solution flow through the cell in which the crystals were nucleated and grew at temperature  $T = (28.0 \pm 0.1)^\circ\text{C}$ . Figure 1 shows the distributions of growth rates of the analyzed crystals grown in the presence of magnetic field: (a) initial, in the first 30 min of growth, and (b) stabilized, after 30 min.

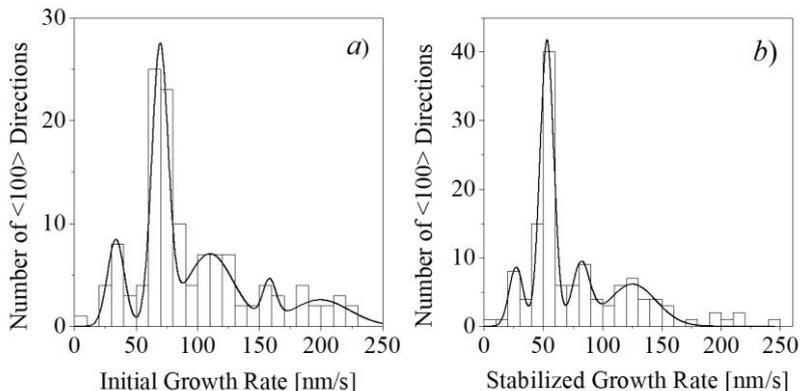


Figure 1.

By comparing the distributions from Figure 1 (crystal growth in the presence of magnetic field) and the distributions in Ref. [3] (without magnetic field), a significant shift of the growth rate values, corresponding to the distribution maxima, to higher values is occurred. The mechanisms by which the magnetic field affects crystal growth rates are still unclear. One of the proposed mechanisms implies that the magnetic field changes the lattice parameter and thus affects the growth of crystals from the solution [4].

[1] F. Kuschel, A.N. König, R. Groop, *Crystal Res. Technol.* **17**(1982) 793.

[2] M.M. Mitrović, B.B. Žižić, M.Lj. Napijalo, *J. Crystal Growth* **87**(1988) 439–445.

[3] B.M. Misailović, D.A. Malivuk, A.A. Žekić, M.M. Mitrović, *Crysta. Growth Des.* **14**(2014) 972–978.

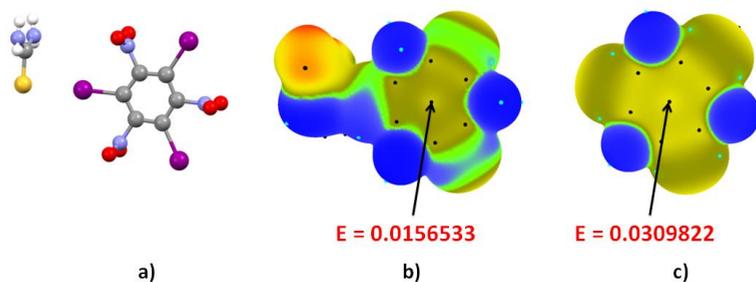
[4] B.B. Žižić, S.E. Božin, S.I. Žegarac, Ž.M. Nikolić, *J. Crystal Growth* **54**(1981) 439–442.

## УТИЦАЈ ХАЛОГЕНОГ ВЕЗИВАЊА НА ОСЕТЉИВОСТ КА ДЕТОНАЦИЈИ ВИСОКОЕНЕРГЕТСКИХ МОЛЕКУЛА

**Д. Б. Нинковић<sup>а</sup>, А. Б. Ђуновић<sup>а</sup>, Д. Ж. Вељковић<sup>б</sup>**

<sup>а</sup>Иновациони центар Хемијског факултета, Студентски трг 12-16, Београд; <sup>б</sup>Универзитет у Београду – Хемијски факултет, Студентски трг 12-16, Београд, Србија, e-mail: vdu-san@chem.bg.ac.rs

Предвиђање особина високоенергетских једињења помоћу метода Теорије функционала густине (DFT) је циљ великог броја теоријских студија [1]. Један од најзначајнијих алата за предвиђање осетљивости високоенергетских молекула ка детонацији су мапе електростатичког потенцијала (MEP). Познато је да молекули класичних С, Н, N, О - експлозива имају веома позитивне вредности електростатичког потенцијала у централним регионима површине молекула [2]. Иако је познато да водонично везивање може да утиче на осетљивост високоенергетских молекула [3], утицај халогеног везивања у молекулима који садрже атоме халогена још увек није расветљен.



**Слика 1.** а) Геометрија из кристалне структуре NANTEU, б) мапа електростатичког потенцијала за систем 1,3,5-тријодо-2,4,6-тринитробензен са тиуреом и с) мапа електростатичког потенцијала за 1,3,5-тријодо-2,4,6-тринитробензен

У оквиру овог рада претражена је Кембричка база структурних података (CSD) у потрази за кристалним структурама експлозива који садрже халогене елементе. На основу анализе халогеног везивања у овим структурама, направљени су модел системи за DFT прорачуне и израчунате су мапе електростатичких потенцијала. Анализа резултата прорачуна је показала да се халогено везивање може користити за подешавање вредности електростатичких потенцијала изнад централних делова енергетских молекула. Резултати ове студије могу бити од значаја за развијање нових високоенергетских материјала који садрже халогене елементе.

Истраживање спроведено уз подршку Фонда за науку Републике Србије, ПРОМИС, #6066886, CD-HEM. Министарство просвете, науке и технолошког развоја Републике Србије, Евиденциони број: 451-03-9/2021-14/200168 и 451-03-9/2021-14/200288.

[1] V. M. Rice, J. J. Hare, *J. Phys. Chem. A*, **106**, (2002), 1770-1783.

[2] P. Politzer, J. S. Murray, *Propellants Explos. Pyrotech.* **41**, (2016), 414-425

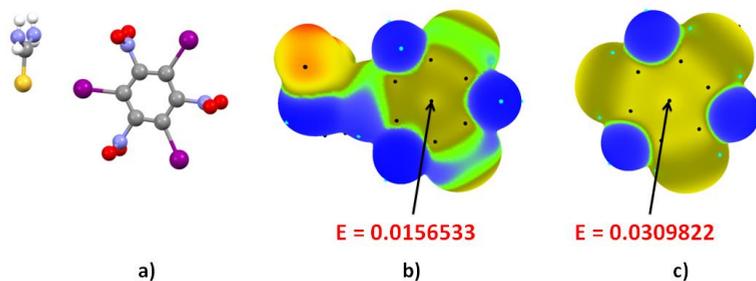
[3] F. Ren, D. Cao, W. Shi, H. Gao, *J. Mol. Model.* **22**, (2016), 1-8.

## INFLUENCE OF HALOGEN BONDING ON THE SENSITIVITY OF HIGH-ENERGY MOLECULES TOWARDS DETONATION

**D. B. Ninković<sup>a</sup>, A. B. Đunović<sup>a</sup>, D. Ž. Veljković<sup>b</sup>**

<sup>a</sup>Innovation center of the Faculty of Chemistry, Studentski trg 12-16, Belgrade, Serbia. <sup>b</sup>University of Belgrade – Faculty of Chemistry, Studentski trg, 12- 16, Belgrade, Serbia  
e-mail: vdusan@chem.bg.ac.rs

Prediction of the characteristics of new energetic compounds using Density Functional Theory (DFT) calculations is the ultimate goal of many theoretical studies [1]. One of the most important tools for revealing the sensitivity of the energetic molecules is Molecular Electrostatic Potential (MEP). It is known that molecules of classical C, H, N, O-explosives have strongly positive electrostatic potential above the central areas of the molecular surfaces [2]. While it is known that hydrogen bonds do affect the electrostatic potential and sensitivity of the energetic molecules [3], influence of halogen bonds in halogen-containing energetic molecules is yet to be revealed.



**Figure 1.** a) Geometry of NAHTEY crystal structure, b) electrostatic potential map for 1,3,5-triiodo-2,4,6-trinitrobenzene bis(thiourea) system and c) electrostatic potential map for 1,3,5-triiodo-2,4,6-trinitrobenzene molecule. Energies of critical points are given in Hartree.

In this study, Cambridge Structural Database (CSD) was searched for the crystal structures of halogen-containing molecules of explosives. Based on the analysis of halogen bonding patterns in crystal structures, model systems for DFT calculations were made and electrostatic potential maps were calculated. Analysis of the results of the DFT calculations showed that halogen bonding could be used as a tool for adjusting the values of the energy of electrostatic potential above the center of the molecules of energetic materials. Results of this study could be of great importance for the development of the new halogen-containing energetic materials with improved sensitivity toward detonation.

This research was supported by the Science Fund of the Republic of Serbia, PROMIS, #6066886, CD-HEM. This work was supported by the Serbian Ministry of Education, Science and Technological Development (Contract numbers: 451-03-9/2021-14/200168 and 451-03-9/2021-14/200288).

[1] B. M. Rice, J. J. Hare, *J. Phys. Chem. A*, **106**, (2002), 1770-1783.

[2] P. Politzer, J. S. Murray, *Propellants Explos. Pyrotech.* **41**, (2016), 414-425

[3] F. Ren, D. Cao, W. Shi, H. Gao, *J. Mol. Model.* **22**, (2016), 1-8.

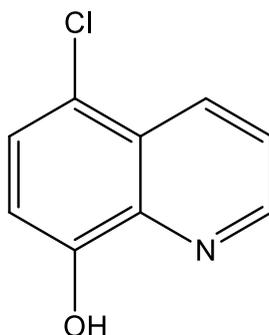
## JONSKI KOMPLEKSI PALADIJUMA SA 5-HLORO-8-HIDROKSIHINOLINOM I RAZLIČITIM KATJONIMA

**M. Russin**<sup>a</sup>, **A. Lüköová**<sup>a</sup>, **S. Drweesh**<sup>b</sup>, **E. Samořová**<sup>c</sup>, **M. Litecká**<sup>d</sup>, **I. Potočňák**<sup>a</sup>

<sup>a</sup>Department za neorgansku hemiju, Prirodno-matematički fakultet, P. J. Šafárik University, Moyz-esova 11, 04154 Košice, Slovačka; <sup>b</sup>Department za neorgansku hemiju, Nacionalni istraživački centar, P.O. 12622, 33 Elbohoth St. (former Elthirst), Dokki, Giza, Egipat; <sup>c</sup>Institut za fiziku Češke akademije nauka, Na Slovance 2, 182 21 Prag 8, Republika Češke; <sup>d</sup>Institut za neorgansku hemiju Češke akademije nauka, Řež č.p. 1001, 250 68 Husinec, Republika Češke  
e-mail: martin.russin@student.upjs.sk

U ovom radu opisujemo sintezu četiri nova kompleksa Pd(II):  $(\text{CH}_3)_2\text{NH}_2[\text{PdCl}_2(\text{ClIQ})]$  (**1**),  $\text{H}_2\text{ClQ}[\text{PdCl}_2(\text{ClIQ})]$  (**2**),  $\text{K}[\text{PdCl}_2(\text{ClIQ})]$  (**3**) i  $\text{Na}[\text{PdCl}_2(\text{ClIQ})]\cdot 2\text{H}_2\text{O}$  (**4**), koji sadrže deprotonovani molekul 5-hloro-8-hidroksihinolina (HClQ) (slika 1) i različite katjone ( $(\text{CH}_3)_2\text{NH}_2^+$  (dimetilamonijum-jon),  $\text{H}_2\text{ClQ}^+$  (5-hloro-8-hidroksihinolinijum-tjon),  $\text{K}^+$  ili  $\text{Na}^+$ ) u spoljašnjoj koordinacionoj sferi. Rendgenskom strukturnom analizom utvrđeno je da su sva četiri pripremljena kompleksa jonska sa istim kvadratno planarnim  $[\text{PdCl}_2(\text{ClIQ})]^-$  anjonom u kojem se dva hloridna liganda cis koordiniraju dok preostala dva položaja oko Pd(II) zauzimaju atomi kiseonika i azota iz bidentatnog helatnog liganda ClIQ. Koordinaciju HClQ liganda sa centralnim atomom paladijuma preko atoma kiseonika prati deprotonizacija hidroksilne grupe u fenolnom delu. Negativno naelektrisanje anjona uravnoteženo je različitim katjonima van koordinacione sfere,  $(\text{CH}_3)_2\text{NH}_2^+$  (**1**),  $\text{H}_2\text{ClQ}^+$  (**2**),  $\text{K}^+$  (**3**) ili  $\text{Na}^+$  (**4**). Dimetilamonijum-tjon je nastao razlaganjem dimetilformamida, koji je korišćen kao rastvarač, a katjon 5-hloro-8-hidroksihinolinijuma nastao je protonovanjem molekula HClQ na atomu azota. Struktura 4 takođe sadrži dva molekula vode. Posmatrali smo stabilizaciju ovih kompleksa međumolekulskim interakcijama, kao što su vodonične veze (1 – 4),  $\pi$ - $\pi$  interakcije (2) i jonske interakcije (1 - 4).

Zahvalnica: Ovaj rad je podržan grantovima VEGA 1/0148/19, APVV-18-0016 i VVGS-PF-2021-1769.



Slika 1. Strukturna formula 5-hloro-8-hidroksihinolina (HClQ)

## IONIC PALLADIUM COMPLEXES WITH 5-CHLORO-8-HYDROXYQUINOLINE AND DIFFERENT CATIONS

**M. Russin**<sup>a</sup>, **A. Lüköová**<sup>a</sup>, **S. Drweesh**<sup>b</sup>, **E. Samol'ová**<sup>c</sup>, **M. Litecká**<sup>d</sup>, **I. Potočňák**<sup>a</sup>

<sup>a</sup>Department of Inorganic Chemistry, Faculty of Science, P. J. Šafárik University, Moyzesova 11, 04154 Košice, Slovakia; <sup>b</sup>Department of Inorganic Chemistry, National Research Center, P.O. 12622, 33 Elbohoth St. (former Elthirst), Dokki, Giza, Egypt; <sup>c</sup>Institute of Physics of the Czech Academy of Sciences, Na Slovance 2, 182 21 Prague 8, Czech Republic; <sup>d</sup>Institute of Inorganic Chemistry of the Czech Academy of Sciences, Řež č.p. 1001, 250 68 Husinec, Czech Republic  
e-mail: martin.russin@student.upjs.sk

In this work we describe the preparation of four new Pd(II) complexes:  $(\text{CH}_3)_2\text{NH}_2[\text{PdCl}_2(\text{ClQ})]$  (**1**),  $\text{H}_2\text{ClQ}[\text{PdCl}_2(\text{ClQ})]$  (**2**),  $\text{K}[\text{PdCl}_2(\text{ClQ})]$  (**3**) and  $\text{Na}[\text{PdCl}_2(\text{ClQ})]\cdot 2\text{H}_2\text{O}$  (**4**), containing deprotonized molecule of 5-chloro-8-hydroxyquinoline (HClQ) (Fig. 1) and different cations ( $(\text{CH}_3)_2\text{NH}_2^+$  (dimethylammonium cation),  $\text{H}_2\text{ClQ}^+$  (5-chloro-8-hydroxyquinolinium cation),  $\text{K}^+$  or  $\text{Na}^+$ ) outside coordination sphere. All four prepared complexes were studied by single crystal X-ray analysis, which revealed that these complexes are ionic with the same square planar  $[\text{PdCl}_2(\text{ClQ})]^-$  anion in which two chloride ligands are *cis*-coordinated and remaining two positions around the Pd(II) atom are occupied by oxygen and nitrogen atoms from bidentate chelating ligand ClQ. The coordination of the HClQ ligand to the central palladium atom *via* the oxygen atom is accompanied by deprotonation of the hydroxyl group in phenolic part. Negative charges of the anions are balanced by different cations outside the coordination sphere,  $(\text{CH}_3)_2\text{NH}_2^+$  (**1**),  $\text{H}_2\text{ClQ}^+$  (**2**),  $\text{K}^+$  (**3**) or  $\text{Na}^+$  (**4**). Dimethylammonium cation was formed by decomposition of dimethylformamide, which was used as a solvent while 5-chloro-8-hydroxyquinolinium cation was formed by protonation of the HClQ molecule on the nitrogen atom. Structure of **4** also contains two water solvate molecules. We observed the stabilization of these complexes through intermolecular interactions, such as hydrogen bonds (**1** – **4**),  $\pi$ - $\pi$  interactions (**2**) and ionic interactions (**1** – **4**).

Acknowledgement: This work was supported by the grants VEGA 1/0148/19, APVV-18-0016 and VVGS-PF-2021-1769.

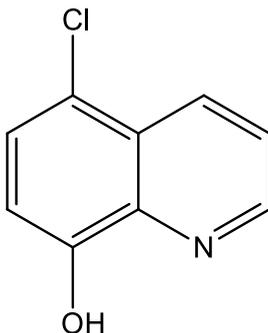


Figure 1. Structural formula of 5-chloro-8-hydroxyquinoline (HClQ).

## SINTEZA I STRUKTURA TETRANUKLEARNOG KOMPLEKSA CINKA SA ŠIFOVOM BAZOM AMINOGVANIDINA

**M. M. Radanović, M. V. Rodić, Lj. S. Vojinović-Ješić, M. S. Kostić, D. Gazdić, V. M. Leovac**

*Univerzitet u Novom Sadu Prirodno-matematički fakultet, Trg Dositeja Obradovića 3, 21000 Novi Sad, Srbija*

e-mail: mirjana.lalovic@dh.uns.ac.rs

Reakcijom toplih acetonitrilnih rastvora cink-acetata i liganda, 2,3-dihidroksibenzaldehid-aminogvanidina hidrogenhlorida, u molskom odnosu 1:1, dobijeni su prizmatični kristali kompleksa formule  $[Zn_2L(CH_3COO)_2]_2 \cdot 2MeCN$ , (L = dianjon helatnog liganda). U ovom tetranuklearnom centrosimetričnom kompleksu helatni ligand za koordinaciju koristi četiri donorna atoma - dva atoma azota i dva atoma kiseonika, uz to da su atomi kiseonika mostovno koordinovani za dva jona cinka. Osim toga, u ovoj strukturi nađena je i mostovna egzobidentatna koordinacija dva acetato liganda (slika 1).

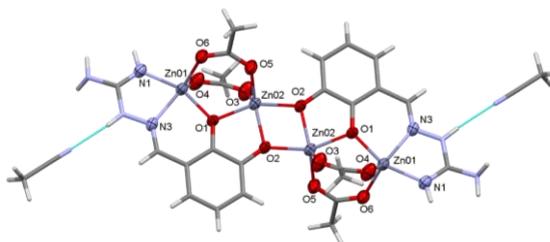
Iako je opisani način koordinacije helatnog ligandada i koliganada kompleksan, treba reći da nije neobičan, već karakterističan za 2,3-dihidroksibenzaldehidni fragment u prisustvu acetata kao mostovnih koliganada i nađen je u strukturi tetranuklearnog kompleksa cinka opisanoj u radu [1].

Asimetrična jedinica sadrži dianjon helatnog liganda, koji je tridentatno ONN koordinovan za jedan jon cinka (Zn01), a monodentatno (preko atoma kiseonika deprotonovane hidroksilne grupe iz položaja 3) za drugi jon cinka (Zn02), dva acetatna jona koja mostovno povezuju dve susedne jedinice, kao i jedan molekul rastvarača. Tridentatna ONN koordinacija helatnog liganda je ostvarena preko atoma kiseonika deprotonovane hidroksilne grupe iz položaja 2, azometinskog i atoma azota imino-grupe aminogvanidinskog ostatka. Osim preko acetatnih mostova susedne jedinice povezane su mostovnom koordinacijom atoma kiseonika O1 i O2. Rastojanje Zn01–Zn02 iznosi 3,3008(4) Å, a Zn02–Zn02<sup>i</sup> 3,1926(4) Å.

*Kristalografski podaci:* triklinični kristalni sistem,  $P\bar{1}$ ,  $a = 8,8277(3)$  Å,  $b = 9,9935(3)$  Å,  $c = 11,4516(4)$  Å,

$\alpha = 87,646(3)^\circ$ ,  $\beta = 70,495(3)^\circ$ ,  $\gamma = 78,267(3)^\circ$ ,  $V = 931,99(6)$  Å<sup>3</sup>,  $Z = 2$ . Utačnjavanje sa  $F^2$  (252 parametara) dalo je  $R_1 = 0,0264$ ,  $wR_2 = 0,0629$ ,  $S = 1,096$ , za sve podatke, i  $R_1 = 0,0227$  za 3426 refleksija sa  $I \geq 2\sigma(I)$ .

[1] M. M. Belmonte, E. C. Escudero-Adán, E. Martina, A. W. Kleij, *Dalton Trans.* **41** (2012) 5193–5200.



Slika 1. Molekulska struktura dobijenog kompleksa

## SYNTHESIS AND STRUCTURE OF TETRANUCLEAR ZINC COMPLEX WITH SCHIFF BASE OF AMINO GUANIDINE

**M. M. Radanović, M. V. Rodić, Lj. S. Vojinović-Ješić, M. S. Kostić, D. Gazdić, V. M. Leovac**

*University of Novi Sad Faculty of Sciences, Trg Trg Dositeja Obradovića 3, 21000 Novi Sad, Serbia*

e-mail: mirjana.lalovic@dh.uns.ac.rs

The reaction of warm solutions of zinc-acetate and the ligand, 2,3-dihydroxybenzaldehyde-aminoguanidine, in acetonitrile in molar ratio 1:1, yielded in the formation of prismatic single crystals of the complex  $[Zn_2L(CH_3COO)_2] \cdot 2MeCN$ , (L = dianion of the chelating ligand). In this tetranuclear centrosymmetric complex, the chelating ligands uses four donors – two nitrogen and two bridging oxygen atoms, that connect two zinc ions. Besides, in this structure bridging exobidentate coordination of two acetato ligands is found.

Even though this coordination mode could be described as complex, it is not unusual, but characteristic for 2,3-dihydroxybenzaldehyde residue. The structure of a similar tetranuclear zinc complex with a Schiff base of 2,3-dihydroxybenzaldehyde in the presence of acetate ions as coligands was reported earlier [1].

The asymmetric unit (Fig. 2) consists of the dianion of the chelating ligand, which is ONN coordinated to one zinc ion (Zn01), and O-coordinated to the other (Zn02), two acetate ions as bridging ligands that connect the subunits and one solvent molecule. Tridentate ONN coordination of the chelating ligand is achieved *via* the oxygen atom of the deprotonated hydroxy group in position 2, azomethine and nitrogen atom of the imino-group of the aminoguanidine fragment. Neighboring subunits are, besides the mentioned acetate bridges, connected by the bridging coordination of oxygen atoms O1 and O2.

*Crystallographic data:* triclinic crystal system,  $P\bar{1}$ ,  $a = 8.8277(3)$  Å,  $b = 9.9935(3)$  Å,  $c = 11.4516(4)$  Å,  $\alpha = 87.646(3)^\circ$ ,  $\beta = 70.495(3)^\circ$ ,  $\gamma = 78.267(3)^\circ$ ,  $V = 931.99(6)$  Å<sup>3</sup>,  $Z = 2$ .

Refinement based on  $F^2$  (252 parameters) gave  $R_1 = 0.0264$ ,  $wR_2 = 0.0629$ ,  $S = 1.096$ , for all data, and  $R_1 = 0.0227$  for 3426 reflections with  $I \geq 2\sigma(I)$ .

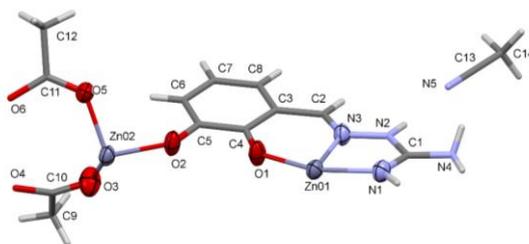


Figure 2. The asymmetric unit of the complex

The authors acknowledge financial support of the Ministry of Education, Science and Technological Development of the Republic of Serbia (Grant No. 451-03-9/2021-14/ 200125).

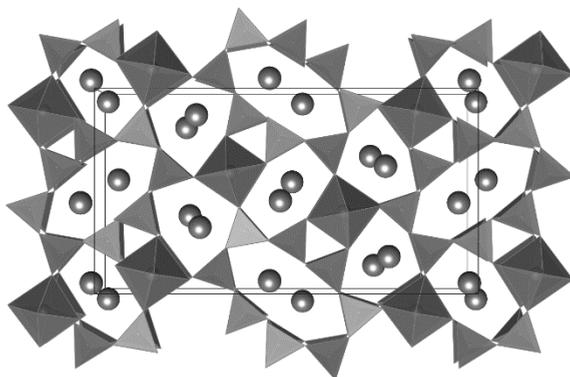
[1] M. M. Belmonte, E. C. Escudero-Adán, E. Martina, A. W. Kleij, *Dalton Trans.* **41** (2012) 5193–5200.

KRISTALNE STRUKTURE  $\text{Cs}_2\text{HoSi}_4\text{O}_{10}\text{F}$  I  $\text{Cs}_2\text{TmSi}_4\text{O}_{10}\text{F}$ P. Dabić<sup>a</sup>, S. Kovač<sup>a</sup>, A. Kremenović<sup>a</sup><sup>a</sup> Univerzitet u Beogradu, Rudarsko-geološki fakultet, Dušina 7, 11000 Beograd, Srbija  
e-mail: predrag.dabic@rgf.bg.ac.rs

Tokom istraživanja fokusiranog na sintezu novih kalijumskih silikata elemenata retkih zemalja dobijena su dva jedinjenja do tada nepoznatog hemijskog sastava -  $\text{Cs}_2\text{HoSi}_4\text{O}_{10}\text{F}$  i  $\text{Cs}_2\text{TmSi}_4\text{O}_{10}\text{F}$ , u obliku monokristala.

Jedinjenja su sintetisana metodom rasta kristala iz visokotemperaturnog rastvora ( $T_{\text{max}} = 1373$  K) koristeći  $\text{REE}_2\text{O}_3$  ( $\text{REE} = \text{Ho}, \text{Tm}$ ),  $\text{SiO}_2$  i  $\text{CsF}$  kao polazne supstance. Kristalne strukture oba jedinjenja rešene su iz difrakcionih podataka prikupljenih na odabranim monokristalima. Dobijena jedinjenja su međusobno izostrukturna i kristališu u rombičnoj prostornoj grupi  $Pnma$  sa sledećim parametrima jediničnih ćelija:  $a = 22,3809$  (7),  $b = 8,8686$  (3),  $c = 11,9827$  (4) Å,  $V = 2378,41$  (14) Å<sup>3</sup>,  $Z = 8$  (za jedinjenje  $\text{Cs}_2\text{HoSi}_4\text{O}_{10}\text{F}$ ),  $a = 22,3447$  (5),  $b = 8,8131$  (2),  $c = 11,9594$  (3) Å,  $V = 2355,12$  (10) Å<sup>3</sup>,  $Z = 8$  (za jedinjenje  $\text{Cs}_2\text{TmSi}_4\text{O}_{10}\text{F}$ ). Ispitivana jedinjenja su izostrukturna sa  $\text{Cs}_2\text{YSi}_4\text{O}_{10}\text{F}$  [1] i  $\text{Cs}_2\text{ErSi}_4\text{O}_{10}\text{F}$  [2].

Kristalnu strukturu ovih jedinjenja čine višestruki lanci  $\text{SiO}_4$ -tetraedara koji su povezani beskonačnim jednodimenzionalnim lancima  $\text{REEO}_4\text{F}_2$ -oktaedara. U tunelima koji nastaju kondenzacijom tetraedarske mreže i oktaedarskih lanaca smešteni su katjoni cezijuma.  $\text{SiO}_4$ -tetraedri su međusobno povezani preko zajedničkih rogljeva i izgrađuju kolone, odnosno cevastu strukturu.  $\text{REEO}_4\text{F}_2$ -oktaedri međusobno su povezani preko zajedničkih anjona fluora, koji se nalaze u apikalnim rogljevima.



Slika 1. Projekcija strukture  $\text{Cs}_2\text{REESi}_4\text{O}_{10}\text{F}$  paralelna sa pravcem [010] predstavljena poliedrima.

[1] M.C. Schäfer, T. Schleid, *Z. Naturforsch. B.*, **64** (2009) 1329–1338.

[2] P. Dabić, V. Kahlenberg, D. Schmidmair, A. Kremenović, P. Vulić, *Z. Krist.-Cryst. Mater.*, **231** (2016) 195–207.

CRYSTAL STRUCTURES OF Cs<sub>2</sub>HoSi<sub>4</sub>O<sub>10</sub>F AND Cs<sub>2</sub>TmSi<sub>4</sub>O<sub>10</sub>FP. Dabić<sup>a</sup>, S. Kovač<sup>a</sup>, A. Kremenović<sup>a</sup><sup>a</sup> University of Belgrade, Faculty of Mining and Geology, Đušina 7, 11000 Belgrade, Serbia  
e-mail: predrag.dabic@rgf.bg.ac.rs

During investigation focused on the synthesis of new potassium rare-earth elements silicates two compounds with a previously unknown chemical composition - Cs<sub>2</sub>HoSi<sub>4</sub>O<sub>10</sub>F and Cs<sub>2</sub>TmSi<sub>4</sub>O<sub>10</sub>F were obtained in form of single crystals.

The compounds were synthesized by the method of crystal growth from a high-temperature solution ( $T_{\max} = 1373$  K) using REE<sub>2</sub>O<sub>3</sub> (REE = Ho, Tm), SiO<sub>2</sub> and CsF as starting materials. The crystal structures of both compounds were determined by single-crystal X-ray diffraction analysis. They represent mutually isostructural compounds which crystallize in the orthorhombic space group *Pnma* with following unit cell parameters:  $a = 22.3809$  (7),  $b = 8.8686$  (3),  $c = 11.9827$  (4) Å,  $V = 2378.41$  (14) Å<sup>3</sup>,  $Z = 8$  (for Cs<sub>2</sub>HoSi<sub>4</sub>O<sub>10</sub>F compound),  $a = 22.3447$  (5),  $b = 8.8131$  (2),  $c = 11.9594$  (3) Å,  $V = 2355.12$  (10) Å<sup>3</sup>,  $Z = 8$  (for Cs<sub>2</sub>TmSi<sub>4</sub>O<sub>10</sub>F compound). The investigated compounds are isotypic to Cs<sub>2</sub>YSi<sub>4</sub>O<sub>10</sub>F [1] and Cs<sub>2</sub>ErSi<sub>4</sub>O<sub>10</sub>F [2].

The crystal structure of these compounds consists of multiple chains of SiO<sub>4</sub>-tetrahedra connected by infinite one-dimensional chains of REEO<sub>4</sub>F<sub>2</sub>-octahedra. Cesium cations are located in tunnels formed by condensation of the tetrahedral network and octahedral chains. SiO<sub>4</sub>-tetrahedra are interconnected through common vertices and form columns, i.e. a tubular structure. REEO<sub>4</sub>F<sub>2</sub>-octahedra are interconnected *via* common fluorine apical anions.

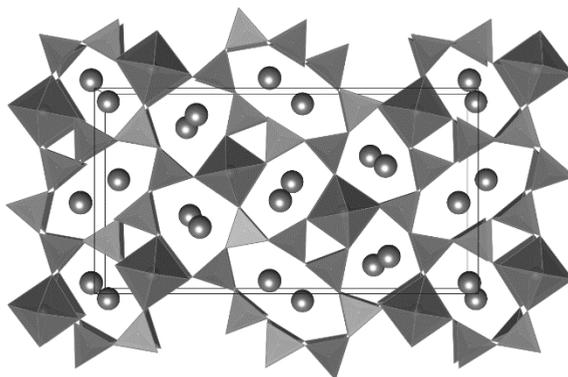


Figure 1. Projection of the structure of Cs<sub>2</sub>REESi<sub>4</sub>O<sub>10</sub>F parallel to the direction [010] represented by polyhedra.

[1] M.C. Schäfer, T. Schleid, *Z. Naturforsch. B.*, **64** (2009) 1329–1338.

[2] P. Dabić, V. Kahlenberg, D. Schmidmair, A. Kremenović, P. Vulić, *Z. Krist.-Cryst. Mater.*, **231** (2016) 195–207.



**IN MEMORIAM**



## др Предраг Вулић, доцент (1973 - 2020)



Другог априла 2020. године преминуо је наш драги колега Предраг Вулић. Др Предраг Вулић, дипл. инж. геологије, рођен је 1973. године у Земуну. Дипломирао је 1999. године, а магистрирао 2005. године, на Катедри за кристалографију, Рударско-геолошког факултета, Универзитета у Београду. Докторску дисертацију под насловом „Структурна испитивања једињења са нефелинским типом структуре” одбранио је на Институту за минералогiju и петрографију Универзитета у Инсбруку у Аустрији 2010. године. У звање научног сарадника на Рударско-геолошком факултету, Универзитета у Београду изабран је 2012. године, а у звање вишег научног сарадника 2017. године. На истом факултету је 2016. године изабран у звање доцента на Катедри за минералогiju. Главне области научног интересовања и истраживања др Предрага Вулића су биле: синтеза монокристала и поликристалних материјала и испитивање структурних, микроструктурних и кристалохемијских особина минерала и других материјала. Објављени резултати др Предрага Вулића указују да је био вансеријски научни истраживач. За собом је, у својој краткој научној каријери, оставио 61 научни рад само из категорије М20 (са 552 цитата и индексом цитираности  $h$  једнаким 14).

Наш колега, др Предраг Вулић, није био само изузетан истраживач и квалитетан наставник, он је био веома активан члан и секретар Српског кристалографског друштва. Добитник је годишње награде „Др Дубравко Родић“ Српског кристалографског друштва за допринос младих кристалографа развоју кристалографије у Србији за 2012. годину. Огромну енергију уложио је у развој Лабораторије за кристалографију Рударско-геолошког факултета.

Др Предраг Вулић био је креативан, способан, elokвентан, амбициозан, вредан и духовит. Увек је био спреман да помогне колегама и студентима. Имао је изразиту способност преношења знања. Био је пун планова за нова научна истраживања.

Чланови Катедре и Лабораторије за кристалографију  
Рударско-геолошког факултета Универзитета у Београду



## **Dr. Predrag Vulić, assistant professor (1973 - 2020)**



On April 2nd, 2020, our dear colleague Predrag Vulić passed away. Dr. Predrag Vulić, B.Sc. eng. geology, was born in 1973 in Zemun. He graduated in 1999, and received his master's degree in 2005, at the Department of Crystallography, Faculty of Mining and Geology, University of Belgrade. He defended his doctoral dissertation entitled "Structural studies of compounds with nepheline type structure" at the Institute of Mineralogy and Petrography of the University of Innsbruck in Austria in 2010. He was elected a research associate at the Faculty of Mining and Geology, University of Belgrade in 2012, and a senior research associate in 2017. At the same faculty, in 2016, he was elected assistant professor at the Department of Mineralogy. The main areas of scientific interest and research of Dr. Predrag Vulić were: synthesis of single crystals and polycrystalline materials and examination of structural, microstructural and crystallochemical properties of minerals and other materials. The published results of Dr. Predrag Vulić show that he was an extraordinary scientific researcher. In his short scientific career, he left behind 61 scientific papers only from the M20 category (with 552 citations and a citation index h equal to 14).

Our colleague, Dr. Predrag Vulić, was not only an exceptional researcher and a quality teacher, he was a very active member and secretary of the Serbian Crystallographic Society. He was the winner of the annual award "Dr Dubravko Rodić" of the Serbian Crystallographic Society in 2012 for the contribution of young crystallographers to the development of crystallography in Serbia. He invested enormous energy in the development of the Laboratory for Crystallography of the Faculty of Mining and Geology.

Dr. Predrag Vulić was creative, capable, eloquent, ambitious, hardworking and witty. He was always ready to help colleagues and students. He had a distinct ability to transfer knowledge. He was full of plans for new scientific research.

Members of the Department and the Laboratory of Crystallography  
Faculty of Mining and Geology, University of Belgrade

