

СРПСКО КРИСТАЛОГРАФСКО ДРУШТВО

SERBIAN CRYSTALLOGRAPHIC SOCIETY

**XXVIII КОНФЕРЕНЦИЈА
СРПСКОГ КРИСТАЛОГРАФСКОГ ДРУШТВА**

Изводи радова

**28th CONFERENCE OF THE
SERBIAN CRYSTALLOGRAPHIC SOCIETY**

Abstracts

Чачак – Шаќак
2023.

**XXVIII КОНФЕРЕНЦИЈА СРПСКОГ
КРИСТАЛОГРАФСКОГ ДРУШТВА**

Изводи радова

Издавач:

Српско кристалографско друштво,
Ђушина 7, 11000 Београд,
тел./факс: 2635-217

За издавача:

Тамара Тодоровић

Уредник:

Бождар Чобелјић

Технички уредник:

Предраг Ристић

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

© Српско кристалографско друштво

ISBN 978-86-912959-6-7
ISSN 0354-5741

Штампа:
НАУЧНА КМД д.о.о.
Гочка 9/8
11000 Београд

Тираж: 50

Београд
2023

**28th CONFERENCE OF THE SERBIAN
CRYSTALLOGRAPHIC SOCIETY**

Abstracts

Publisher:

Serbian Crystallographic Society,
Đušina 7, 11000 Belgrade, Serbia,
phone/fax: 381-11-2635-217

For the publisher:

Tamara Todorović

Editor:

Božidar Čobeljić

Technical editor:

Predrag Ristić

This publication is financially supported by
The Ministry of Science, Technological
Development and Innovation of the Republic of
Serbia

© Serbian Crystallographic Society

ISBN 978-86-912959-6-7
ISSN 0354-5741

Printing:
NAUČNA KMD d.o.o.
Gočka 9/8
11000 Belgrade

Copies: 50

Belgrade
2023



СРПСКО
КРИСТАЛОГРАФСКО
ДРУШТВО



SERBIAN
CRYSTALLOGRAPHIC
SOCIETY

XXVIII КОНФЕРЕНЦИЈА СРПСКОГ КРИСТАЛОГРАФСКОГ ДРУШТВА

28th CONFERENCE OF THE SERBIAN CRYSTALLOGRAPHIC SOCIETY

Научни одбор:

др Љиљана Карановић, РГФ, Београд
др Катарина Анђелковић, ХФ, Београд
др Оливера Клисурић, ПМФ, Нови Сад
др Јелена Роган, ТМФ, Београд
др Горан Богдановић, „ВИНЧА”, Београд
др Мирјана Милић, „ВИНЧА”, Београд
др Александар Кременовић, РГФ, Београд
др Андријана Жекић, ФФ, Београд
др Марко Родић, ПМФ, Нови Сад
др Душан Вељковић, ХФ, Београд
др Верица Јевтић, ПМФ, Крагујевац
др Александра Дапчевић, ТМФ, Београд
др Сабина Ковач, РГФ, Београд
др Божидар Чобелић, ХФ, Београд
др Маја Ђукић, ПМФ, Крагујевац
др Душанка Радановић, ИХТМ, Београд
др Предраг Дабић, РГФ, Београд
др Тамара Тодоровић, ХФ, Београд
др Наташа Јовић Орсини, „ВИНЧА”,
Београд

Организациони одбор:

Тамара Тодоровић, ХФ, Београд
Божидар Чобелић, ХФ, Београд
Катарина Анђелковић, ХФ, Београд
Предраг Ристић, ХФ, Београд
Мима Јевтовић, ИЦХФ, Београд
Невена Стевановић, ХФ, Београд
Драгана Митић, ИЦХФ, Београд
Јована Арашков, ХФ, Београд
Сања Коканов, ХФ, Београд
Андреј Миливојац, ИЦХФ, Београд

Scientific Committee:

Dr Ljiljana Karanović, RGF, Belgrade
Dr Katarina Anđelković, HF, Belgrade
Dr Olivera Klisurić, PMF, Novi Sad
Dr Jelena Rogan, TMF, Belgrade
Dr Goran Bogdanović, „VINČA”, Belgrade
Dr Mirjana Milić, „VINČA”, Belgrade
Dr Aleksandar Kremenović, RGF, Belgrade
Dr Andrijana Žekić, FF, Belgrade
Dr Marko Rodić, PMF, Novi Sad
Dr Dušan Veljković, HF, Belgrade
Dr Verica Jevtić, PMF, Kragujevac
Dr Aleksandra Dapčević, TMF, Belgrade
Dr Sabina Kovač, RGF, Belgrade
Dr Božidar Čobeljić, HF, Belgrade
Dr Maja Đukić, PMF, Kragujevac
Dr Dušanka Radanović, IHTM, Belgrade
Dr Predrag Dabić, RGF, Belgrade
Dr Tamara Todorović, HF, Belgrade
Dr Nataša Jović Orsini, „VINČA”, Belgrade

Organizing Committee:

Tamara Todorović, HF, Belgrade
Božidar Čobeljić, HF, Belgrade
Katarina Anđelković, HF, Belgrade
Predrag Ristić, HF, Belgrade
Mima Jevtović, ICHF, Belgrade
Nevena Stevanović, HF, Belgrade
Dragana Mitić, ICHF, Belgrade
Jovana Araškov, HF, Belgrade
Sanja Kokanov, HF, Belgrade
Andrej Milivojac, ICHF, Belgrade

ОРГАНИЗАТОРИ / ORGANIZERS



СРПСКО КРИСТАЛОГРАФСКО ДРУШТВО
SERBIAN CRYSTALLOGRAPHIC SOCIETY



УНИВЕРЗИТЕТ У БЕОГРАДУ – ХЕМИЈСКИ
ФАКУЛТЕТ
UNIVERSITY OF BELGRADE – FACULTY OF
CHEMISTRY

СПОНЗОР / SPONSOR



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

САДРЖАЈ – CONTENTS

ПЛЕНАРНА ПРЕДАВАЊА – PLENARY LECTURES

H. Borrmann

MICRO-MACHINING AS A NEW TOOL TO PREPARE SINGLE CRYSTALS.. 2

Z. Jagličić, A. Panja

SLOW RELAXATION OF MAGNETIZATION IN DYSPROSIUM SMMs..... 3

I. Đerd

VISOKOENTROPIJSKI OKSIDI S PRIMJENOM U POHRANI ENERGIJE I
KATALIZI..... 4

I. Đerd

HIGH-ENTROPY OXIDES FOR ENERGY STORAGE AND CATALYSIS..... 5

М. Златар

ХЕМИЈСКА ВЕЗА У КОМПЛЕКСИМА ПРЕЛАЗНИХ МЕТАЛА –
СИНЕРГИЈА ЕКСПЕРИМЕНТА И ТЕОРИЈЕ 6

М. Zlatar

CHEMICAL BONDING IN TRANSITION METAL COMPLEXES – SYNERGY
BETWEEN EXPERIMENT AND THEORY 7

М. М. Радановић

КООРДИНАЦИОНА ХЕМИЈА ШИФОВИХ БАЗА АМИНОГВАНИДИНА –
СИНТЕЗА, КОМПАРАТИВНА СТРУКТУРНА АНАЛИЗА И
ПОТЕНЦИЈАЛНА ПРИМЕНА..... 8

М. М. Radanović

COORDINATION CHEMISTRY OF AMINOGUANIDINE SCHIFF BASES –
SYNTHESIS, COMPARATIVE STRUCTURAL ANALYSIS, AND
POTENTIAL APPLICATION..... 9

УСМЕНА САОПШТЕЊА – ORAL PRESENTATIONS

<u>М. Г. Богдановић, Н. Д. Радновић, М. В. Родић</u> СИНТЕЗА И КРИСТАЛНА СТРУКТУРА ДИПЕРИОДИЧНОГ КООРДИНАЦИОНОГ ПОЛИМЕРА $Cu(II)$ СА ШИФОВОМ БАЗОМ БИФЕНИЛДИКАРБОКСИЛНЕ КИСЕЛИНЕ	12
<u>M. G. Bogdanović, N. D. Radnović, M. V. Rodić</u> SYNTHESIS AND CRYSTAL STRUCTURE OF DIPERIODIC $Cu(II)$ COORDINATION POLYMER WITH A BIPHENYLDICARBOXYLIC ACID SCHIFF BASE LIGAND.....	13
<u>Д. Ж. Вељковић, М. Малинић, И. С. Вељковић, В. Медаковић</u> ЈАКЕ ВОДОНИЧНЕ ВЕЗЕ СА УГЉЕНИКОМ КАО АКЦЕПТОРОМ АТОМА ВОДНИКА	14
<u>D. Ž. Veljković, M. Malinić, I. S. Veljković, V. Medaković</u> STRONG HYDROGEN BONDS INVOLVING CARBON ATOM AS HYDROGEN ATOM ACCEPTOR.....	15
<u>М. С. Костић, В. М. Леовац, М. Г. Богдановић, М. В. Родић, Љ. С. Војиновић Јешић, М. М. Радановић</u> СИНТЕЗА И КАРАКТЕРИЗАЦИЈА ШИФОВЕ БАЗЕ 2,6-ДИАЦЕТИЛПИРИДИН-АДАМАНТАН-1-КАРБОХИДРАЗИДА И ЊЕНОГ КОМПЛЕКСА СА ЦИНКОМ(II).....	16
<u>M. S. Kostić, V. M. Leovac, M. G. Bogdanović, M. V. Rodić, Lj. S. Vojinović Ješić, M. M. Radanović</u> SYNTHESIS AND CHARACTERIZATION OF THE SCHIFF BASE 2,6-DIACETYLPIRIDINE-ADAMANTANE-1-CARBOHYDRAZIDE AND ITS ZINC(II) COMPLEX.....	17
<u>Ј. Лађаревић, Л. Радвановић, А. Машуловић, Н. Тришовић, А. Лазић, Ј. Роган, Д. Мијин</u> ТАУТОМЕРИЈА АЗО ПИРИДОНСКИХ БОЈА: КРИСТАЛНА СТРУКТУРА И СОЛВАТОХРОМНА СВОЈСТВА	18
<u>J. Lađarević, L. Radovanović, A. Mašulović, N. Trišović, A. Lazić, J. Rogan, D. Mijin</u> TAUTOMERISM OF AZO PYRIDONE DYES: CRYSTAL STRUCTURE AND SOLVATOCHROMIC ANALYSIS.....	19
<u>А. Миливојац, Т. Бојовић, А. Вишњевац, Т. Тодоровић, Н. Филиповић</u> ДИНУКЛЕРАНИ КОМПЛЕКС $Cu(II)$ СА ДИПИРИДИЛ ХИДРАЗОНИЛ-ТИАЗОЛОМ	20
<u>A. Milivojac, T. Bojović, A. Višnjevac, T. Todorović, N. Filipović</u> DINUCLEAR $Cu(II)$ COMPLEX WITH DIPYRIDYL HYDRAZONYL-THIAZOLE.....	21

<u>М. Милојевић, А. Жекић, П. Дабић, Б. Вучетић, Б. Максимовић</u> УТИЦАЈ ОБРТНОГ МАГНЕТНОГ ПОЉА НА ДЕРАЦЕМИЗАЦИЈУ КРИСТАЛА НАТРИЈУМ-ХЛОРАТА.....	22
<u>М. Milojević, A. Žekić, P. Dabić, B. Vučetić, B. Maksimović</u> INFLUENCE OF A ROTATING MAGNETIC FIELD ON THE DERACEMIZATION OF SODIUM CHLORATE CRYSTALS.....	23
<u>Н. Милојковић, Б. Симовић, М. Жунић, А. Дапчевић</u> УТИЦАЈ ДОПАНАТА НА СТРУКТУРУ АНАТАСА.....	24
<u>N. Milojković, B. Simović, M. Žunić, A. Dapčević</u> EFFECT OF DOPANTS ON ANATASE STRUCTURE	25
<u>Б. В. Пантовић, Т. П. Андрејевић, Д. П. Ашанин, Н. Љ. Стевановић, В. Р. Марковић, Б. Ђ. Глишић</u> КРИСТАЛНА СТРУКТУРА СРЕБРО(I) КОМПЛЕКСА СА N-МЕТИЛФЕНОТИАЗИНОМ.....	26
<u>B. V. Pantović, T. P. Andrejević, D. P. Ašanin, N. Lj. Stevanović, V. R. Marković, B. Đ. Glišić</u> CRYSTAL STRUCTURE OF A SILVER(I) COMPLEX WITH N-METHYLPHENOTHIAZINE	27
<u>Н. Д. Радновић, М. Г. Богдановић, С. Хауес, М. В. Родић</u> СИНТЕЗА И СТРУКТУРА КОМПЛЕКСА Co(II) СА БИС(4-КАРБОКСИ-БЕНЗИЛ)АМОНИЈУМ-ХЛОРИДОМ И ПИРАЗИНОМ.....	28
<u>N. D. Radnović, M. G. Bogdanović, C. Hawes, M. V. Rodić</u> SYNTHESIS AND STRUCTURE OF Co(II) COMPLEX WITH BIS(4-CARBOXY-BENZYL)AMMONIUM CHLORIDE AND PYRAZINE	29
<u>М. В. Родић, В. Раичевић, В. М. Леовац, Н. Д. Банић</u> КРИСТАЛНА СТРУКТУРА Z-СЕМИКАРБАЗОНА МЕТИЛ ПИРУВАТА	30
<u>M. V. Rodić, V. Raičević, V. M. Leovac, N. D. Banić</u> CRYSTAL STRUCTURE OF Z-METHYL PYRUVATE SEMICARBAZONE	31
<u>И. П. Филиповић, М. Д. Радовановић, М. Б. Ђукић, О. Р. Клисурић, Д. Љ. Стојковић, М. С. Ристић, З. Д. Матовић</u> СИНТЕЗА И КРИСТАЛНА СТРУКТУРА [Rh ₂ (CH ₃ COO) ₄ (N-BuIm)] КОМПЛЕКСА	32
<u>I. P. Filipović, M. D. Radovanović, M. B. Đukić, O. R. Klisurić, D. Lj. Stojković, M. S. Ristić, Z. D. Matović</u> SYNTHESIS AND CRYSTAL STRUCTURE OF [Rh ₂ (CH ₃ COO) ₄ (N-BuIm)] COMPLEX	33

<u>Б. Чобелић, А. Певец, М. Златар, М. Савић, М. Јевтовић</u> СИНТЕЗА И КАРАКТЕРИЗАЦИЈА АЗИДО КОМПЛЕКСА Zn(II) СА КОНДЕНЗАЦИОНИМ ПРОИЗВОДОМ 2-АЦЕТИЛТИАЗОЛА И ТИОСЕМИКАРБАЗИДА	34
<u>В. Čobeljić, А. Pevец, М. Zlatar, М. Savić, М. Jevtović</u> SYNTHESIS AND CHARACTERIZATION OF AZIDO Zn(II) COMPLEX WITH THE CONDENSATION PRODUCT OF 2-ACETYLTHIAZOLE AND THIOSEMICARBAZIDE.....	35
<u>М. Šuljagić, I. Petronijević, М. Mirković, А. Kremenović, А. Džunuzović, V. B. Pavlović, А. Kalezić-Glišović, Lj. Anđelković</u> УТИЦАЈ ФАЗНОГ САСТАВА И TEMPERATURE СИНТЕРОВАЊА НА ФИЗИЧКА СВОЈСТВА BaTiO ₃ /Ni _x Zn _{1-x} Fe ₂ O ₄ (x = 0; 0,5; 1) КОМПОЗИТА СИНТЕТИСАНИХ МЕТОДОМ ТЕРМАЛНЕ ДЕКОМПОЗИЦИЈЕ	36
<u>М. Šuljagić, I. Petronijević, М. Mirković, А. Kremenović, А. Džunuzović, V. B. Pavlović, А. Kalezić-Glišović, L. Anđelković</u> BaTiO ₃ /Ni _x Zn _{1-x} Fe ₂ O ₄ (x = 0, 0.5, 1) COMPOSITES SYNTHESIZED BY THERMAL DECOMPOSITION: THE INFLUENCE OF PHASE COMPOSITION AND SINTERING TEMPERATURE ON THEIR PHYSICAL PROPERTIES	37

ПОСТЕРСКА САОПШТЕЊА – POSTER PRESENTATIONS

<u>К. Анђелковић, А. Певец, Д. Митић, М. Јевтовић, М. Савић, Н. Стевановић</u> СИНТЕЗА И КАРАКТЕРИЗАЦИЈА АЗИДО КОМПЛЕКСА Zn(II) СА КОНДЕНЗАЦИОНИМ ПРОИЗВОДОМ 2-АЦЕТИЛПИРИДИНА И ЖИРАРОВОГ П РЕАГЕНСА.....	40
<u>К. Anđelković, А. Pevец, D. Mitić, М. Jevtović, М. Savić, N. Stevanović</u> SYNTHESIS AND CHARACTERIZATION OF AZIDO Zn(II) COMPLEX WITH THE CONDENSATION PRODUCT OF 2-ACETYLPIRIDINE AND GIRARD'S P REAGENT	41
<u>Ј. Арашков, П. Ристић, А. Вишњевац, Ј. М. López-de-Luzuriaga, Т. Тодоровић, Н. Филиповић</u> МОНОНУКЛЕАРНИ И ПЕНТАНУКЛЕАРНИ Zn(II) КОМПЛЕКСИ СА ХИДРАЗОНИЛ-ТИАЗОЛИМА: СТРУКТУРНА И ФОТОФИЗИЧКА СТУДИЈА.....	42
<u>Ј. Araškov, P. Ristić, А. Višnjevac, Ј. М. López-de-Luzuriaga, Т. Todorović, N. Filipović</u> MONONUCLEAR AND PENTANUCLEAR Zn(II) COMPLEXES WITH HYDRAZONYL-THIAZOLES: STRUCTURAL AND PHOTOPHYSICAL STUDY	43

<u>E. H. Avdović, D. Simijonović, Ž. B. Milanović, M. Antonijević, D. Milenković, Z. S. Marković</u> SINTEZA I KRISTALNA STRUKTURA (<i>E</i>)-2,3-DIHIDROKSI- <i>N'</i> -(1-(2-OKSO-2 <i>H</i> -HROMEN-3-IL)ETILIDEN)BENZOHIDRAZIDA	44
<u>E. H. Avdović, D. Simijonović, Ž. B. Milanović, M. Antonijević, D. Milenković, Z. S. Marković</u> SYNTHESIS AND CRYSTAL STRUCTURE OF (<i>E</i>)-2,3-DIHYDROXY- <i>N'</i> -(1-(2-OXO-2 <i>H</i> -CHROMEN-3-YL)ETHYLIDENE) BENZOHYDRAZIDE.....	45
<u>Г. А. Богдановић, С. Б. Новаковић, З. Ратковић, С. Љ. Матић, Ј. Мушкиња</u> МАЛЕ СТРУКТУРНЕ МОДИФИКАЦИЈЕ МОГУ ДОВЕСТИ ДО ПОТПУНО РАЗЛИЧИТИХ ИНТЕРМОЛЕКУЛСКИХ ИНТЕРАКЦИЈА: СЛУЧАЈ ФЕРОЦЕНИЛ <i>N</i> -АЦИЛ ПИРАЗОЛИНА	46
<u>G. A. Bogdanović, S. B. Novaković, Z. Ratković, S. Lj. Matić, J. Muškinja</u> SMALL STRUCTURAL MODIFICATIONS CAN RESULT IN COMPLETELY DIFFERENT INTERMOLECULAR INTERACTIONS: A CASE OF THE FERROCENYL <i>N</i> -ACYL PYRAZOLINES	47
<u>Д. С. Кретић, В. Б. Медаковић, И. С. Вељковић</u> ПАРАЛЕЛНО-СМАКНУТЕ ИНТЕРАКЦИЈЕ ИЗМЕЂУ S ₈ ПРСТЕНОВА У КРИСТАЛНИМ СТРУКТУРАМА: СВЕОБУХВАТНА ТЕОРИЈСКА СТУДИЈА.....	48
<u>D. S. Kretić, V. B. Medaković, I. S. Veljković</u> PARALLEL-DISPLACED INTERACTIONS BETWEEN S ₈ RINGS IN CRYSTAL STRUCTURES: COMPREHENSIVE THEORETICAL STUDY	49
<u>М. Јевтовић, А. Певец, М. Шумар Ристовић, М. Савић, Д. Митић, Н. Стевановић</u> СИНТЕЗА И КАРАКТЕРИЗАЦИЈА КОМПЛЕКСА Mn(II) СА КОНДЕНЗАЦИОНИМ ПРОИЗВОДОМ 2-АЦЕТИЛТИАЗОЛА И ТИОСЕМИКАРБАЗИДА	50
<u>M. Jevtović, A. Pevec, M. Šumar Ristović, M. Savić, D. Mitić, N. Stevanović</u> SYNTHESIS AND CHARACTERIZATION OF Mn(II) COMPLEX WITH THE CONDENSATION PRODUCT OF THIOSEMICARBAZIDE AND 2-ACETYLTIAZOLE.....	51
<u>А. Радојковић, Д. Луковић Голић, Н. Јовић Орсини, Н. Николић</u> СТРУКТУРНА СВОЈСТВА КЕРАМИКЕ BiFeO ₃ ДОПИРАНЕ ЛАНТАНОМ И ЦИРКОНИЈУМОМ	52
<u>A. Radojković, D. Luković Golić, N. Jović Orsini, N. Nikolić</u> STRUCTURAL PROPERTIES OF BiFeO ₃ CERAMICS DOPED WITH LANTHANUM AND ZIRCONIUM.....	53

И. С. Вељковић, Д. С. Кретић, Д. Ж. Вељковић ТЕОРИЈСКО ПРОУЧАВАЊЕ Se...Se ИНТЕРАКЦИЈА У КРИСТАЛНИМ СТРУКТУРАМА	54
I. S. Veljković, D. S. Kretić, D. Ž. Veljković THEORETICAL STUDIES OF Se...Se INTERACTION IN CRYSTAL STRUCTURES	55
А Лазић, Л. Радовановић, Ј. Роган, Г. Јањић, И. Ђорђевић, Н. Тришовић УЛОГА СТРУКТУРНИХ МОТИВА У ИЗГРАДЊИ СУПРАМОЛЕКУЛСКЕ АРХИТЕКТУРЕ 3-(4- <i>TERC</i> -БУТИЛБЕНЗОИЛ)-1,3- -ДИАЗАСПИРО[4.5]ДЕКАН-2,4-ДИОНА	56
A Lazić, L. Radovanović, J. Rogan, G. Janjić, I. Đorđević, N. Trišović ROLE OF STRUCTURAL MOTIFS IN FORMATION OF THE SUPRAMOLECULAR ARCHITECTURE OF 3-(4- <i>TERT</i> -BUTYLBENZOYL)- -1,3-DIAZASPIRO[4.5]DECANE-2,4- DIONE.....	57
А. Машуловић, Л. Радовановић, Ј. Лађаревић, А. Лазић, Н. Тришовић, Ј. Роган, Д. Мијин СУПРАМОЛЕКУЛСКИ ПРИСТУП БОЈЕЊУ: КРИСТАЛНО ПАКОВАЊЕ АЗО ПИРИДОНСКЕ БОЈЕ.....	58
А. Mašulović, L. Radovanović, J. Lađarević, A. Lazić, N. Trišović, J. Rogan, D. Mijin SUPRAMOLECULAR APPROACH OF DYEING: CRYSTAL PACKING OF PYRIDONE AZO DYE	59
М. М. Милић, Н. Јовић Орсини СТРУКТУРНЕ, МАГНЕТНЕ И ХИПЕРТЕРМИЈСКЕ ОСОБИНЕ НАНОЧЕСТИЦА ОКСИДА ГВОЖЂА ОБЛОЖЕНИХ <i>PVP</i> СУРФАКТАНТОМ	60
М. М. Milić, N. Jović Orsini STRUCTURAL, MAGNETIC AND HYPERThERMIC PROPERTIES OF <i>PVP</i> COATED IRON OXIDE NANOPARTICLES.....	61
Б. В. Пантовић, Т. П. Андрејевић, Ј. Кљун, И. Турел, Д. П. Ашанин, М. И. Ђуран, Б. Ђ. Глишић СИНТЕЗА И КРИСТАЛНА СТРУКТУРА ЗЛАТО(III) КОМПЛЕКСА СА ДИМЕТИЛ 2,2'-БИПИРИДИН-4,5-ДИКАРБОКСИЛАТОМ	62
B. V. Pantović, T. P. Andrejević, J. Kljun, I. Turel, D. P. Ašanin, M. I. Djuran, B. Đ. Glišić SYNTHESIS AND CRYSTAL STRUCTURE OF A GOLD(III) COMPLEX WITH DIMETHYL 2,2'-BIPYRIDINE-4,5-DICARBOXYLATE	63

<u>Б. С. Петровић, В. В. Јевтић, О. Р. Клисурић, С. С. Јовичић Милић, Д. Љ. Стојковић</u> СИНТЕЗА И КРИСТАЛНА СТРУКТУРА КОМПЛЕКСА ПАЛАДИЈУМ(II) СА (S,S)-ПРОПИЛЕНДИАМИН-N,N'-ДИ-2-(3-МЕТИЛ) БУТАНСКОМ КИСЕЛИНОМ	64
<u>Đ. S. Petrović, V. V. Jevtić, O. R. Klisurić, S. Jovičić Milić, D. Lj. Stojković</u> SYNTHESIS AND CRYSTAL STRUCTURE OF PALLADIUM(II) COMPLEX WITH (S,S)-PROPYLENE-DIAMINE-N,N'-DI-2-(3-METHYL) BUTANOIC ACID	65
<u>L. Radovanović, D. P. Malenov, J. Rogan</u> KRISTALOGRAFSKO, SPEKTROSKOPSKO I RAČUNARSKO ISPITIVANJE KOMPLEKSA CINKA SA 2,2'-DIPYRIDILAMINOM I ANJONOM FURANDIKARBOKSILNE KISELINE	66
<u>L. Radovanović, D. P. Malenov, J. Rogan</u> CRYSTALLOGRAPHIC, SPECTROSCOPIC AND COMPUTATIONAL STUDY OF ZINC COMPLEX WITH 2,2'-DIPYRIDYLAMINE AND ANION OF FURANDICARBOXYLIC ACID	67
<u>В. Раичевић, М. Сакач, Н. Радуловић, М. Родић</u> КРИСТАЛНА СТРУКТУРА НОВОГ КОНЈУГАТА ФЕРОЦЕНА СА СТЕРОИДОМ ПРЕГНАНСКОГ СКЕЛЕТА	68
<u>V. Raičević, M. Sakač, N. Radulović, M. Rodić</u> CRYSTAL STRUCTURE OF A NEW FERROCENE CONJUGATE WITH A PREGNANE-TYPE STEROID	69
<u>А. А. Ракић, М. Минић, П. Станић, Г. В. Јањић</u> КРИСТАЛОГРАФСКА И КВАНТНО-ХЕМИЈСКА АНАЛИЗА КООРДИНАЦИЈЕ ДИМЕТИЛСУЛФОКСИДА ЗА ПАЛТИНУ	70
<u>A. A. Rakić, M. Minić, P. Stanić, G. V. Janić</u> CRYSTALLOGRAPHIC AND QUANTUM-CHEMICAL ANALYSIS OF DMSO COORDINATION TO PLATINUM	71
<u>Р. Р. Раонић, Д. Л. Секулић, Р. Yatskiv, Ј. Maixner, С. Р. Лукић-Петровић, Т. Б. Иветић</u> ФАЗНЕ И МОРФОЛОШКЕ ПРОМЕНЕ У ЛИТИЈУМ-НИОБИЈУМ-ТИТАН-ОКСИДНОМ СИСТЕМУ ИНДУКОВАНЕ МАЛИМ ДОДАЦИМА ЦИНК-ОКСИДА	72
<u>R. R. Raonić, D. L. Sekulić, R. Yatskiv, J. Maixner, S. R. Lukić-Petrović, T. B. Ivetić</u> PHASE AND MORPHOLOGY CHANGES IN THE LITHIUM-NIOBIUM-TITANIUM-OXIDE SYSTEM INDUCED BY SMALL ADDITIONS OF ZINC OXIDE	73

<u>П. Ристић, А. Вишњевац, Ј. Арашков, Н. Филиповић, Т. Тодоровић</u> Zn(II) КОМПЛЕКС СА 1,3-СЕЛЕНАЗОЛИЛ-ХИДРАЗОНОМ НА БАЗИ ПИРИДИНА	74
<u>P. Ristić, A. Višnjevac, J. Araškov, N. Filipović, T. Todorović</u> Zn(II) COMPLEX WITH PYRIDINE BASED 1,3-SELENAZOLYL-HYDRAZONE.....	75
<u>М. В. Родић, С. Б. Новаковић, Г. А. Богдановић, С. Белошевић, В. М. Леовац</u> СИНТЕЗА И КРИСТАЛНА СТРУКТУРА ТИОСЕМИКАРБАЗОНА ПИРОГРОЖЂАНЕ КИСЕЛИНЕ И ЊЕГОВЕ НАТРИЈУМОВЕ СОЛИ.....	76
<u>M. V. Rodić, S. B. Novaković, G. A. Bogdanović, S. Belošević, V. M. Leovac</u> SYNTHESIS AND CRYSTAL STRUCTURES OF PYRUVIC ACID THIOSEMICARBAZONE AND ITS SODIUM SALT	77
<u>М. Савић, А. Певец, Д. Радановић, М. Златар, М. Јевтовић</u> СИНТЕЗА И КАРАКТЕРИЗАЦИЈА КОМПЛЕКСА Fe(III) СА КОНДЕНЗАЦИОНИМ ПРОИЗВОДОМ 2-АЦЕТИЛТИАЗОЛА И ТИОСЕМИКАРБАЗИДА	78
<u>M. Savić, A. Pevec, D. Radanović, M. Zlatar, M. Jevtović</u> SYNTHESIS AND CHARACTERIZATION OF Fe(III) COMPLEX WITH THE CONDENSATION PRODUCT OF THIOSEMICARBAZIDE AND 2-ACETYLTHIAZOLE.....	79
<u>М.Р. Касаловић, Т. Рүффер, V.V. Јевтић, N.Đ. Пантелић, G.N. Калудеровић</u> МОЛЕКУЛАРНА И КРИСТАЛНА СТРУКТУРА 2-(4-МЕТИЛ-2- -ОКСОНИЛИН-1(2Н)-ИЛ)ЕТАНОАТО)ТРИФЕНИЛКАЛАЈ(IV) КОМПЛЕКСА	80
<u>M.P. Kasalović, T. Rüffer, V.V. Jevtić, N.Đ. Pantelić, G.N. Kaluderović</u> MOLECULAR AND CRYSTAL STRUCTURE OF THE 2-(4-METHYL-2- -OXOQUINOLINYL-1(2H)-YL)ETHANOATO)TRIPHENYL TIN(IV).....	81

ПЛЕНАРНА ПРЕДАВАЊА

PLENARY LECTURES

MICRO-MACHINING AS A NEW TOOL TO PREPARE SINGLE CRYSTALS

H. Borrmann

Max Planck Institut for Chemical Physics of Solids, Nöthnitzer Str. 40. 01187 Dresden, Germany

e-mail: horst.borrmann@cpfs.mpg.de

Outstanding properties of metallic delafossites, e.g. PtCoO_2 , PdCoO_2 , PdRhO_2 , are largely attributed to exceptional quality of single crystals which are typically obtained without special effort [1]. X-ray diffraction data of such crystals typically suffer from severe extinction effects. The pronounced anisotropic structure is well reflected in a plate-like shape of the crystals, associated severe absorption effects need to be taken into account with great care. Fortunately, we have been able to optimize crystal shape via micro-structuring using focused ion beam (FIB) techniques. Without any particularly sophisticated additional data treatment the structure refinement for PdRhO_2 revealed truly surprising results [2]. The anticipated “coloring” problem seems not to exist as among the four obvious possibilities to occupy the two metal sites the ‘correct’ one clearly gives the best fit to the experimental diffraction data.

The intermetallic compound AlCr_2 is quite ‘hidden’ in the binary phase diagram, single crystals could be isolated for the first time using our micro-machining approach. Crystal structure and chemical bonding analyses reveal largely different interactions as a consequence of the inverted coloring pattern with respect to prototypical MoSi_2 [3].

[1] V. Sunko, P. H. McGuinness, C. S. Chang, E. Zhakina, S. Khim, C. E. Dreyer, M. Konczykowski, H. Borrmann, P. J. W. Moll, M. König, D. A. Muller, A. P. Mackenzie, *Phys. Rev. X*, **10** (2020), 021018.

[2] P. Kushwaha, H. Borrmann, S. Khim, H. Rosner, P. J. W. Moll, D. A. Sokolov, V. Sunko, Y. Grin, A. P. Mackenzie, *Cryst. Growth Des.*, **17** (2017), 4144–4150.

[3] M. D. Milosavljević, U. Burkhardt, P. J. W. Moll, M. König, H. Borrmann, Y. Grin, *Chem. Eur J.*, **27** (2021), 14209–14216.

SLOW RELAXATION OF MAGNETIZATION IN DYSPROSIUM SMMs

Z. Jagličić^a, A. Panja^b

^a Institute of mathematics, physics and mechanics & Faculty of civil and geodetic engineering, University of Ljubljana, Slovenia; ^b Department of Chemistry, Panskura Banamali College, Panskura RS, WB 721152, India
e-mail: zvonko.jaglicic@imfm.si

Single-molecule magnets (SMMs) and their subsystem single-ion magnets (SIMs) are promising candidates for new applications in data storage and quantum computing. The most direct demonstration of slow relaxation of magnetization in SMMs or SIMs is through (a) frequency-dependent in-phase and out-of-phase ac susceptibility signals, and (b) the open hysteresis $M(H)$ below the blocking temperature.

We investigated several SMMs consisting of one, two, or four paramagnetic Dy(III) ions in a complex molecule with different ligands that play an important role in the observation or absence of slow magnetic relaxation.

For example, a new methyl derivative of o-vanillin, 2-hydroxy-3-methoxy-5-methylbenzaldehyde, allowed us to synthesise a compound $[\text{Dy}_4(\mu_3\text{-OH})_2(\text{L})_4(\text{HL})_2]\cdot 3\text{H}_2\text{O}$ (**1**) with four Dy ions [1]. Compound **1** shows a slow magnetic relaxation already at zero dc magnetic field (Fig.1), while after replacing two Dy ions with Zn ions, only field-assisted slow magnetic relaxation could be detected.

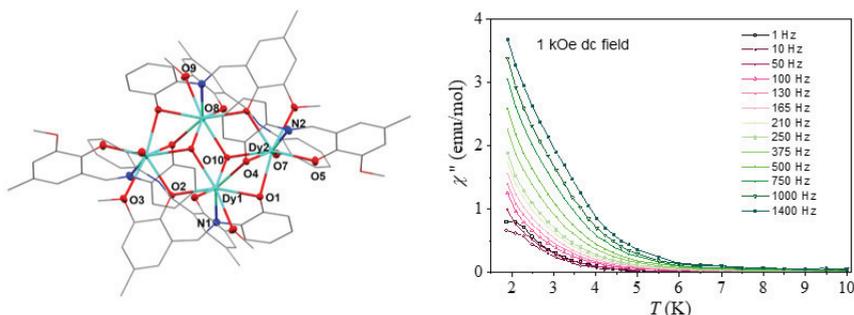


Figure 1 Crystal structure of **1** (left) and out-of-phase ac susceptibility of **1** (right).

Three new Zn_2Dy compounds have been synthesized [2] in order to study the influence of remote coordination at Zn ion and counter ions on magnetic anisotropy and on a weak dipolar antiferromagnetic interactions.

[1] A. Panja, Z. Jagličić, R. Herchel, P. Brandão, K. Pramanik and N. Ch. Jana, *New J. Chem.*, **46** (2022) 5627–5637.

[2] A. Panja, Z. Jagličić, R. Herchel, P. Brandão, K. Pramanik and N. Ch. Jana, *New J. Chem.*, **46** (2022) 13546–13557.

VISOKOENTROPIJSKI OKSIDI S PRIMJENOM U POHRANI ENERGIJE I KATALIZI

I. Đerdj

*Odjel za kemiju, Sveučilište Josipa Jurja Strossmayera u Osijeku, Cara Hadrijana 8/A,
31000 Osijek, Hrvatska
e-mail: igor.djerdj@kemija.unios.hr*

Nova klasa materijala s poboljšanim fizičkim i kemijskim svojstvima te visokim potencijalom primjene su višekomponentni oksidi visoke entropije (HEO). Sastoje se od pet ili više elementarnih komponenti u ekvimolarnom omjeru, ugrađenih unutar jednofaznog sustava. Termodinamički doprinos konfiguracijske entropije u sustavu od minimalno pet različitih komponenata dovoljan je da prevlada entalpiju stvaranja i smanji Gibbsovu slobodnu energiju. U ovom predavanju bit će predstavljena fotokatalitička razgradnja AZO boje i fotoelektrokemijska disocijacija vode za generiranje vodika primjenom pet različitih nanokristalnih oksida visoke entropije (HEO) na bazi rijetkih zemalja. Kationsko mjesto u rešetki fluorita sastoji se od pet ekvimolarnih elemenata odabranih iz skupine elemenata rijetkih zemalja uključujući La, Ce, Pr, Eu i Gd i prijelazne metale drugog reda, Y i Zr. Proučavani HEO-i imaju energijski procijep u rasponu od 1,91 eV do 3,0 eV i odgovarajuće valentne i vodljive vrpce pogodne za cijepanje vode. Pokazuju visoku fotokatalitičku aktivnost koja se uglavnom pripisuje dostupnosti više fotokatalitičkih aktivnih mjesta koja su osigurala radikale odgovorne za razgradnju AZO boje. Također, uspješno proizvode vodik fotokatalitičkim cijepanjem vode, što ukazuje na potencijal HEOa kao novih fotokatalizatora. Fotokatalitička svojstva svih proučavanih HEO nadmašuju pojedinačne fluorit okside ili ekvivalentne miješane okside. $\text{Ce}_{0.2}\text{Zr}_{0.2}\text{La}_{0.2}\text{Pr}_{0.2}\text{Y}_{0.2}\text{O}_2$ (CZLPY) proizvodi vodik brzinom $9,2 \mu\text{molmg}^{-1}$ po satu, što je puno veća brzina u odnosu na ekvivalentni čisti CeO_2 koji iznosi $0,8 \mu\text{molmg}^{-1}$ po satu [1].

[1] S. Nundy, D. Tatar, J. Kojčinović, H. Ullah, A. Ghosh, T. K. Mallick, R. Meinus, B. M. Smarsly, A. A. Tahir, I. Đerdj, *Adv. Sustainable Syst.*, **6** (2022) 2200067.

HIGH-ENTROPY OXIDES FOR ENERGY STORAGE AND CATALYSIS

I. Đerd

Department of Chemistry, Josip Juraj Strossmayer University of Osijek, Cara Hadrijana 8/A, 31000 Osijek, Croatia

e-mail: igor.djerdj@kemija.unios.hr

A new class of materials with enhanced physical and chemical properties and high potential application are multi-component oxides or high-entropy oxides (HEOs). These entropy-stabilized oxides mostly comprise five or more elemental components in an equimolar ratio, incorporated within a single-phase system. The thermodynamic contribution of configurational entropy in the system of minimally five different components is sufficient to overcome the enthalpy of formation and reduce the Gibbs free energy. In this talk, photocatalytic behaviour towards AZO dye degradation and photoelectrochemical water splitting for hydrogen generation of five different rare-earth-based nanocrystalline high entropy oxides (HEOs) will be presented. The cationic site in the fluorite lattice consists of five equimolar elements selected from the group of rare-earth elements including La, Ce, Pr, Eu, and Gd and second-row transition metals, Y and Zr. Studied HEOs exhibit bandgaps in the range from 1.91 eV to 3.0 eV and appropriate valence and conduction bands for water splitting. They reveal high photocatalytic activity that is mostly attributed to the accessibility of more photocatalytic active sites which provided radicals responsible for the AZO dye degradation. The materials successfully produce hydrogen by photocatalytic water splitting, suggesting the potential of HEOs as new photocatalysts. The photocatalytic performances of all studied HEOs outperform the single fluorite oxides or equivalent mixed oxides. The $\text{Ce}_{0.2}\text{Zr}_{0.2}\text{La}_{0.2}\text{Pr}_{0.2}\text{Y}_{0.2}\text{O}_2$ (CZLPY) engender hydrogen in $9.2 \mu\text{molmg}^{-1}$ per hour that is much higher content than for pristine CeO_2 material which amounts to $0.8 \mu\text{molmg}^{-1}$ per hour [1].

[1] S. Nundy, D. Tatar, J. Kojčinović, H. Ullah, A. Ghosh, T. K. Mallick, R. Meinus, B. M. Smarsly, A. A. Tahir, I. Djerdj, *Adv. Sustainable Syst.*, **6** (2022) 2200067.

ХЕМИЈСКА ВЕЗА У КОМПЛЕКСИМА ПРЕЛАЗНИХ МЕТАЛА – СИНЕРГИЈА ЕКСПЕРИМЕНТА И ТЕОРИЈЕ

М. Златар

Универзитет у Београду – Институт за хемију, технологију и металургију,
Његошева 12, Београд, Србија
e-mail: matija.zlatar@ihm.bg.ac.rs

Примарна амбиција модерне хемије је коришћење једног молекула за постизање жељене функције. Да би се ово остварило, неопходно је стећи фундаментално разумевање свих фактора који утичу на својства молекула [1]. Комбинација експерименталног одређивања кристалне структуре и рачунарске хемије је постала веома значајна за разумевање електронске структуре комплекса прелазних метала. У овом предавању биће представљени наши напори у разумевању и контроли метал-лиганд веза. Примери о којима ће бити речи укључују: уочавање различитих интра-и интер-молекулских интеракција присутних у кристалима [2]; природа везивања слабо координованих лиганата [2]; разумевање улоге кристалне воде [3]; координационе преференције лиганата [2,4]; улога централног металног јона и његовог спинског стања [5]; разлике у геометријама молекула у кристалима и у раствору [6].

[1] M. Zlatar, M. Gruden in *Practical Approaches to Biological Inorganic Chemistry*, 2nd Edition (2020) 17–67.

[2] T. Keškić, B. Čobeljić, M. Gruden, K. Anđelković, A. Pevec, I. Turel, D. Radanović, M. Zlatar M, *Cryst. Growth Des.*, **19** (2019) 4810–4821.

[3] T. Keškić, Z. Jagličić, A. Pevec, B. Čobeljić, D. Radanović, M. Gruden, I. Turel, K. Anđelković, I. Brčeski, M. Zlatar, *Polyhedron*, **191** (2020) 114802.

[4] D. Darmanović, D. Radanović, M. Jevtović, I. Turel, A. Pevec, M. Milčić, M. Gruden, M. Zlatar, N. Đorđević, K. Anđelković, B. Čobeljić, *J. Mol. Struct.*, **1266** (2022) 133509.

[5] M. Stojičkov, M. Zlatar, P. P. Mazzeo, A. Bacchi, D. Radanović, N. Stevanović, M. Jevtović, I. Novaković, K. Anđelković, D. Sladić, B. Čobeljić, M. Gruden, *Polyhedron*, **237** (2023) 116389.

[6] N. Stevanović, M. Zlatar, I. Novaković, A. Pevec, D. Radanović, I. Matic, M. Đorđić Crnogorac, T. Stanojković, M. Vujčić, M. Gruden, D. Sladić, K. Anđelković, I. Turel, B. Čobeljić, *Dalton Trans.*, **51** (2022) 185–196.

CHEMICAL BONDING IN TRANSITION METAL COMPLEXES – SYNERGY BETWEEN EXPERIMENT AND THEORY

M. Zlatar

University of Belgrade – Institute of Chemistry, Technology and Metallurgy, Njegoševa
12, Belgrade, Serbia

e-mail: matija.zlatar@ihtm.bg.ac.rs

The primary ambition of modern chemistry is to utilize a single molecule to achieve the desired function. A fundamental understanding of all the factors affecting molecular properties is required to accomplish this [1]. Combining crystal structure determination and computational chemistry emerges as a powerful strategy for understanding the electronic structure of transition metal complexes. In this talk, our efforts in understanding and controlling metal-ligand bonding will be presented. Examples that will be discussed include: discerning different intra- and intermolecular interactions present in crystals [2]; the nature of binding of weakly coordinated ligands [2]; understanding the role of crystal water molecules [3]; coordination preferences of the ligands [2,4]; the role of central metal ion and its spin-state [5]; elucidating the difference in geometries in crystals and in solution [6].

[1] M. Zlatar, M. Gruden in *Practical Approaches to Biological Inorganic Chemistry*, 2nd Edition (2020) 17–67.

[2] T. Keškić, B. Čobeljić, M. Gruden, K. Anđelković, A. Pevec, I. Turel, D. Radanović, M. Zlatar M, *Cryst. Growth Des.*, **19** (2019) 4810–4821.

[3] T. Keškić, Z. Jagličić, A. Pevec, B. Čobeljić, D. Radanović, M. Gruden, I. Turel, K. Anđelković, I. Brčeski, M. Zlatar, *Polyhedron*, **191** (2020) 114802.

[4] D. Darmanović, D. Radanović, M. Jevtović, I. Turel, A. Pevec, M. Milčić, M. Gruden, M. Zlatar, N. Đorđević, K. Anđelković, B. Čobeljić, *J. Mol. Struct.*, **1266** (2022) 133509.

[5] M. Stojičkov, M. Zlatar, P. P. Mazzeo, A. Bacchi, D. Radanović, N. Stevanović, M. Jevtović, I. Novaković, K. Anđelković, D. Sladić, B. Čobeljić, M. Gruden, *Polyhedron*, **237** (2023) 116389.

[6] N. Stevanović, M. Zlatar, I. Novaković, A. Pevec, D. Radanović, I. Matić, M. Đorđić Crnogorac, T. Stanojković, M. Vujčić, M. Gruden, D. Sladić, K. Anđelković, I. Turel, B. Čobeljić, *Dalton Trans.*, **51** (2022) 185–196.

Acknowledgments: This research was supported by the Science Fund of the Republic of Serbia, (#7750288, Tailoring Molecular Magnets and Catalysts Based on Transition Metal Complexes – TMMagCat) and the Ministry of Science, Technological Development and Innovation of Republic of Serbia, (451-03-47/2023-01/200026).

КООРДИНАЦИОНА ХЕМИЈА ШИФОВИХ БАЗА АМИНОГВАНИДИНА – СИНТЕЗА, КОМПАРАТИВНА СТРУКТУРНА АНАЛИЗА И ПОТЕНЦИЈАЛНА ПРИМЕНА

М. М. Радановић

Универзитет у Новом Саду Природно-математички факултет, Трг Доситеја
Обрадовића 3, Нови Сад, Србија

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

Током 15 година испитивања координационе хемије деривата аминогванидина, синтетисан је и структурно окарактерисан већи број лиганада, од којих се издвајају Шифове базе са пиридоксалом, салицилалдехидом и 2-ацетилпиридином. Подробно су испитане могућности координације ових једињења, те је изоловано више од 40 комплекса са 3*d*- и 4*d*-металима и урађена њихова физичко-хемијска и структурна карактеризација [1-3]. У већини комплекса ови лиганди су координовани тридентатно, а подешавањем реакционих услова добијени су и они у којима је оставарен неуобичајени би-, односно, тетрадентатни начин координације, као и комплекси у којима изостаје координација Шифове базе. Одабиром различитих колиганада проучена је могућност мостовне координације и формирања полинуклеарних једињења. Компарацијом структурних параметара свих изолованих једињења изведени су закључци у вези са променама које настају услед координације и/или депротонације лиганада.

За одабрана комплексна једињења изучена су антиоксидативна и антимикробна својства. Осим тога, одабрана једињења су испитивана за примену у области оптичких материјала, где су се као обећавајући показали посебно комплекси цинка и кадмијума [4].

[1] М. М. Radanović, М. V. Rodić, S. Armačić, S. J. Armačić, Lj. S. Vojinović-Ješić, V. M. Leovac, *J. Coord. Chem.*, **70** (2017) 2870–2287.

[2] LJ. S. Vojinović-Ješić, М. М. Radanović, М. V. Rodić, LJ. S. Jovanović, V. I. Češljević, М. D. Joksović, *Polyhedron*, **80** (2014) 90–96.

[3] М. М. Radanović, Lj. S. Vojinović-Ješić, М. G. Jelić, E. Sakellis, B. Barta Holló, V. M. Leovac, М. V. Rodić, *Inorganics*, **10** (2022) 147.

[4] М. G. Jelić, D. G. Georgiadou, М. М. Radanović, N. Ž. Romčević, K. P. Giannakopoulos, V. M. Leovac, L. F. Nađ, LJ. S. Vojinović-Ješić, *Opt. Quant. Electron.*, **48** (2016) 276.

COORDINATION CHEMISTRY OF AMINOGUANIDINE SCHIFF BASES – SYNTHESIS, COMPARATIVE STRUCTURAL ANALYSIS, AND POTENTIAL APPLICATION

M. M. Radanović

University of Novi Sad Faculty of Sciences, Trg Dositeja Obradovića 3, Novi Sad, Serbia
e-mail: mirjana.lalovic@dh.uns.ac.rs

During a decade-and-a-half-long research on the coordination properties of aminoguanidine Schiff bases, we have described syntheses and structures of a large number of ligands. Schiff bases with pyridoxal, salicylaldehyde, and 2-acetylpyridine stand out among these. More than 40 complexes of 3d- and 4d-metals with these ligands were isolated in the form of single crystals and their physicochemical and structural properties were investigated [1-3]. Usually, these Schiff bases have the role of a tridentate ligand. However, optimization of synthetic routes yielded complexes in which some unusual, i.e., bidentate and tetradentate coordination manners were achieved. Also, in some of the complexes, Schiff base coordination did not take place, but the Schiff base in its protonated form has a role of a counter-ion. Besides, the possibility of bridging coordination and polynuclear complex formation was studied by the selection of different co-ligands. By comparison of structural parameters of isolated compounds, the changes in the structures due to coordination and/or deprotonation were discussed.

The antioxidant and antimicrobial activities of the selected complexes were examined. Several complexes were studied for their potential application in the field of optical materials, and it was concluded that complexes of zinc and cadmium were the most promising ones [4].

- [1] M. M. Radanović, M. V. Rodić, S. Armaković, S. J. Armaković, Lj. S. Vojinović-Ješić, V. M. Leovac, *J. Coord. Chem.*, **70** (2017) 2870–2287.
- [2] LJ. S. Vojinović-Ješić, M. M. Radanović, M. V. Rodić, LJ. S. Jovanović, V. I. Češljević, M. D. Joksović, *Polyhedron*, **80** (2014) 90–96.
- [3] M. M. Radanović, Lj. S. Vojinović-Ješić, M. G. Jelić, E. Sakellis, B. Barta Holló, V. M. Leovac, M. V. Rodić, *Inorganics*, **10** (2022) 147.
- [4] M. G. Jelić, D. G. Georgiadou, M. M. Radanović, N. Ž. Romčević, K. P. Giannakopoulos, V. M. Leovac, L. F. Nađ, LJ. S. Vojinović-Ješić, *Opt. Quant. Electron.*, **48** (2016) 276.

УСМЕНА САОПШТЕЊА

ORAL PRESENTATION

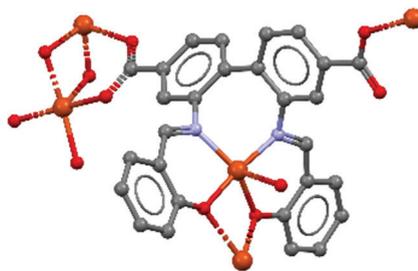
СИНТЕЗА И КРИСТАЛНА СТРУКТУРА ДИПЕРИОДИЧНОГ КООРДИНАЦИОНОГ ПОЛИМЕРА Cu(II) СА ШИФОВОМ БАЗОМ БИФЕНИЛДИКАРБОКСИЛНЕ КИСЕЛИНЕ

М. Г. Богдановић, Н. Д. Радновић, М. В. Родић

Универзитет у Новом Саду, Природно-математички факултет, Трг Доситеја
Обрадовића 3, 21000 Нови Сад, Србија
e-mail: milica.bogdanovic@dh.uns.ac.rs

Координациона хемија Cu(II) са лигандом 2,2'-бис(((E)-2-хидроксибензилиден)амино)-[1,1'-бифенил]-4,4'-дикарбоксилном киселином (H₄L), која представља прву Шифову базу поменуте дикарбоксилне киселине, била је фокус наших претходних истраживања [1]. У овом раду је представљена синтеза и кристална структура дипериодичног координационог полимера формуле $\{[Cu_2L(H_2O)] \cdot 2DMF\}_n$. Комплекс је изолован као производ реакције Cu(SCN)₂ са H₄L и мравље киселине, у DMF. Органски лиганд се налази у тетраанјонској форми L⁴⁻ и координује се као N₂O₅ хептадентат за пет атома Cu(II) (слика 1). У структури постоје два пентакоординована атома Cu(II). Један се налази у N₂O₃ окружењу два азотетинска атома азота и два феноксидна атома кисеоника једног лиганда, као и једног карбоксилатног атома кисеоника другог лиганда. Други атом бабра је окружен са пет атома кисеоника, који потичу од једног молекула воде, два феноксидна атома кисеоника једног лиганда и два атома кисеоника из двају карбоксилатних група два лиганда. Молекули полимера формирају слојеве који су паралелни са кристалографском равни *ac*.

Кристалографски подаци:
C₃₄H₃₀N₄O₉Cu₂, моноклинични кри-
стални систем, *P2₁/n*, *a*=13,2074(8) Å,
b=17,2317(19) Å, *c*=15,3785(8) Å,
β=98,184(6)°, *V*=3464,3(5) Å³,
Z = 4; 448 параметара утачњено на
основу 8195 рефлексија до *R*₁=0,1056,
*wR*₂=0,3021, *S*=1,012.



Слика 1. Молекулска структура
комплекса $\{[Cu_2L(H_2O)] \cdot 2DMF\}_n$

[1] M. G. Bogdanović, N. D. Radnović, B. Barta Holló, M. M. Radanović, B. B. Kordić, V. N. Raičević, Lj. S. Vojinović-Ješić, M. V. Rodić, *Inorganics*, **10** (2022) 261.

Истраживање је финансирао Покрајински секретаријат за високо образовање и научноистраживачку делатност Војводине (пројекат бр. 42-451-2197/2022).

SYNTHESIS AND CRYSTAL STRUCTURE OF DIPERIODIC Cu(II) COORDINATION POLYMER WITH A BIPHENYLDICARBOXYLIC ACID SCHIFF BASE LIGAND

M. G. Bogdanović, N. D. Radnović, M. V. Rodić

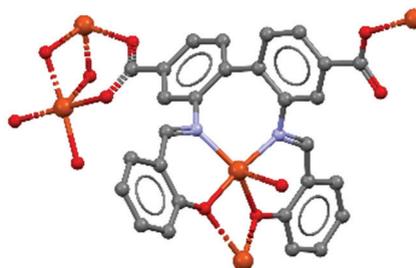
University of Novi Sad, Faculty of Sciences, Trg Dositeja Obradovića 3, 21000 Novi Sad, Serbia

e-mail: milica.bogdanovic@dh.uns.ac.rs

The coordination chemistry of Cu(II) with the ligand 2,2'-bis(((*E*)-2-hydroxybenzylidene)amino)-[1,1'-biphenyl]-4,4'-dicarboxylic acid (H₄L), which presents the first Schiff base of the mentioned dicarboxylic acid, was the focus of our previous research [1]. This paper presents the synthesis and crystal structure of a diperiodic coordination polymer of the formula $\{[\text{Cu}_2\text{L}(\text{H}_2\text{O})]\cdot 2\text{DMF}\}_n$.

The compound was isolated as a product of the reaction of Cu(SCN)₂, H₄L, and formic acid in DMF. In this complex, the organic ligand is coordinated in a tetraanionic form L⁴⁻, as a N₂O₅ heptadentate, binding to five Cu(II) atoms (Fig. 1). There are two pentacoordinated Cu(II) atoms in the crystal structure. One is situated in N₂O₃ environment consisting of two phenoxide oxygen atoms and two azomethine nitrogen atoms of one ligand, and a carboxylate oxygen atom of another ligand molecule. The second copper atom is coordinated by five oxygen atoms, one of which belongs to a water molecule, and two are phenoxide oxygen atoms of one ligand. Polymer molecules form layers parallel to the crystallographic plane *ac*.

Crystallographic data: C₃₄H₃₀N₄O₉Cu₂, monoclinic crystal system, *P*2₁/*n*, *a*=13.2074(8) Å, *b*=17.2317(19) Å, *c*=15.3785(8) Å, β=98.184(6)°, *V*=3464.3(5) Å³, *Z*=4; 448 parameters refined against 8195 reflections to *R*₁=0.1056, *wR*₂=0.3021, *S*=1.012.



the complex $\{[\text{Cu}_2\text{L}(\text{H}_2\text{O})]\cdot 2\text{DMF}\}_n$

[1] M. G. Bogdanović, N. D. Radnović, B. Barta Holló, M. M. Radanović, B. B. Kordić, V. N. Raičević, Lj. S. Vojinović-Ješić, M. V. Rodić, *Inorganics*, **10** (2022) 261.

The authors acknowledge the financial support of the Provincial Secretariat for Higher Education and Scientific Research (Grant No. 42-451-2197/2022).

ЈАКЕ ВОДНИЧНЕ ВЕЗЕ СА УГЉЕНИКОМ КАО АКЦЕПТОРОМ АТОМА ВОДОНИКА

Д. Ж. Вељковић^а, М. Малинић^а, И. С. Вељковић^б, В. Медаковић^а

^а Универзитет у Београду – Хемијски факултет, Студентски трг 12–16, Београд, Србија; ^б Универзитет у Београду – Институт за хемију, технологију и металургију, институт од националног значаја, Његошева 12, Београд, Србија
e-mail: vdusan@chem.bg.ac.rs

Пирамидан (тетрацикло[2.1.0.0^{1,3}.0^{2,5}]пентан, C₅H₄) и његови деривати припадају групи високоенергетских молекула са некласичним геометријама у виду кавеза [1]. Иако сам пирамидан још увек није синтетисан, молекули који се састоје из трочланих прстенова под напоном са атомом угљеника на врху су синтетисани и њихове структуре су одређене. Ово пружа прилику за проучавање нековалентног везивања наведеног атома угљеника у ангуларно напрегнутим системима. У овом раду смо анализирали кристалне структуре и урадили прорачуне енергија интеракције да бисмо проценили могућност атома угљеника из пирамидана и аналогних молекула да учествују у водничном везивању као акцептори водоника.

Анализа структура из Кембричке базе структурних података (CSD) је показала да постоје кратки контакти између наведених атома угљеника и водоника из X-H фрагмената. Резултати квантохемијских прорачуна рађених на MP2/DEF2-TZVP нивоу су показали да пирамидан и његови деривати могу да учествују у јаким водничним везама посредством атома угљеника као акцептора водоника. Прорачуни су показали да енергија O-H...C водничне везе између тетраметил-деривата пирамидана и воде износи $\Delta E = -6,86$ kcal/mol. Ово је знато јача воднична веза од оне која постоји између два молекула воде ($\Delta E = -5,02$ kcal/mol). Резултати овог истраживања могу бити од великог значаја за препознавање некласичних водничних веза у којима учествују ангуларно напрегнута системи, као и у процени њихових високоенергетских карактеристика.

Истраживање спроведено уз подршку Фонда за науку Републике Србије, ПРОМИС, #6066886, CD-HEM. Министарство науке, технолошког развоја и иновација Републике Србије, Евиденциони број: 451-03-47/2023-01/200168 и 451-03-47/2023-01/200026.

[1] J. P. Kenny, K. M. Krueger, J. C. Rienstra-Kiracofe, H. F. Schaefer, *J. Phys. Chem. A*, **105** (2001) 7745–7750.

STRONG HYDROGEN BONDS INVOLVING CARBON ATOM AS HYDROGEN ATOM ACCEPTOR

D. Ž. Veljković^a, M. Malinić^a, I. S. Veljković^b, V. Medaković^a

^a University of Belgrade – Faculty of Chemistry, Studentski trg, 12–16, Belgrade, Serbia;

^b University of Belgrade – Institute of Chemistry, Technology and Metallurgy – National Institute of the Re-public of Serbia, Njegoševa 12, 11000 Belgrade, Serbia

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

Pyramidane (tetracyclo[2.1.0.0^{1,3}.0^{2,5}]pentane, C₅H₄) and its derivatives fall into the class of high-energy molecules with nonclassical cage geometries [1]. Although pyramidane itself has not been synthesized yet, cage molecules with strained triangular rings and an apex carbon atom were synthesized and their structures were determined. This provides an opportunity for the assessment of noncovalent bonding of the apex carbon atom in highly strained systems. Here, we analysed crystal structures and performed interaction energies calculations to evaluate possibility of the apex carbon atom from pyramidane and pyramidane-like molecules to act as hydrogen atom acceptors in hydrogen bonds.

Analysis of crystal structures from Cambridge Structural Database (CSD) showed that there are short hydrogen-carbon contacts between apex carbon atom from pyramidane-like structures and hydrogen atoms from X-H fragments. Results of quantum chemical calculations performed on MP2/DEF2-TZVP level showed that pyramidane molecules and its derivatives can form strong hydrogen bonds involving apex carbon atom as hydrogen atom acceptor. Calculated energy of O-H...C hydrogen bond between apex carbon atom of tetramethyl derivative of pyrimidine and water was $\Delta E = -6.86$ kcal/mol. This is significantly stronger than hydrogen bond between two water molecules ($\Delta E = -5.02$ kcal/mol). Results of this study can be of great importance for the recognition of nonclassical hydrogen bonds involving highly strained molecules. In addition, results presented here may help in the assessment of high-energy properties of strained cage molecules.

This research was supported by the Science Fund of the Republic of Serbia, PROMIS, #6066886, CD-HEM. This work was supported by the Ministry of Science, Technological Development and Innovation of Republic of Serbia (Contract numbers: 451-03-47/2023-01/200168 and 451-03-47/2023-01/200026).

[1] J. P. Kenny, K. M. Krueger, J. C. Rienstra-Kiracofe, H. F. Schaefer, *J. Phys. Chem. A*, **105** (2001) 7745–7750.

СИНТЕЗА И КАРАКТЕРИЗАЦИЈА ШИФОВЕ БАЗЕ 2,6-ДИАЦЕТИЛПИРИДИН-АДАМАНТАН-1- -КАРБОХИДРАЗИДА И ЊЕНОГ КОМПЛЕКСА СА ЦИНКОМ(II)

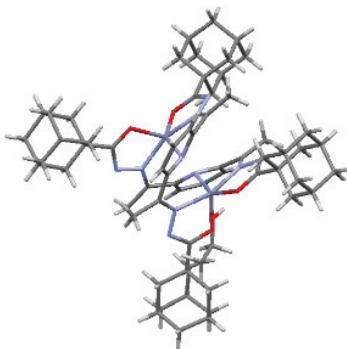
**М. С. Костић, В. М. Леовац, М. Г. Богдановић, М. В. Родић,
Љ. С. Војиновић Јешић, М. М. Радановић**

Универзитет у Новом Саду, Природно-математички факултет, Нови Сад, Србија
e-mail: marijana.kostic@dh.uns.ac.rs

На основу претраге Кембричке банке структурних података, до сада је структурно окарактерисано преко 2500 Шифових база 2,6-диацетилпиридина и њихових комплексних једињења. Истраживачима привлаче пажњу због разноврсног начина координације које усвајају. Међу њима је и велики број кондензованих једињења 2,6-диацетилпиридина са хидразинским базама [1].

Рефлуктовањем смеше 2,6-диацетилпиридина и адамантан-1-карбохидразида у етанолу, у моларном односу 1:2, добијена је нова Шифова база у бикондензованом, неутралном облику – (Ad)₂dar. Реакцијом топле суспензије овог лиганда у етанолу и топлог етанолног раствора цинк-ацетата (1:1) синтетисан је динуклеарни комплекс формуле [Zn₂((Ad)₂dar–H)₂]·EtOH.

Добијени лиганд у новосинтетисаном комплексном једињењу се понаша као N₃O₂ пентадентат. Један атом кисеоника карбонилне групе, пиридински и атом азота једне азометинске групе координовани су за један атом цинка, док су преостала два донора координована за суседни атом метала. На овај начин се формира шест петочланих металоцикала (слика 1).



Слика 1. Молекулска структура комплекса

[1] P. Nithya, J. Simpson, S. Govindrajan, *Polyhedron*, **141** (2018) 5–16.

SYNTHESIS AND CHARACTERIZATION OF THE SCHIFF BASE 2,6-DIACETILPYRIDINE-ADAMANTANE-1-CARBOHYDRAZIDE AND ITS ZINC(II) COMPLEX

M. S. Kostić, V. M. Leovac, M. G. Bogdanović, M. V. Rodić, Lj. S. Vojinović Ješić, M. M. Radanović

University of Novi Sad, Faculty of Sciences, Novi Sad, Serbia
e-mail: marijana.kostic@dh.uns.ac.rs

Based on a search of the Cambridge Structural Database, over 2500 Schiff bases of 2,6-diacetylpyridine and their complex compounds have been structurally characterized so far. The large variety of their coordination makes them interesting for the researchers. Among them a number of condensed compounds of 2,6-diacetylpyridine with hydrazine bases is significant [1].

In the reaction of 2,6-diacetylpyridine and adamantane-1-carbohydrazide in ethanol, in molar ratio 1:2, under the reflux, a new Schiff base was obtained – (Ad)₂dap. A dinuclear complex of Zn(II), [Zn₂((Ad)₂dap–H)₂]·EtOH, was synthesized by the reaction of a warm suspension of this ligand in ethanol and a warm ethanolic solution of Zn(CH₃COO)₂, in molar ratio 1:1.

The obtained Schiff base in the newly synthesized complex compounds has a role of N₃O₂ pentadentate ligand. Pyridine nitrogen atom, one azomethine atom and one carbonyl oxygen atom are coordinated to one Zn(II), while the other two donors of the same ligand molecule are coordinated to the neighboring metal atom. In this way, six five-membered metallocycles are formed. Zinc is placed in a slightly deformed square-pyramidal environment ($\tau_5=0.24$) of donor nitrogen atoms and one oxygen atom in the equatorial plane and another oxygen atom in the apical position (Figure 1).

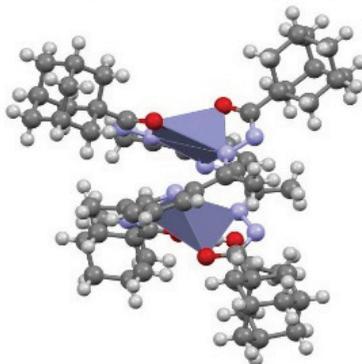


Figure 1. The coordination polyhedron

[1] P. Nithya, J. Simpson, S. Govindrajan, *Polyhedron*, **141** (2018) 5–16.

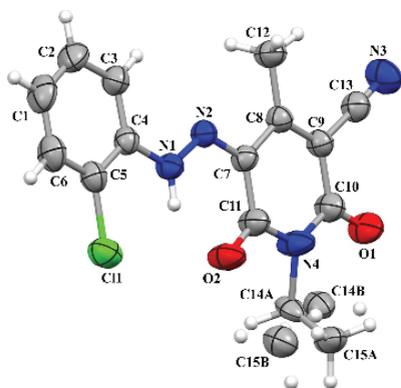
ТАУТОМЕРИЈА АЗО ПИРИДОНСКИХ БОЈА: КРИСТАЛНА СТРУКТУРА И СОЛВАТОХРОМНА СВОЈСТВА

Ј. Лађаревић^а, Ј. Радовановић^б, А. Машуловић^б, Н. Тришовић^а, А. Лазић^б, Ј. Роган^а, Д. Мијин^а

^а Универзитет у Београду, Технолошко-металуришки факултет, Карнегијева 4, Београд, Србија; ^б Иновациони центар Технолошко-металуришког факултета,, Карнегијева 4, Београд, Србија
e-mail: jmirkovic@tmf.bg.ac.rs

Азо боје се последњих деценија примењују у различитим областима због изузетних својстава. Њихова примена је у великој мери повезана са феноменом азо-хидразон таутомерије. Наиме, одређивање структурног облика азо боја је значајно како са теоријског становишта, тако и из техничке перспективе јер азо и хидразон таутомери поседују различита физичка и хемијска својства.

У овом раду, синтетисана је азо боја (5-(2-хлорфенилазо)-3-цијано-1-етил-6-хидрокси-4-метил-2-пиридон) и окарактерисана елементалном анализом, NMR и ATR-FTIR спектроскопијом и рендгенском структурном анализом (слика). Солватохромна својства боје испитана су UV-Vis спектроскопијом у различитим растварачима како би се утврдио доминантан структурни облик боје.



Слика. Асиметрична јединица азо боје

Кристална структура је показала да боја кристалише у облику хидразон таутомера. Стабилизација кристалног паковања остварена је посредством различитих нековалентних интеракција као што су C–H \cdots O/N, π - π , слободан електронски пар- π и Cl \cdots O.

Кристалнографски подаци:
C₁₅H₁₃ClN₄O₂, $M_r = 316,74$, триклиничан систем, просторна група $P\bar{1}$, $a = 7,9490(16)$, $b = 8,9645(18)$, $c = 11,697(2)$ Å, $\alpha = 72,92(3)$, $\beta = 83,59(3)$, $\gamma = 66,77(3)$ °, $V = 732,1(3)$ Å³, $Z = 2$, $F(000) = 328$, $\rho_x = 1,437$ g cm⁻³, $\mu(\text{MoK}\alpha) = 0,274$ mm⁻¹, $R_1 = 0,0447$ и $S = 1,018$ за утачњених 219 параметара и 1941 примењених рефлексија са $I \geq 2\sigma(I)$.

TAUTOMERISM OF AZO PYRIDONE DYES: CRYSTAL STRUCTURE AND SOLVATOCHROMIC ANALYSIS

J. Ladarević^a, **L. Radovanović**^b, **A. Mašulović**^a, **N. Trišović**^a, **A. Lazić**^b,
J. Rogan^a, **D. Mijin**^a

^a University of Belgrade, Faculty of Technology and Metallurgy, Karnegijeva 4, Belgrade, Serbia; ^bInnovation Centre of the Faculty of Technology and Metallurgy, Karnegijeva 4, Belgrade, Serbia

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

Tremendous progress in the application of azo dyes in various fields has been achieved over the past few decades due to their intriguing properties. Their application is closely related to the phenomenon of azo-hydrazone tautomerism. Determination of the structural isomer of the azo dyes is not only important from the theoretical standpoint but also from the technical perspective since azo and hydrazone tautomers have distinctive physical and chemical properties.

In this work, azo pyridone dye (5-(2-chlorophenylazo)-3-cyano-1-ethyl-6-hydroxy-4-methyl-2-pyridone) has been synthesized and characterized by elemental analysis, NMR and ATR-FTIR spectroscopy and single-crystal X-ray analysis (Figure). Solvatochromic properties of the dye have been investigated using UV-Vis spectroscopy in solvents of different polarity in order to determine the dominant form in solvents.

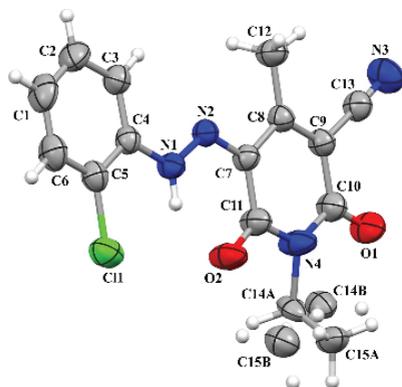


Figure. Asymmetric unit of the azo dye.

The crystal structure of the dye shows that the dye crystallizes in the hydrazone form. The stabilization of the crystal packing is achieved by weak non-covalent interactions: C–H···O/N, π - π , lone pair- π and Cl···O.

Crystal data: C₁₅H₁₃ClN₄O₂, $M_r = 316.74$, triclinic, space group $P\bar{1}$, $a = 7.9490(16)$, $b = 8.9645(18)$, $c = 11.697(2)$ Å, $\alpha = 72.92(3)$, $\beta = 83.59(3)$, $\gamma = 66.77(3)$ °, $V = 732.1(3)$ Å³, $Z = 2$, $F(000) = 328$, $\rho_x = 1.437$ g cm⁻³, $\mu(\text{MoK}\alpha) = 0.274$ mm⁻¹, $R_1 = 0.0447$ and $S = 1.018$ for 219 refined parameters and 1941 observed reflections with $I \geq 2\sigma(I)$.

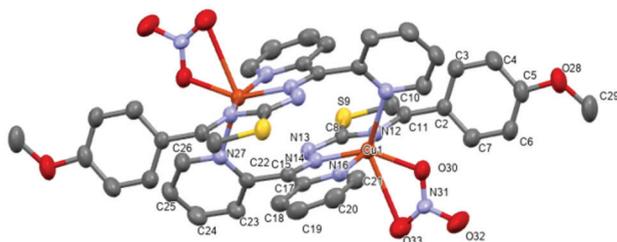
ДИНУКЛЕРАНИ КОМПЛЕКС Cu(II) СА ДИПИРИДИЛ ХИДРАЗОНИЛ-ТИАЗОЛОМ

А. Миливојац^а, **Т. Бојовић**^б, **А. Вишњевац**^в, **Т. Тодоровић**^б,
Н. Филиповић^г

^а Иновациони центар Хемијског факултета, Студентски трг 12-16, Београд, Србија; ^б Универзитет у Београду – Хемијски факултет, Студентски трг 12-16, Београд, Србија; ^в Институт Руђер Бошковић, Бијеничка 54, Загреб, Хрватска; ^г Универзитет у Београду – Пољопривредни факултет, Немањина 6, Београд-Земун, Србија.

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

Координациона једињења Cu(II) привлаче велику пажњу због редокс активности овог јона, што обезбеђује вишеструке путеве биолошке активности [1,2]. У овом раду је описана синтеза и кристална структура централно симетричног димера Cu(II) са дипиридил хидразонил-тиазолом (Слика 1). Геометрија око централног металног јона је дисторгована октаедарска. Два дипиридил хидразонил-тиазолска лиганда су координована тридентатно, преко пиридинског атома азота за један Cu(II) јон и преко иминских и тиазолских атома азота за други Cu(II) јон. У унутрашњој сфери комплекса два координациона места заузимају атоми кисеоника из бидентатно координованог нитратног јона. Урађена је анализа расподеле енергије и топологија интермолекулских интеракција у кристалном паковању новог Cu(II) комплекса са хидразонил-тиазолом на бази дипиридина.



Слика 1. ОРТЕП приказ молекулске структуре комплекса Cu(II) .

Термални елипсоиди су приказани са 30 % вероватноће.

Атоми водоника су изостављени због прегледности.

[1] O. Krasnovskaya, A. Naumov, D. Guk, P. Gorelkin, A. Erofeev, E. Beloglazkina, A. Majouga, *Int. J. Mol. Sci.*, **21** (2020) 3965.

[2] E. Zeytün, M. D. Altıntop, B. Sever, A. Özdemir, D. E. Ellakwa, Z. Ocak, H. I. Ciftci, M. Otsuka, M. Fujita, M. O. Radwan, *Agents Med Chem.*, **21** (2021) 1099–1109.

DINUCLLEAR Cu(II) COMPLEX WITH DIPYRIDYL HYDRAZONYL-THIAZOLE

A. Milivojac^a, **T. Bojović**^b, **A. Višnjevac**^c, **T. Todorović**^b, **N. Filipović**^d

^a Innovative Centre of the Faculty of Chemistry, Studentski trg 12-16, Belgrade, Serbia;

^b University of Belgrade - Faculty of Chemistry, Studentski trg 12-16, Belgrade, Serbia;

^c Institute Ruđer Bošković, Bijenička 54, Zagreb, Croatia; ^d University of Belgrade - Faculty of Agriculture, Nemanjina 6, Belgrade-Zemun, Serbia;

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

Coordination compounds of Cu(II) attract much attention due to the redox activity of this ion, which provides multiple pathways of biological activity [1,2]. This paper describes the synthesis and crystal structure of a centrosymmetric dimer of Cu(II) with dipyridyl hydrazonyl-thiazole (Figure 1). The geometry around the central metal ion is distorted octahedral. Two dipyridyl hydrazonyl-thiazole ligands are tridentately coordinated *via* the pyridine nitrogen atom for one Cu(II) ion and *via* the imine and thiazole nitrogen atoms for the other Cu(II) ion. In the inner sphere of the complex, two coordination sites are occupied by oxygen atoms from the bidentately coordinated nitrate ion. An analysis of the energy distribution and topology of intermolecular interactions in the crystal packing of the novel Cu(II) complex with hydrazonyl-thiazole based on dipyrindine was performed.

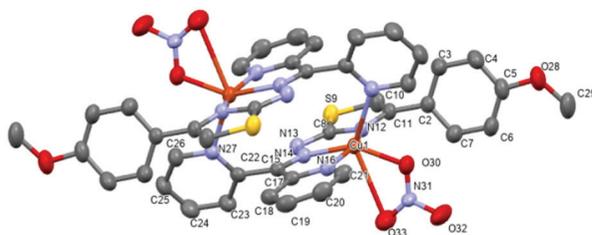


Figure 1. ORTEP drawing of the molecular structure of Cu(II) complex. Displacement ellipsoids are shown at 30 % probability level. Hydrogen atoms are omitted for clarity.

[1] O. Krasnovskaya, A. Naumov, D. Guk, P. Gorelkin, A. Erofeev, E. Beloglazkina, A. Majouga, *Int. J. Mol. Sci.*, **21** (2020) 3965.

[2] E. Zeytün, M. D. Altıntop, B. Sever, A. Özdemir, D. E. Ellakwa, Z. Ocağ, H. I. Ciftci, M. Otsuka, M. Fujita, M. O. Radwan, *Agents Med Chem.*, **21** (2021) 1099–1109.

УТИЦАЈ ОБРТНОГ МАГНЕТНОГ ПОЉА НА ДЕРАЦЕМИЗАЦИЈУ КРИСТАЛА НАТРИЈУМ-ХЛОРАТА

М. Милојевић^а, А. Жекић^а, П. Дабић^б, Б. Вучетић^а, Б. Максимовић^а

^а Универзитет у Београду, Физички факултет, Студентски трг 12, 11000 Београд; ^б Универзитет у Београду, Рударско-геолошки факултет, Ђушина 7, 11000 Београд

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

Видман рипенинг [1], примена ултразвучних таласа [2], додавање примеса [3] и промена температуре [4] представљају неке од начина дерацемизације кристала раслих из водених раствора. У овом раду биће приказани резултати утицаја ротирајућег магнетног поља на дерацемизацију кристала натријум-хлората из водених раствора засићених на температури $T_0 = (31.0 \pm 0.1)^\circ\text{C}$. Кристали су нуклеисани и расли у топлотно изолованој посуди са 20 ml раствора на температури $T = (26.0 \pm 0.1)^\circ\text{C}$, у обртном магнетном пољу јачине $B = (150 \pm 9)$ mT, при брзини ротације 200–1200 ob/min са кораком 200 ob/min. Након раста, који је трајао око 4 h, поларизационом микроскопијом утврђена је оријентација кристала.

Резултати показују да брзина ротације поља утиче на удео добијених кристала. При брзинама 800 и 1200 ob/min, удео оба енантиомера је приближно исти, при брзинама 200, 400 и 1000 ob/min доминантни су кристали L – оријентације, док су при брзини 600 ob/min доминантни кристали D – оријентације.

Рендгенска структурна анализа је показала да величина параметра кристалне решетке добијених кристала не зависи од њихове оријетације и брзине ротације поља, већ само од његове јачине [5].

[1] C. Viedma, *Phys. Rev. Lett.*, **94** (2005) 065504-1–065504-4.

[2] C. Rougeot, F. Guillen, J.-C. Plaquevent, G. Coquerel, *Cryst. Growth Des.*, **15** (2015) 2151–2155.

[3] C. Xiouras, J. V. Aeken, J. Panis, J. H. T. Horst, T. V. Gerven, G. D. Stefanidis, *Cryst. Growth Des.*, **15** (2015) 5476–5484.

[4] K. Suwannasang, A. E. Flood, C. Rougeot, G. Coquerel, *Cryst. Growth Des.*, **13** (2013) 3498–3504.

[5] M. M. Milojević, B. M. Vučetić, B. Z. Maksimović, O. R. Klisurić, M. M. Mitrović, A. A. Žekić, *ACS omega*, **7** (2022) 47701–47708.

INFLUENCE OF A ROTATING MAGNETIC FIELD ON THE DERACEMIZATION OF SODIUM CHLORATE CRYSTALS

M. Milojević^a, A. Žekić^a, P. Dabić^b, B. Vučetić^a, B. Maksimović^a

^a University of Belgrade, Faculty of Physics, Studentski trg 12, 11000 Belgrade;

^b University of Belgrade, Faculty of Mining and Geology, Đušina 7, 11000 Belgrade

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

Viedma ripening [1], application of ultrasonic waves [2], addition of impurities [3] and temperature changes [4] are some of the methods of deracemization of crystals grown from aqueous solutions. This paper will present the results of the influence of a rotating magnetic field on the deracemization of sodium chlorate crystals from aqueous solutions saturated at temperature $T_0 = (31.0 \pm 0.1)^\circ\text{C}$. Crystals were nucleated and grown in a thermally insulated vessel filled with 20 ml of solution at temperature $T = (26.0 \pm 0.1)^\circ\text{C}$, in a rotating magnetic field of strength $B = (150 \pm 9)$ mT, at the rotational frequency 200–1200 rpm with a step of 200 rpm. After the growth, which lasted about 4 h, the orientation of the crystals was determined by polarization microscopy.

The results show that the rotational frequency of the field affects the fraction of the obtained crystals. At frequencies of 800, and 1200 rpm, the amount of both enantiomers is approximately the same; at frequencies of 200, 400, and 1000 rpm, *L* – orientation of crystals is dominant, while at 600 rpm, *D* – orientation of crystals is dominant.

X-ray structural analysis showed that the size of the lattice parameter of the obtained crystals does not depend on their orientation and field rotational frequency, but only on its strength [5].

[1] C. Viedma, *Phys. Rev. Lett.*, **94** (2005) 065504-1–065504-4.

[2] C. Rougeot, F. Guillen, J.-C. Plaquevent, G. Coquerel, *Cryst. Growth Des.*, **15** (2015) 2151–2155.

[3] C. Xiouras, J. V. Aeken, J. Panis, J. H. T. Horst, T. V. Gerven, G. D. Stefanidis, *Cryst. Growth Des.*, **15** (2015) 5476–5484.

[4] K. Suwannasang, A. E. Flood, C. Rougeot, G. Coquerel, *Cryst. Growth Des.*, **13** (2013) 3498–3504.

[5] M. M. Milojević, B. M. Vučetić, B. Z. Maksimović, O. R. Klisurić, M. M. Mitrović, A. A. Žekić, *ACS omega*, **7** (2022) 47701–47708.

УТИЦАЈ ДОПАНАТА НА СТРУКТУРУ АНАТАСА

Н. Милојковић^а, Б. Симовић^б, М. Жунић^б, А. Дапчевић^а

^а Универзитет у Београду - Технолошко-металуришки факултет, Карнегијева 4, Београд; ^б Универзитет у Београду - Институт за мултидисциплинарна истраживања, Кнеза Вишеслава 1, Београд
e-mail: nmiljkovic@tmf.bg.ac.rs

Degussa P-25 је фотокатализатор на бази титан(IV)-оксида, који се најчешће користи у индустрији. TiO_2 се јавља у три полиморфне модификације: тетрагоналним анатасу ($I4_1/amd$) и рутилу ($P4_2/mnt$) и ромбичном брукиту ($Pbca$). Анатас и брукит, као метастабилне фазе, приликом загревања прелазе у рутил. Циљ овог истраживања је испитивање утицаја различитих допаната на фазни прелаз анатаса у рутил као и на фотокаталитичка својства. Узорци $\text{TiO}_2\text{-}M$ ($M = \text{Cu}, \text{Mn}$ и V), који садрже 5 at.% допанта, припремљени су термохемијском реакцијом на 700 °C током 3 h између хомогенизованих прахова анатаса и одговарајућих оксида (CuO , MnO_2 и V_2O_5). Ради поређења, прах чистог анатаса је термички третиран под истим условима. Помоћу ТГ/ДТ анализе дефинисани су услови термичког третмана, док су добијени узорци окарактерисани рендгенском дифракцијом на поликристалном материјалу да би се одредио фазни састав, параметри јединичних ћелија и величина кристалита. У случају недопираног анатаса настало је свега 3 mas.% рутила, 26 и 76 mas.% рутила добијено је у $\text{TiO}_2\text{-Mn}$ и $\text{TiO}_2\text{-V}$, редом, док се потпуни фазни прелаз анатас–рутил одиграо у $\text{TiO}_2\text{-Cu}$. Ово значи да присуство допанта убрзава фазну трансформацију. Најмања количина рутила у $\text{TiO}_2\text{-Mn}$ може се објаснити изовалентним Ti^{4+} и Mn^{4+} , тј. да уградња Mn^{4+} у TiO_2 није праћена настанком нових дефеката који представљају вучну силу за одигравање фазног прелаз, као што је то случај код $\text{TiO}_2\text{-Cu}$. Око 5 mas.% непрореаговалог CuO (готово почетна количина) заостало је у $\text{TiO}_2\text{-Cu}$, зато што се Cu^{2+} -јони теже уграђују у решетку TiO_2 због већег радијуса Cu^{2+} у октаедарском окружењу (0,870 Å) од радијуса Ti^{4+} (0,745 Å), за разлику од мањих Mn^{4+} (0,670 Å) и V^{5+} (0,680 Å). Ипак, сигурно је мала количина Cu^{2+} -јона била неопходна како би иницирала фазни прелаз. Како у $\text{TiO}_2\text{-Mn}$ и $\text{TiO}_2\text{-V}$ нису присутни остаци полазних оксида, може се закључити да су се ови јони метала уградили у решетку анатаса. Међусобним поређењем параметара јединичне ћелије анатаса, уочено је скраћење дуж c -осе, што указује на скраћење дужина веза $M\text{-O}_{\text{апикални}}$. Израчуната величина кристалита (55–90 nm) показала је да су сви добијени узорци нанокристални, па ће њихова фотокаталитичка својства бити испитана.

EFFECT OF DOPANTS ON ANATASE STRUCTURE

N. Milojković^a, B. Simović^b, M. Žunić^b, A. Dapčević^a

^a University of Belgrade - Faculty of Technology and Metallurgy, Karnegijeva 4, Belgrade, Serbia; ^b University of Belgrade - Institute for Multidisciplinary Research, Kneza Višeslava 1, Belgrade, Serbia

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

It is well known that TiO₂-based Degussa P-25 is the mostly used commercial photocatalyst and that TiO₂ exists in three crystalline modifications: tetragonal anatase (*I4₁/amd*) and rutile (*P4₂/mnm*) and orthorhombic brookite (*Pbca*). On heating, anatase and brookite, as metastable phases, can be transformed to rutile. The aim of this work was to investigate the effect of different dopants on anatase-rutile phase transition and thus on their photocatalytic behavior. For that matter, samples TiO₂-*M* (*M* = Cu, Mn and V) having 5 at.% of dopants were prepared by 30 minutes hand-mixing of anatase and corresponding oxide (CuO, MnO₂ and V₂O₅) powders in an agate mortar following by heat treatment at 700 °C for 3 h. The powder of pure anatase phase was also treated at same conditions. TG/DTA was used to define thermal treatment, and the obtained samples were characterized by powder XRD method in order to reach phase compositions, unit cell parameters and crystallite sizes. Since in the case of undoped anatase only 3 wt.% of rutile was formed, the presence of dopants accelerated phase transition: 26 and 76 wt.% of rutile was obtained beside anatase in TiO₂-Mn and TiO₂-V, respectively, while complete anatase to rutile phase transition occurred in TiO₂-Cu. The least rutile quantity in TiO₂-Mn is related to the isovalency of Ti⁴⁺ and Mn⁴⁺ meaning that the incorporation of Mn⁴⁺ in TiO₂ is not followed by the formation of new defects, which are driving force for phase transition, as in the case of TiO₂-Cu. About 5 wt.% of the unreacted CuO was found in TiO₂-Cu, which is almost all introduced quantity of CuO. This can be related to the fact that the ionic radius of Cu²⁺ for octahedral environment (0.870 Å) is larger than that of Ti⁴⁺ (0.745 Å). As a result, Cu²⁺ ions can hardly be incorporated in TiO₂ comparing to smaller Mn⁴⁺ (0.670 Å) and V⁵⁺ (0.680 Å) although a small amount of Cu²⁺ surely was necessary to cause phase transition. Since no residues of initial oxides were found in TiO₂-Mn and TiO₂-V, it can be concluded that these metal ions were incorporated into anatase lattice. By comparing the calculated unit cell parameters of anatase mutually, the shrinkage along *c*-axis was revealed meaning the shortening of bond distances between *M*-O_{apical}. The photocatalytic activity of all synthesized samples will be tested since nanocrystalline samples were obtained according to determined crystallite sizes (55–90 nm).

КРИСТАЛНА СТРУКТУРА СРЕБРО(I) КОМПЛЕКСА СА N-МЕТИЛФЕНОТИАЗИНОМ

**Б. В. Пантовић^а, Т. П. Андрејевић^а, Д. П. Ашанин^б, Н. Љ. Стевановић^а,
В. Р. Марковић^а, Б. Ђ. Глишић^а**

^а Универзитет у Крагујевцу, Природно-математички факултет, Институт за хемију, Радоја Домановића 12, 34000 Крагујевац, Србија; ^б Универзитет у Крагујевцу, Институт за информационе технологије, Департман за природно-математичке науке, Јована Цвијића бб, 34000 Крагујевац, Србија
е-mail: bojana.pantovic@pmf.kg.ac.rs

У реакцији еквимоларних количина AgCF_3SO_3 и *N*-метилованог фенотиазина (*N*-Mephtz) у етанолу на собној температури добијен је мононуклеарни комплекс сребра(I), $[\text{Ag}(\text{N-Mephtz})_4]\text{CF}_3\text{SO}_3$. Синтетисани комплекс сребра(I) је окарактерисан применом спектроскопских (IR, ^1H и ^{13}C NMR) и електрохемијских метода (циклична волтаметрија, CV), док је кристална структура одређена применом рендгенске структурне анализе. У овом комплексу су четири *N*-Mephtz лиганда монодентатно координована за Ag(I) јон преко атома сумпора, формирајући комплексни $[\text{Ag}(\text{N-Mephtz})_4]^+$ катјон, док се трифлатни анјон (CF_3SO_3^-) уграђује у кристалну решетку као контра-анјон. Координациони број јона сребра(I) је четири, док је геометрија комплекса деформисано тетраедарска.

Захвалница

Ово истраживање је финансијски подржано од стране Фонда за науку Републике Србије, Пројекат бр. 7730810, Value-added biologics through eco-sustainable routes – BioECOLogics и Министарства за науку, технолошки развој и иновације Републике Србије (Уговори бр. 451-03-47/2023-01/200122 и 451-03-47/2023-01/200378).

CRYSTAL STRUCTURE OF A SILVER(I) COMPLEX WITH *N*-METHYLPHENOTHIAZINE

B. V. Pantović^a, **T. P. Andrejević**^a, **D. P. Ašanin**^b, **N. Lj. Stevanović**^a,
V. R. Marković^a, **B. Đ. Glišić**^a

^a *University of Kragujevac, Faculty of Science, Department of Chemistry, Radoja Domanovića 12, 34000 Kragujevac, Serbia;* ^b *University of Kragujevac, Institute for Information Technologies, Department of Science, Jovana Cvijića bb, 34000 Kragujevac, Serbia*

e-mail: bojana.pantovic@pmf.kg.ac.rs

In the reaction of equimolar amounts of AgCF_3SO_3 and *N*-methylphenothiazine (*N*-Mephtz) carried out in ethanol at room temperature, a new mononuclear silver(I) complex, $[\text{Ag}(\text{N-Mephtz})_4]\text{CF}_3\text{SO}_3$ was obtained. The synthesized silver(I) complex was characterized by spectroscopic (IR, ^1H and ^{13}C NMR) and electrochemical methods (cyclic voltammetry, CV), while its crystal structure was determined by single-crystal X-ray diffraction analysis. In this complex, four *N*-Mephtz ligands are monodentately coordinated to the Ag(I) ion through the sulphur atom, forming a cationic $[\text{Ag}(\text{N-Mephtz})_4]^+$ species, with triflate ion (CF_3SO_3^-) acting as a counter ion. Silver(I) ion is four-coordinate, while the geometry of the complex is distorted tetrahedral.

Acknowledgements

This research was supported by the Science Fund of the Republic of Serbia, Grant No. 7730810, Value-added biologics through eco-sustainable routes – BioECOLogics. This research has also received funding from the Ministry of Science, Technological Development and Innovation of the Republic of Serbia (Agreements No. 451-03-47/2023-01/200122 and 451-03-47/2023-01/200378).

СИНТЕЗА И СТРУКТУРА КОМПЛЕКСА Co(II) СА БИС(4-КАРБОКСИ-БЕНЗИЛ)АМОНИЈУМ-ХЛОРИДОМ И ПИРАЗИНОМ

Н. Д. Радновић^а, М. Г. Богдановић^а, С. Hawes^б, М. В. Родић^а

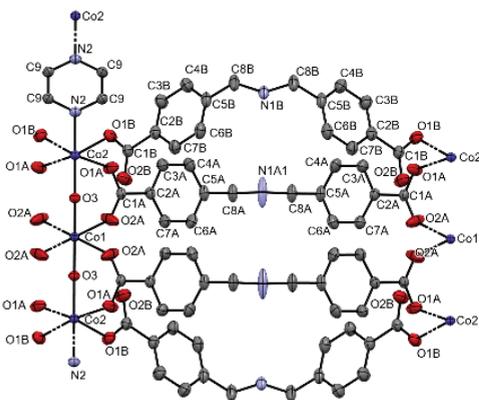
^а Универзитет у Новом Саду, Природно-математички факултет, Трг Д. Обрадовића 3, 21000 Нови Сад; ^б Универзитет у Килу, Школа хемијских и физичких наука, Кил, ST5 5BG, Уједињено Краљевство;
e-mail: nikola.radnovic@dh.uns.ac.rs

Реакцијом бис(4-карбокси-бензил)амонијум хлорида $[\text{H}_3\text{L}]\text{Cl}$ и пиразина са $\text{CoCl}_2 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$, у смеси диметилформаида и воде при солвотермалним условима, добијен је дипериодични координациони полимер $\{[\text{Co}_3(\text{HL})_4(\text{pyz})(\text{H}_2\text{O})_2]\text{Cl}_2 \cdot 8\text{H}_2\text{O}\}_n$.

Мономерна јединица комплексног катјона (слика 1) се састоји од три Co^{2+} , четири HL^- , два молекула воде и једног молекула пиразина.

Сви атоми $\text{Co}(\text{II})$ се налазе у октаедарском окружењу при чему се могу разликовати два хемијски нееквивалентна атома. Co1 је у екваторијалном положају премошћен од стране карбоксилатних група четири тетраденатна HL^- , а у аксијалном са два молекула воде који такође имају мостовну улогу спајајући Co1 са Co2 . С друге стране Co2 је, поред два тетраденатна, координован и са два бидентатна HL^- у екваторијалној равни који су међусобно у *cis* положају, док у аксијалном положају, уместо једног молекула воде, улогу моста има пиразин.

Овакав начин везивања за последицу има настанак дипериодичне порозне мреже (слика 2) која се пружа дуж оса *b* и *c* и међусобно паковање тих мрежа дуж осе *a*.



Одабрани кристалографски подаци и параметри утачавања: $\text{C}_{68}\text{H}_{84}\text{N}_6\text{O}_{26}\text{Cl}_2\text{Co}_3$, *Pnmm*, $a = 21,7113(2) \text{ \AA}$, $b = 13,2137(3) \text{ \AA}$, $c = 15,8666(2) \text{ \AA}$, $V = 4551,92(13) \text{ \AA}^3$, $Z = 4$, $R = 0,058$, $S = 1,038$ за 254 параметара и 6026 рефлексија.

Слика 1. Мономерна јединица комплексног катјона

Figure 1. Monomeric unit of complex cation

Истраживање је финансирао Покрајински секретаријат за високо образовање и научноистраживачку делатност Војводине (пројекат бр. 42-451-2197/2022).

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

N. D. Radnović^a, M. G. Bogdanović^a, C. Hawes^b, M. V. Rodić^a

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

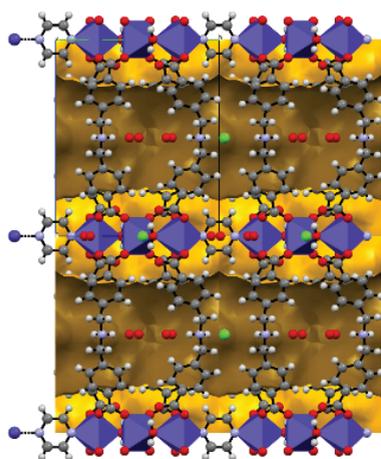
e-mail: nikola.radnovic@dh.uns.ac.rs

Reaction of bis(4-carboxy-benzyl)ammonium chloride [H₃L]Cl and pyrazine with CoCl₂·6H₂O, in dimethylformamide and water solution under solvothermal conditions, yielded the two-dimensional coordination polymer {[Co₃(HL)₄(pyz)(H₂O)₂]Cl₂·8H₂O}_n.

The monomer unit of the complex cation (figure 1) consists of three Co²⁺, four HL⁻, two water molecules and one pyrazine molecule.

All Co(II) atoms are in an octahedral environment where two chemically different atoms can be distinguished. Co1 is bridged in the equatorial position by the carboxylate groups of four tetradentate HL⁻, and in the axial position by two water molecules that also play a bridging role connecting Co1 to Co2. On the other hand, Co2, in addition to two tetradentate, is also coordinated with two bidentate HL⁻ in the equatorial plane, which are mutually in the *cis* position, while in the axial position, instead of one water molecule, the role of this bridge is played by pyrazine.

This type of bonding results in the formation of a two-dimensional network (figure 2) that extends along axes *b* and *c* and their mutual packing along the *a* axis.



Selected crystallographic data and refinement details: C₆₈H₈₄N₆O₂₆Cl₂Co₃, P *mmm*, *a* = 21.7113(2) Å, *b* = 13.2137(3) Å, *c* = 15.8666(2) Å, *V* = 4551.92(13) Å³, *Z* = 4, *R* = 0.058, *S* = 1.038, for 254 parameters and 6026 reflections.

Figure 2 Porosity of two-dimensional network along *bc* plane

Слика 2. Порозност дупериодичне мреже дуж *bc* равни

The authors acknowledge the financial support of the Provincial Secretariat for Higher Education and Scientific Research (Grant No. 42-451-2197/2022).

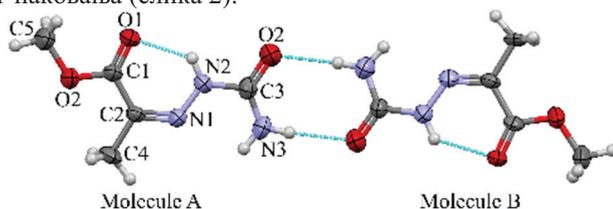
КРИСТАЛНА СТРУКТУРА Z-СЕМИКАРБАЗОНА МЕТИЛ ПИРУВАТА

М. В. Родић, В. Раичевић, В. М. Леовац, Н. Д. Банић

Универзитет у Новом Саду, Природно-математички факултет, Трг Доситеја Обрадовића 3, 21000 Нови Сад
e-mail: marko.rodic@dh.uns.ac.rs

Познато је да семикарбазон метилпирувата постоји у *E*-Hmps форми, из које се фотоизмеризацијом може добити *Z*-Hmps [1]. У овом раду је описана кристална структура *Z*-Hmps и дат увид у кристално паковање кроз прорачун енергија међумолекулских интеракција, енергијских мрежа и мапа молекулског електростатичког потенцијала. Асиметрична јединица *Z*-Hmps садржи два кристалографски независна, а хемијски идентична молекула (слика 1). Оба молекула су прилично планарна и њихове средње равни се секу под углом од $7,89(3)^\circ$. Конфигурација око $C2=N1$ двоструке везе је *Z* ($C1$ и $N2$ су међусобно у *cis* положају). *Z*-Hmps молекули се од *E*-Hmps молекула додатно разликују и по конформацији око $C1-C2$ и $C3-N2$ једноструких веза (*sin* код *Z*-Hmps и *anti* код *E*-Hmps). Кристалографски независни молекули показују добар ниво структурног поклапања. Амидни атом азота *Z*-Hmps молекула је донор водоника у интермолекулској водоничној вези и гради амид-амид супрамолекулски синтон, формирајући молекулски димер са најјачом кохезионом енергијом у кристалоној структури (-63 kJ mol^{-1}). Стога, са енергијске тачке гледишта, овај димер је основни структурни мотив кристалног паковања (слика 2).

Кристалографски
подаци: $C_5H_9N_3O_3$,
орторомбични
кристални систем,
просторна група *Fdd2*,
 $a = 36,4109(10) \text{ \AA}$,
 $b = 23,9057(9) \text{ \AA}$,
 $c = 7,0463(2) \text{ \AA}$,
 $R = 0,038$ и $S = 1,036$.



Слика 1. Структура асиметричне јединице *Z*-Hmps
Figure 1. Assymetric unit of *Z*-Hmps

[1] G. Just, S. Kim, *Can. J. Chem.*, **55** (2011) 427–434.

Истраживање је финансирао Покрајински секретаријат за високо образовање и научноистраживачку делатност Војводине (пројекат бр. 42-451-2197/2022).

CRYSTAL STRUCTURE OF Z-METHYL PYRUVATE SEMICARBAZONE

M. V. Rodić, V. Raičević, V. M. Leovac, N. D. Banić

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

e-mail: marko.rodic@dh.uns.ac.rs

Methyl pyruvate semicarbazone (Hmps) is known to exist in *E*-Hmps form, from which *Z*-Hmps can be obtained by photoisomerization [1]. Here we report crystal structure of *Z*-Hmps with insights into crystal packing from interaction energies, energy frameworks, and electrostatic potential maps. Asymmetric unit of *Z*-Hmps contains two chemically equivalent, but crystallographically independent molecules (Fig. 1). Both are quite planar, and their mean planes intersect at an angle of $7.89(3)^\circ$. Their configurations along C2=N1 double bond are designated as *Z* (C1 and N2 are mutually in *cis* arrangement). Moreover, *Z*-Hmps molecules differ from *E*-Hmps molecules additionally by conformation along C1–C2 and C3–N2 single bonds, which are designated as *syn* and *anti*, respectively. Crystallographically independent molecules show quite good fit. Amide nitrogen atom of *Z*-Hmps acts as an H-donor in the intermolecular hydrogen bond, forming amide–amide head-to-head supramolecular synthon, resulting in a molecular dimer with the strongest cohesion energy in the crystal structure (-63 kJ mol^{-1}), thus making this dimer the basic structural motif of the crystal structure (Fig. 2).

Crystallographic data: $\text{C}_5\text{H}_9\text{N}_3\text{O}_3$, orthorhombic crystal system, *Fdd2* space group, $a = 36.4109(10) \text{ \AA}$, $b = 23.9057(9) \text{ \AA}$, $c = 7.0463(2) \text{ \AA}$. Model refined to $R = 0.038$ and $S = 1.036$ against 3654 independent reflections.

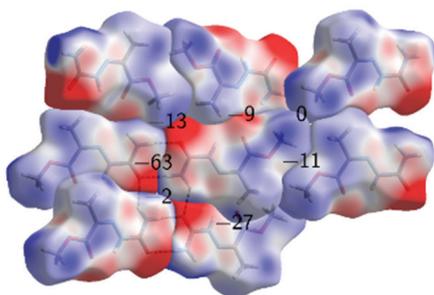


Figure 2. Segment of the crystal packing showing Hirshfeld surfaces mapped with molecular electrostatic potential and interaction energies in kJ mol^{-1}

Слика 2. Део кристалног паковања са молекулским електростатичким потенцијалом мапираним на Хиршфелдовим површинама и енергијама интеракција у kJ mol^{-1}

[1] G. Just, S. Kim, *Can. J. Chem.*, **55** (2011) 427–434.

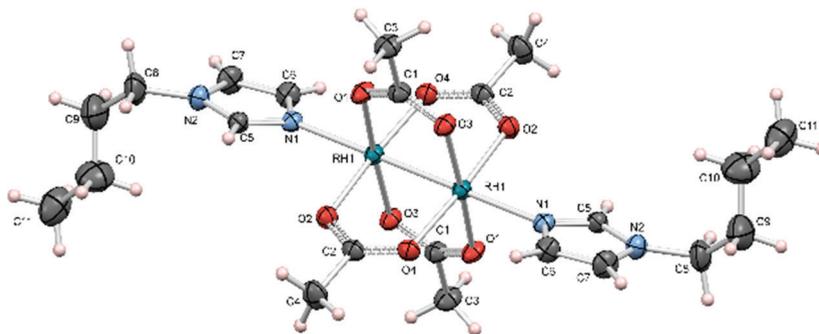
The authors acknowledge the financial support of the Provincial Secretariat for Higher Education and Scientific Research (Grant No. 42-451-2197/2022).

СИНТЕЗА И КРИСТАЛНА СТРУКТУРА [Rh₂(CH₃COO)₄(*N*-BuIm)] КОМПЛЕКСА

**И. П. Филиповић^а, М. Д. Радовановић^а, М. Б. Ђукић^а, О. Р. Клисурић^б,
Д. Љ. Стојковић^в, М. С. Ристић^а, З. Д. Матовић^а**

^а Универзитет у Крагујевцу, Природно-математички факултет, Радоја Домановића, 34000 Крагујевац, Република Србија; ^б Универзитет у Новом Саду, Природно-математички факултет, Институт за физику, Трг Доситеја Обрадовића 4, 21000 Нови Сад, Република Србија; ^в Универзитет у Крагујевцу, Институт за информационе технологије, Департман за природно-математичке науке, Јована Цвијића бб, 34000 Крагујевац, Република Србија
e-mail: ignjat.filipovic@pmf.kg.ac.rs

Овај комплекс је синтетисан по раније објављеној процедури примењеној за синтезу сличних комплекса [1]. [Rh₂(CH₃COO)₄(H₂O)₂] (0,0478 g; 0,10 mmol) је растворен у толуолу (10 mL) и у овај раствор је у капима додат *N*-бутилимидазол (0,0290 mL; 0,22 mmol). Добијена смеша је мешана 1 сат на собној температури до потпуног растварања реактанта. Раствор је упарен на собној температури до запремине од око 5 mL, а онда остављен преко ноћи у фрижидеру. Љубичасти кристали су процеђени под вакуумом и испрани толуолом и диетил етром. Добијени кристали представљају комплекс [Rh₂(CH₃COO)₄(*N*-BuIm)] (Слика 1). Кристалографски подаци: моноклинични систем, просторна група *P*2₁/*c*, величина кристала 0,25 × 0,27 × 0,40 mm³, *a* = 15,7537(6), *b* = 13,5490(5), *c* = 17,3153(7) Å, β = 110,366(5)°, *V* = 3464,9(3) Å³, *Z* = 4, ρ = 1,3234 g cm⁻³, μ = 0,992 mm⁻¹, *R* = 0,0629, *wR* = 0,1645.



Слика 1. Молекулска структура [Rh₂(CH₃COO)₄(*N*-BuIm)] комплекса

[1] A. A. Sidorov, G. G. Aleksandrov, E. V. Pakhmutova, A. Yu. Chernyadev, I. L. Eremenko, I. I. Moiseev, *Russ. Chem. Bull., Int. Ed.*, **54** (2005) 588–599.

SYNTHESIS AND CRYSTAL STRUCTURE OF [Rh₂(CH₃COO)₄(N-BuIm)] COMPLEX

I. P. Filipović^a, **M. D. Radovanović**^a, **M. B. Đukić**^a, **O. R. Klisurić**^b,
D. Lj. Stojković^c, **M. S. Ristić**^a, **Z. D. Matović**^a

^a University of Kragujevac, Faculty of Science, Radoja Domanovića 12, 34000 Kragujevac, Republic of Serbia; ^b University of Novi Sad, Faculty of Sciences, Department of Physics, Trg Dositeja Obradovića 4, 21000 Novi Sad, Republic of Serbia; ^c University of Kragujevac, Institut for Information Technologies, Department of science, Jovana Cvijića bb, 34000 Kragujevac, Republic of Serbia
e-mail: ignjat.filipovic@pmf.kg.ac.rs

This complex was synthesized following by the method described elsewhere [1]. To a solution of [Rh₂(CH₃COO)₄(H₂O)₂] (0.0478 g, 0.10 mmol) in toluene (10 mL) the *N*-butylimidazole (0.0290 mL, 0.22 mmol) was added. The resulting mixture was stirred at room temperature for 1 hour until the reagents were completely dissolved. The solution was left at room temperature to evaporate slowly to a volume of ~ 5 mL and then stored overnight in the refrigerator. The precipitated purple crystals were filtered off under vacuum and washed with toluene and diethyl ether. The obtained crystals represent a complex of [Rh₂(CH₃COO)₄(N-BuIm)] (Figure 1). Crystal data: monoclinic, space group *P*2₁/*c*, crystal size 0.25 × 0.27 × 0.40 mm³, *a* = 15.7537(6), *b* = 13.5490(5), *c* = 17.3153(7) Å, β = 110.366(5)°, *V* = 3464.9(3) Å³, *Z* = 4, ρ = 1.3234 g cm⁻³, μ = 0.992 mm⁻¹, *R* = 0.0629, *wR* = 0.1645.

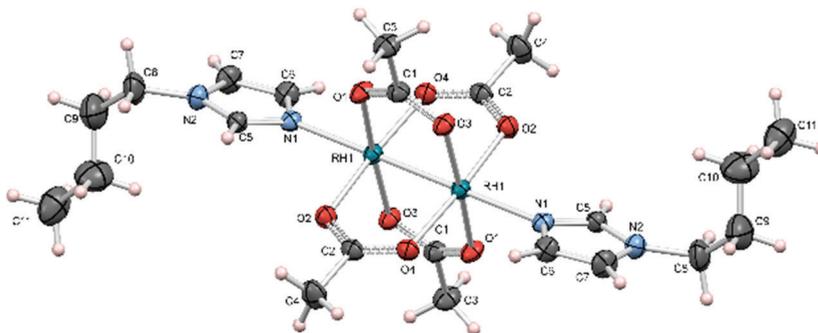


Figure 1. Molecular structure of [Rh₂(CH₃COO)₄(N-BuIm)] complex

[1] A. A. Sidorov, G. G. Aleksandrov, E. V. Pakhmutova, A. Yu. Chernyadev, I. L. Eremenko, I. I. Moiseev, *Russ. Chem. Bull., Int. Ed.*, **54** (2005) 588–599.

SYNTHESIS AND CHARACTERIZATION OF AZIDO Zn(II) COMPLEX WITH THE CONDENSATION PRODUCT OF 2-ACETYLTHIAZOLE AND THIOSEMICARBAZIDE

B. Čobeljić^a, **A. Pevec**^b, **M. Zlatar**^c, **M. Savić**^c, **M. Jevtović**^d

^a University of Belgrade - Faculty of Chemistry, Studentski trg 12-16, 11000 Belgrade, Serbia; ^b Faculty of Chemistry and Chemical Technology, University of Ljubljana, Večna pot 113, 1000 Ljubljana, Slovenia; ^c University of Belgrade - ICTM, Department of Chemistry, Njegoševa 12, 11000 Belgrade, Serbia; ^d Innovative Centre of the Faculty of Chemistry Ltd., Studentski trg 12-16, 11000 Belgrade, Serbia
e-mail: bozidar@chem.bg.ac.rs

The ligand (*E*)-2-(1-(thiazol-2-yl)ethylidene)hydrazine-1-carbothioamide (**HL**) was obtained from the condensation of 2-acetylthiazole and thiosemicarbazide. Upon reacting **HL** with Zn(BF₄)₂·6H₂O and NaN₃ in a solvent mixture of water/methanol, mononuclear Zn(II) complex **1** with the composition [ZnL(N₃)₂] was obtained. In complex **1**, Zn(II) is pentacoordinated with the thiazole nitrogen, the azomethine nitrogen, and thiolate sulfur atoms from the deprotonated hydrazone ligand, as well as with two azido ligands (Fig. 1). Complex **1** crystallises in the monoclinic crystal system with space group No.14 (*P*2₁/*c* cell setting). The unit cell of **1** contains four [ZnL(N₃)] asymmetric units. In complex **1**, the Zn(II) site shows a distorted geometry, almost midway between the square pyramid and trigonal bipyramid, established on the basis of a calculated τ_5 parameter of 0.46.

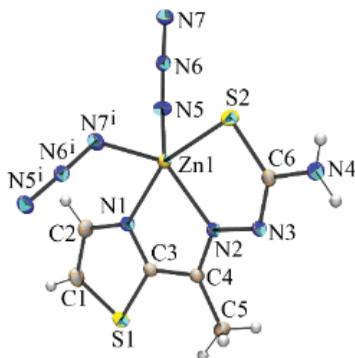


Figure 1. Molecular structure of complex **1**.

Acknowledgment: This research was supported by the Science Fund of the Republic of Serbia, #7750288, Tailoring Molecular Magnets and Catalysts Based on Transition Metal Complexes – TMMagCat.

**UTICAJ FAZNOG SASTAVA I TEMPERATURE
SINTEROVANJA NA FIZIČKA SVOJSTVA $\text{BaTiO}_3/\text{Ni}_x\text{Zn}_{1-x}\text{Fe}_2\text{O}_4$
($x = 0; 0,5; 1$) KOMPOZITA SINTETISANIH METODOM
TERMALNE DEKOMPOZICIJE**

**M. Šuljagić^a, I. Petronijević^b, M. Mirković^c, A. Kremenović^d, A. Džunuzović^e,
V. B. Pavlović^f, A. Kalezić-Glišović^g, Lj. Andelković^a**

^a Univerzitet u Beogradu – Institut za Hemiju, Tehnologiju i Metalurgiju, Njegoševa 12, 11000 Beograd, Srbija; ^b Univerzitet u Beogradu – Fizički fakultet, Studentski trg 12-16, 11000 Beograd, Srbija; ^c Univerzitet u Beogradu – Institut za nuklearne nauke „Vinča“, Mike Petrovića Alasa 12-14, 11351 Vinča, Beograd, Srbija; ^d Univerzitet u Beogradu – Rudarsko-geološki fakultet, Đušina 7, 11000 Beograd, Srbija; ^e Univerzitet u Beogradu – Institut za multidisciplinarna istraživanja, Volgina 15, 11050 Beograd, Srbija; ^f Univerzitet u Beogradu – Poljoprivredni fakultet, Nemanjina 6, 11080 Zemun, Beograd, Srbija; ^g Univerzitet u Kragujevcu – Fakultet tehničkih nauka, Svetog Save 65, 32000 Čačak

e-mail: marija.suljagic@ihtm.bg.ac.rs

U cilju ispitivanja uticaja faznog sastava i temperature sinterovanja na funkcionalna svojstva perovskit/spinel kompozita $\text{BaTiO}_3/\text{Ni}_x\text{Zn}_{1-x}\text{Fe}_2\text{O}_4$ ($x = 0; 0,5; 1$), NiFe_2O_4 , ZnFe_2O_4 , i $\text{Ni}_{0,5}\text{Zn}_{0,5}\text{Fe}_2\text{O}_4$ pripremljeni su *in situ* metodom termalne dekompozicije. U sintezi su korišćeni acetilacetonatni kompleksi kao prekursori. Dobijeni prahovi su komprimovani u tablete i sinterovani na 1150 °C i 1300 °C. Za detaljno ispitivanje faznog sastava i morfologije sintetisanih kompozita korišćene su metode rendgenske difrakcije praha (XRPD) i skenirajuće elektronske mikroskopije (SEM) spregnute sa energetska disperzivnom spektroskopijom (EDS). Ispitivana su i magnetna, dielektrična i feroelektrična svojstva sinterovanih kompozita. Ustanovljeno je da optimalni fazni sastav pronađen kod kompozita $\text{BaTiO}_3/\text{NiFe}_2\text{O}_4$ sinterovanog na 1150 °C dovodi do stabilnosti u širokom opsegu frekvencija. Optimalni fazni sastav pomenutog kompozita povoljno je uticao na funkcionalna svojstva kao što su niska provodnost i feroelektrično ponašanje koje se ogleda u zadovoljavajućem izgledu histerezisa [1]. Ova svojstva nedvosmisleno ukazuju da je kompozit $\text{BaTiO}_3/\text{NiFe}_2\text{O}_4$ odgovarajući izbor za dalja istraživanja posvećena primeni multiferoičnih materijala.

[1] M. Šuljagić, I. Petronijević, M. Mirković, A. Kremenović, A. Džunuzović, V. B. Pavlović, A. Kalezić-Glišović, L. Andjelković, *Inorganics*, **11** (2023) 51.

BaTiO₃/Ni_xZn_{1-x}Fe₂O₄ (x = 0, 0.5, 1) COMPOSITES SYNTHESIZED BY THERMAL DECOMPOSITION: THE INFLUENCE OF PHASE COMPOSITION AND SINTERING TEMPERATURE ON THEIR PHYSICAL PROPERTIES

M. Šuljagić^a, I. Petronijević^b, M. Mirković^c, A. Kremenović^d, A. Džunuzović^e, V. B. Pavlović^f, A. Kalezić-Glišović^g, L. Andjelković^a

^a University of Belgrade-Institute of Chemistry, Technology and Metallurgy, Department of Chemistry, Njegoševa 12, 11000 Belgrade, Serbia; ^b Faculty of Physics, University of Belgrade, Studentski Trg 12-16, 11000 Belgrade, Serbia; ^c University of Belgrade – “Vinča” Institute of Nuclear Sciences, Mike Petrovića Alasa 12-14, 11351 Vinča, Belgrade, Serbia; ^d University of Belgrade - Faculty of Mining and Geology, Djušina 7, 11000 Belgrade, Serbia; ^e University of Belgrade - Institute for Multidisciplinary Research, Volgina 15, 11050 Belgrade, Serbia; ^f University of Belgrade - Faculty of Agriculture, Nemanjina 6, 11080 Zemun, Belgrade, Serbia; ^g University of Kragujevac - Faculty of Technical Sciences, 32000 Čačak, Serbia
e-mail: marija.suljagic@ihtm.bg.ac.rs

In order to examine the influence of phase composition and sintering temperature on the functional properties of perovskite/spinel composites, BaTiO₃/Ni_xZn_{1-x}Fe₂O₄ (x = 0, 0.5, 1), NiFe₂O₄, ZnFe₂O₄, and Ni_{0.5}Zn_{0.5}Fe₂O₄ were *in situ* prepared by thermal decomposition onto BaTiO₃ surface. Acetylacetonate complexes were used as the precursors. The obtained powders were compressed to pellets and sintered at 1150 °C and 1300 °C. X-ray powder diffraction (XRPD) and scanning electron microscopy (SEM) coupled with electron dispersive spectroscopy (EDS) were used for the comprehensive investigation of phase composition and morphology. The magnetic, dielectric, and ferroelectric properties were performed in detail. The optimal phase composition was found in the BaTiO₃/NiFe₂O₄ composite sintered at 1150 °C, which resulted in a wide frequency range stability. Furthermore, particular phase composition led to suitable properties such as low conductivity and ideal-like hysteresis loop behavior [1]. These functional properties of BaTiO₃/NiFe₂O₄ make this composite a “material of choice” for further studies on applications of multiferroic devices.

[1] M. Šuljagić, I. Petronijević, M. Mirković, A. Kremenović, A. Džunuzović, V. B. Pavlović, A. Kalezić-Glišović, L. Andjelković, *Inorganics*, **11** (2023) 51.

ПОСТЕРСКА САОПШТЕЊА

POSTER PRESENTATIONS

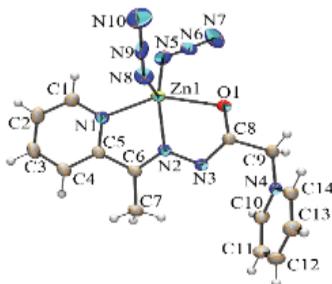
СИНТЕЗА И КАРАКТЕРИЗАЦИЈА АЗИДО КОМПЛЕКСА Zn(II) СА КОНДЕНЗАЦИОНИМ ПРОИЗВОДОМ 2-АЦЕТИЛПИРИДИНА И ЖИРАРОВОГ П РЕАГЕНСА

К. Анђелковић^а, **А. Певец**^б, **Д. Митић**^в, **М. Јевтовић**^в, **М. Савић**^г,
Н. Стевановић^а

^а Универзитет у Београду - Хемијски факултет, Студентски трг 12-16, 11000 Београд, Србија; ^б Факултет за хемију и хемијску технологију, Универзитет у Љубљани, Вечна пот 113, 1000 Љубљана, Словенија; ^в Иновациони центар Хемијског факултета д.о.о., Студентски трг 12-16, 11000 Београд, Србија; ^г Универзитет у Београду - ИХТМ, Центар за хемију, Његошева 12, 11000 Београд, Србија
e-mail: kka@chem.bg.ac.rs

Мононуклеарни азидо комплекс Zn(II), [ZnL(N₃)₂] (**1**), добијен је у реакцији Zn(BF₄)₂·6H₂O, NaN₃ и кондензационог производа 2-ацетилпиридина и Жираровог П реагенса (HLCl) у молском односу 1 : 4 : 1 у смеси растварача ацетонитрил/метанол/вода. У комплексу **1** јон Zn(II) је пентакоординован NNO доносним сетом атома лиганда (**L**) и са два азидо лиганда (Слика 1). Лиганд (**L**) је координован у депротонованом, формално неутралном, цвистер-јонском облику, преко пиридинског азота, азометинског азота и карбонилног кисеоника.

Кристалографски подаци за **1**: C₁₄H₁₄N₁₀OZn, *M_r* = 403,72, величина кристала 0,50×0,10×0,10 mm, моноклинични кристални систем, просторна група *P*2₁/*c*, *a* = 12,3417(5), *b* = 8,9990(5), *c* = 15,3451(6) Å; *V* = 1671,99(13) Å³, *Z* = 4, *D_c* = 1,604 g cm⁻³, *R_{int}* = 0,0320, *R*[*I* > 2σ(*I*)] = 0,0331 и *wR*₂ = 0,0823 (сви подаци), *S* = 1,052.



Слика 1. Молекулска структура комплекса **1**.

Захвалница: Овај пројекат је финансиран од стране Фонда за науку Републике Србије, #7750288, Tailoring Molecular Magnets and Catalysts Based on Transition Metal Complexes – TMMagCat.

SYNTHESIS AND CHARACTERIZATION OF AZIDO Zn(II) COMPLEX WITH THE CONDENSATION PRODUCT OF 2-ACETILPYRIDINE AND GIRARD'S P REAGENT

K. Andelković^a, A. Pevec^b, D. Mitić^c, M. Jevtović^c, M. Savić^d, N. Stevanović^a

^a University of Belgrade - Faculty of Chemistry, Studentski trg 12-16, 11000 Belgrade, Serbia; ^b Faculty of Chemistry and Chemical Technology, University of Ljubljana, Večna pot 113, 1000 Ljubljana, Slovenia; ^c Innovative Centre of the Faculty of Chemistry Ltd., Studentski trg 12-16, 11000 Belgrade, Serbia; ^d University of Belgrade - ICTM, Department of Chemistry, Njegoševa 12, 11000 Belgrade, Serbia
e-mail: kka@chem.bg.ac.rs

In the reaction of **HLCI** with $\text{Zn}(\text{BF}_4)_2 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$ and NaN_3 in molar ratio 1 : 1 : 4 in acetonitrile/water/methanol mixture of solvents, an mononuclear Zn(II) complex (**1**) was obtained, with composition $[\text{ZnL}(\text{N}_3)_2]$. In complex **1**, the ligand is coordinated in deprotonated, formally neutral, zwitterionic form to Zn(II) ion through the pyridine nitrogen, the imine nitrogen, and the carbonyl oxygen atoms, forming a pentacoordinated complex (Fig. 1).

Crystal data of **1**: $\text{C}_{14}\text{H}_{14}\text{N}_{10}\text{OZn}$, $M_r = 403.72$, crystal size $0.50 \times 0.10 \times 0.10$ mm, monoclinic crystal system, space group $P 2_1/c$, $a = 12.3417(5)$, $b = 8.9990(5)$, $c = 15.3451(6)$ Å; $V = 1671.99(13)$ Å³, $Z = 4$, $D_c = 1.604$ g cm⁻³, $R_{\text{int}} = 0.0320$, $R[I > 2\sigma(I)] = 0.0331$ and $wR_2 = 0.0823$ (all data), $S = 1.052$.

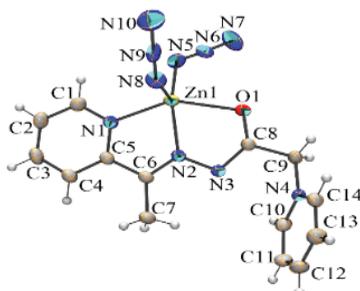


Figure 1. Molecular structure of complex **1**.

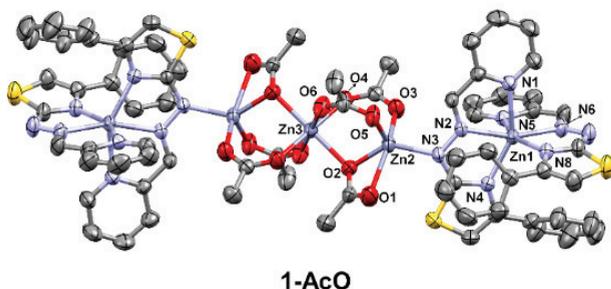
Acknowledgment: This research was supported by the Science Fund of the Republic of Serbia, #7750288, Tailoring Molecular Magnets and Catalysts Based on Transition Metal Complexes – TMMagCat.

МОНОНУКЛЕАРНИ И ПЕНТАНУКЛЕАРНИ Zn(II) КОМПЛЕКСИ СА ХИДРАЗОНИЛ-ТИАЗОЛИМА: СТРУКТУРНА И ФОТОФИЗИЧКА СТУДИЈА

Ј. Арашков ^а, П. Ристић ^а, А. Вишњевац ^б, Ј. М. López-de-Luzuriaga ^в,
Т. Годоровић ^а, Н. Филиповић ^г

^а Универзитет у Београду – Хемијски факултет, Студентски трг 12-16, Београд, Србија; ^б Институт Руђер Бошковић, Бјеничка цеста 54, Загреб, Хрватска; ^в Universidad de La Rioja, Centro de Investigación en Síntesis Química (CISQ), Complejo Científico-Tecnológico, 26004 Logroño, España; ^г Универзитет у Београду – Пољопривредни факултет, Немањина 6, Београд-Земун, Србија
e-mail: nenadf@agrif.bg.ac.rs

Јефтина, нискотоксична координациона једињења Zn(II) представљају обећавајуће кандидате за различите примене, укључујући фотолуминесцентне материјале. У овом раду су представљена два комплекса Zn(II) са хидразонил-тиазолским лигандима на бази пиридина (HLS¹ и HLS²), који су синтетсани директном реакцијом лиганата и Zn(CH₃COO)₂·2H₂O. Пентануклеарни комплекс [Zn₅(HLS¹)₄(CH₃COO)₆] (**1-AcO**; Слика 1) кристалише у моноклиничној *P*₂₁/*n* просторној групи са половином молекула по асиметричној јединици, при чему се централни јон Zn(II) налази на центру инверзије (Викофово слово *c*). Мононуклеарни комплекс [Zn(HLS²)(CH₃COO)(H₂O)] (**2-AcO**; Слика 2) кристалише у триклинничној *P*-1 просторној групи са једним молекулом по асиметричној јединици. Експеримент дифракције X-зрака са узорка праха је потврдио да су добијени једнофазни производи. Урађена је детаљна анализа типова и енергетске дистрибуције интермолекулских интеракција. Симетричан комплекс **1-AcO** није фотолуминесцентан, за разлику од комплекса **2-AcO**. Квантно-механички прорачуни теорије функционала густине (DFT) и временски зависне теорије функционала густине (TD-DFT) су расветлили порекло фотолуминесцентних својстава комплекса **2-AcO**.



Слика 1. ORTEP приказ молекулске структуре **1-AcO**. Термални елипсоиди су приказани са 30 % вероватноће.

Figure 1. ORTEP drawing of molecular structure of **1-AcO**. Thermal ellipsoids are shown at 30 % of probability level.

MONONUCLEAR AND PENTANUCLEAR Zn(II) COMPLEXES WITH HYDRAZONYL-THIAZOLES: STRUCTURAL AND PHOTOPHYSICAL STUDY

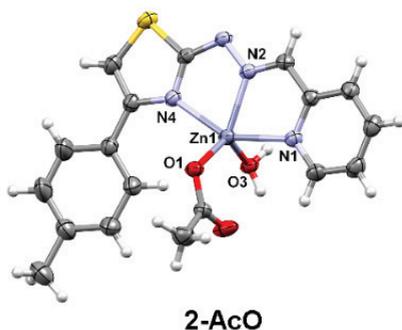
J. Araškov ^a, P. Ristić ^a, A. Višnjevac ^b, J. M. López-de-Luzuriaga ^c, T. Todorović ^a, N. Filipović ^d

^aUniversity of Belgrade – Faculty of Chemistry, Studentski trg 12-16, Belgrade, Serbia;

^bInstitute Ruđer Bošković, Bjenička cesta 54, Zagreb, Croatia; ^cDepartamento de Química, Universidad de La Rioja, Centro de Investigación en Síntesis Química (CISQ), Complejo Científico-Tecnológico, 26004 Logroño, Spain; ^dUniversity of Belgrade – Faculty of Agriculture, Nemanjina 6, Belgrade – Zemun, Serbia.

e-mail: nenadf@agrif.bg.ac.rs

Inexpensive, low-toxic Zn(II) coordination compounds are represent promising candidates for various applications, including photoluminescent materials. In this study we report two zinc(II) complexes with thiazolyl-hydrazone-based ligands (HLS¹ and HLS²), which were synthesized by direct reaction of the ligands with Zn(CH₃COO)₂·2H₂O. Pentanuclear complex [Zn₅(HLS¹)₄(CH₃COO)₆] (**1-AcO**; Figure 1) crystallizes in monoclinic *P*2₁/*n* space group with half of the molecule in the asymmetric unit, where Zn3 atoms lie at inversion center (Wyckoff letter *c*). Mononuclear [Zn(HLS²)(CH₃COO)(H₂O)] (**2-AcO**; Figure 2) crystallizes in triclinic *P*-1 space group with one molecule in the asymmetric unit (Figure 2). Powder X-ray diffraction experiments confirmed that single-phase products were obtained. A detailed analysis of types and energy distribution of intermolecular interactions was performed. The symmetrical **1-AcO** does not exhibit photophysical properties, unlike asymmetrical **2-AcO**. Quantum-mechanical calculations of density functional theory (DFT) and time-dependent DFT provided insight into origin of the photoluminescent properties of **2-AcO**.



Слика 2. ORTEP приказ молекулске структуре **2-AcO**. Термални елипсоиди су приказани са 30 % вероватноће.

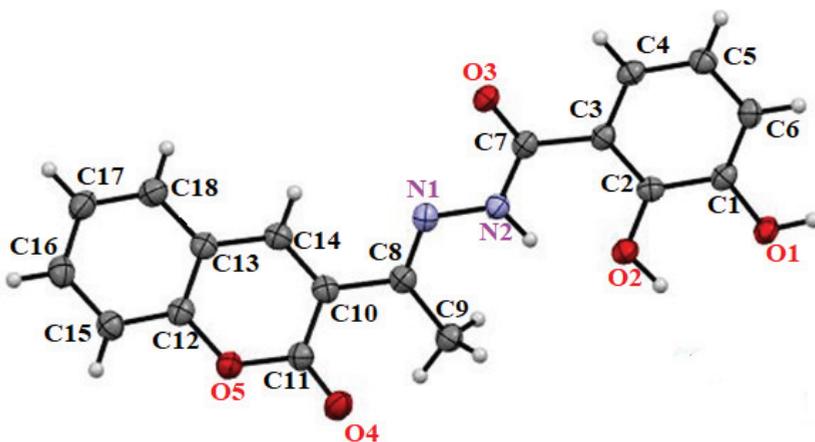
Figure 2. ORTEP drawing of molecular structure of **2-AcO**. Thermal ellipsoids are shown at 30 % of probability level.

SINTEZA I KRISTALNA STRUKTURA (*E*)-2,3-DIHIDROKSI-*N'*-(1-(2-OKSO-2*H*-HROMEN-3-IL)ETILIDEN)BENZOHIIDRAZIDA

E. H. Avdović, D. Simijonović, Ž. B. Milanović, M. Antonijević, D. Milenković, Z. S. Marković

Institut za informacione tehnologije, Departman za prirodno matematičke nauke, Univerzitet u Kragujevcu, Jovana Cvijića bb, 34000 Kragujevac, Srbija
e-mail: edina.avdovic@pmf.kg.ac.rs

Novi *N*-acilhidrazonski derivat kumarina (*E*)-2,3-dihidroksi-*N'*-(1-(2-okso-2*H*-hromen-3-il)etiliden)benzohidrazid (Slika 1) je sintetisan u reakciji 3-acetilkumarina (0,001 mol) i 2,3-dihidroksibenzohidrazida (0,001 mol) [1]. Ovo jedinjenje je dobijeno u odličnom prinosu od 95% korišćenjem molekuskog joda kao katalizatora, u etanolu na sobnoj temperaturi tokom 30 min. Nakon završene reakcije čist proizvod je izolovan samo filtriranjem. Rekrystalizacija je vršena iz toplog etanola, gde su dobijeni svetlo braon monokristali. Struktura dobijenog jedinjenja je potvrđena primenom rendgenske strukturne analize. Kristalografski podaci: veličina kristala 0,24 x 0,04 x 0,04 mm³, $a = 4,4116(4)$ Å, $b = 17,2748(15)$ Å, $c = 23,844(2)$ Å, $\alpha = 90^\circ$, $\beta = 90^\circ$, $\gamma = 90^\circ$, $V = 1817,1(3)$ Å³, $Z = 2$, $\rho_x = 1,434$ g/cm³, $\mu = 0,971$ mm⁻¹, $R1 = 0,0353$, $wR2 = 0,0779$.



Slika 1. Kristalna struktura jedinjenja (*E*)-2,3-dihidroksi-*N'*-(1-(2-okso-2*H*-hromen-3-il)etiliden)benzohidrazida

[1] A. Pangal, J. A. Shaikh, G. Muiz, V. Mane, K. Ahmed, *Int. Res. J. Pharm.*, **4** (2013) 108–110.

Ovaj rad je podržalo Ministarstvo nauke, tehnološkog razvoja i inovacija Republike Srbije (Ugovor br. 451-03-68/2022-14/200378).

SYNTHESIS AND CRYSTAL STRUCTURE OF (*E*)-2,3-DIHYDROXY-*N'*-(1-(2-OXO-2*H*-CHROMEN-3- -YL)ETHYLIDENE) BENZOHYDRAZIDE

**E. H. Avdović, D. Simijonović, Ž. B. Milanović, M. Antonijević, D. Milenković,
Z. S. Marković**

*Institut for Information Technologies, Department of Science, University of Kragujevac,
Jovana Cvijića bb, 34000 Kragujevac, Serbia*
e-mail: edina.avdovic@pmf.kg.ac.rs

A new coumarin *N*-acylhydrazone derivative (*E*)-2,3-dihydroxy-*N'*-(1-(2-oxo-2*H*-chromen-3-yl)ethylidene)benzohydrazide (Figure 1) was synthesized by the reaction of 3-acetylcoumarin (0.001 mol) and 2,3-dihydroxybenzohydrazide (0.001 mol) [1]. This compound was obtained in excellent yield (95%) in the presence of molecular iodine as catalyst in ethanol and at room temperature for 30 min. Once the reaction was completed, the pure product was isolated only by filtration. After recrystallization from hot ethanol, light brown single crystals were obtained. The structure of the obtained compound was confirmed using X-ray structural analysis. Crystallographic data: crystal dimensions 0.24 x 0.04 x 0.04 mm³, $a = 4.4116(4)$ Å, $b = 17.2748(15)$ Å, $c = 23.844(2)$ Å, $\alpha = 90^\circ$, $\beta = 90^\circ$, $\gamma = 90^\circ$, $V = 1817.1(3)$ Å³, $Z = 2$, $\rho_x = 1.434$ g/cm³, $\mu = 0.971$ mm⁻¹, $R1 = 0.0353$, $wR2 = 0.0779$.

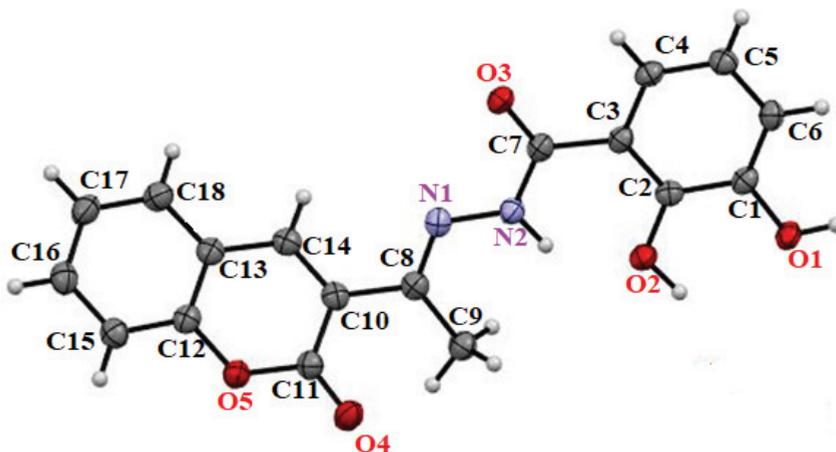


Figure 1: The crystal structure of (*E*)-2,3-dihydroxy-*N'*-(1-(2-oxo-2*H*-chromen-3-yl)ethylidene)benzohydrazide

[1] A. Pangal, J. A. Shaikh, G. Muiz, V. Mane, K. Ahmed, *Int. Res. J. Pharm.*, **4** (2013) 108–110.

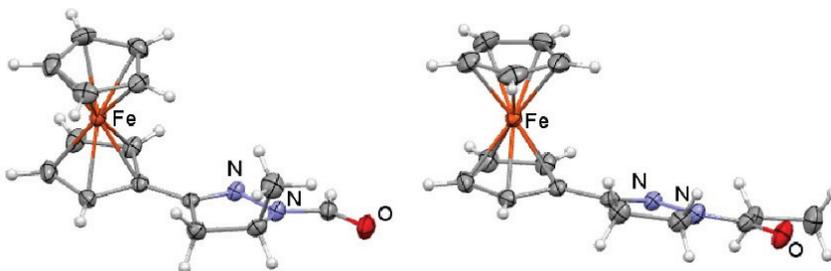
This work was supported by the Serbian Ministry of Science, Technological Development and Innovation (Agreement No. 451-03-68/2022-14/200378).

МАЛЕ СТРУКТУРНЕ МОДИФИКАЦИЈЕ МОГУ ДОВЕСТИ ДО ПОТПУНО РАЗЛИЧИТИХ ИНТЕРМОЛЕКУЛСКИХ ИНТЕРАКЦИЈА: СЛУЧАЈ ФЕРОЦЕНИЛ *N*-АЦИЛ ПИРАЗОЛИНА

**Г. А. Богдановић^а, С. Б. Новаковић^а, З. Ратковић^б, С. Љ. Матић^в,
Ј. Мушкиња^в**

^а 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; ^б Департман за хемију, Природно-математички факултет, Универзитет у Крагујевцу, Радоја Домановића 12, Крагујевац, Србија; ^в Департман за науку, Институт за информационе технологије, Универзитет у Крагујевцу, Јована Цвијића бб, Крагујевац, Србија
e-mail: goranb@vin.bg.ac.rs

Серија нових фероценил-пиразолина је добијена у реакцији фероценил-халкона и њихових аналога, са хидразин-хидратом у присуству одговарајуће карбоксилне киселине. Структурна анализа монокристала *N*-формил, *N*-ацетил [1] и *N*-пропаноил деривата пиразолина указала је на интересантну способност ових једињења да формирају веома различите интермолекулске интеракције, упркос израженој структурној сличности. Међу 28 димера са енергијом стабилизације, $E_{\text{TOT}} < -15$ kJ/mol [2], формираних у ове четири кристалне структуре, ниједан димер није исти за било који пар структура. Такође, не постоји интеракција која је идентична по саставу за све четири структуре. Ови резултати указују на изузетну флексибилност фероценил *N*-ацил пиразолина у формирању интермолекулских интеракција. Једињења показују сличну антиоксидативну активност, упоредиву са кверцетином. Слична активност ових пиразолина се може објаснити њиховом прилагодљивошћу за различите интермолекулске интеракције.



[1] A. Burmuđžija, J. Muškinja, Z. Ratković, M. Kosanić, B. Ranković, S. B. Novaković, G. A. Bogdanović, *Inorg. Chim. Acta.*, **471** (2018) 570–576.

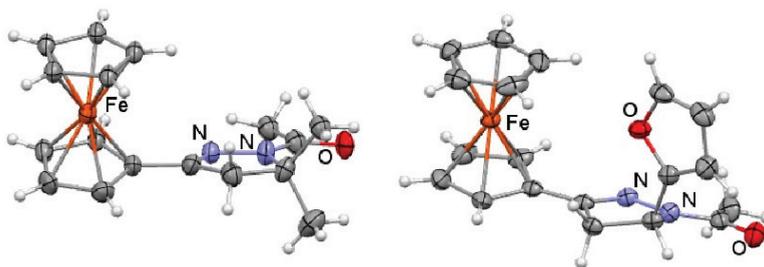
[2] P. R. Spackman, M. J. Turner, J. J. McKinnon, S. K. Wolff, D. J. Grimwood, D. Jayatilaka, M. A. Spackman, *J. Appl. Cryst.*, **54** (2021) 1006–1011.

SMALL STRUCTURAL MODIFICATIONS CAN RESULT IN COMPLETELY DIFFERENT INTERMOLECULAR INTERACTIONS: A CASE OF THE FERROCENYL *N*-ACYL PYRAZOLINES

G. A. Bogdanović^a, S. B. Novaković^a, Z. Ratković^b, S. Lj. Matić^c, J. Muškinja^c

^a Laboratory of Theoretical Physics and Condensed Matter Physics, Vinča Institute of Nuclear Sciences - National Institute of the Republic of Serbia, University of Belgrade, Belgrade, Serbia; ^b Department of Chemistry, Faculty of Sciences, University of Kragujevac, Radoja Domanovića 12, Kragujevac, Serbia; ^c Department of Sciences, Institute for Information Technologies, University of Kragujevac, Jovana Cvijića bb, Kragujevac, Serbia
e-mail: goranb@vin.bg.ac.rs

The series of new ferrocenyl pyrazolines have been synthesized by the reaction of ferrocenyl chalcones and their analogues with hydrazine hydrate in the presence of corresponding carboxylic acid. Single-crystal X-ray crystallographic analysis of *N*-formyl, *N*-acetyl [1] and *N*-propanoyl pyrazoline derivatives revealed interesting ability of these compounds to form very different intermolecular interactions, despite their pronounced structural similarity. Amongst 28 dimers formed in four crystal structures with the stabilization energy $E_{\text{tot}} < -15$ kJ/mol [2], not a single dimer is the same for any pair of structures. Also, there is no interaction which is identical in composition for all four structures. These findings demonstrate the exceptional flexibility of ferrocenyl *N*-acyl pyrazolines in formation of intermolecular interactions. The compounds show similar antioxidant activity, comparable to quercetin. The similar activity of these pyrazolines can be explained by their flexibility for different intermolecular interactions.



[1] A. Burmudžija, J. Muškinja, Z. Ratković, M. Kosanić, B. Ranković, S. B. Novaković, G. A. Bogdanović, *Inorg. Chim. Acta.*, **471** (2018) 570–576.

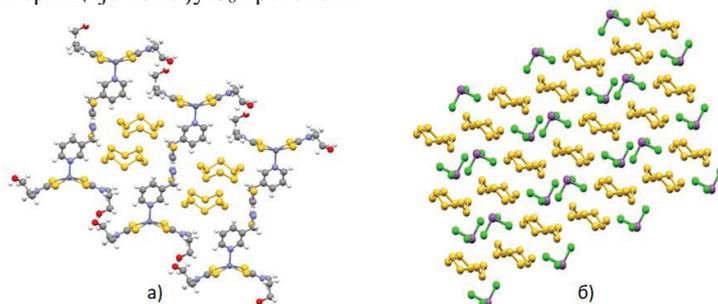
[2] P. R. Spackman, M. J. Turner, J. J. McKinnon, S. K. Wolff, D. J. Grimwood, D. Jayatilaka, M. A. Spackman, *J. Appl. Cryst.*, **54** (2021) 1006–1011.

ПАРАЛЕЛНО-СМАКНУТЕ ИНТЕРАКЦИЈЕ ИЗМЕЂУ S_8 ПРСТЕНОВА У КРИСТАЛНИМ СТРУКТУРАМА: СВЕОБУХВАТНА ТЕОРИЈСКА СТУДИЈА

Д. С. Кретић^а, В. Б. Медаковић^а, И. С. Вељковић^б

^а Универзитет у Београду – Хемички факултет, Студентски трг 12-16, 11000 Београд, Србија; ^б Универзитет у Београду – Институт за хемију, технологију и металургију – Институт од националног значаја за Републику Србију; e-mail: ivana.veljkovic@ihtm.bg.ac.rs

Нековалентне интеракције између S_8 молекула су примећене у кристалним структурама похрањеним у Кембричкој бази структурних података (CSD) као и у бази података неорганских кристалних структура (ICSD). Анализа геометријских параметара је показала да у овим кристалним структурама S_8 молекули заузимају паралелно-смакнуту оријентацију као што је приказано на слици 1. Овакав међусобни положај S_8 прстенова доводи до формирања слојева у којима постоје стекинг интеракције између S_8 прстенова.



Слика 1. Паралелно-смакнуте интеракције између S_8 прстенова у а) кристалној структури HENMOY и б) једињењу Cl_3S_8Sb (ICSD ID: 35741).

Квантнохемијски прорачуни потврђују да паралелно-смакнута оријентација представља најстабилнију геометрију за два S_8 молекула. Интеракција у S_8 димеру је веома јака са енергијом од -8.70 kcal/mol, израчунато на CCSD(T)/CBS нивоу. SAPT 2+(3) анализа декомпозиције енергије је показала да је дисперзија главна привлачна сила између два S_8 молекула док је допринос електростатике такође значајан.

Ово истраживање је финансијски подржано од стране Министарства науке, технолошког развоја и иновација Републике Србије (уговор бр: 451-03-47/2023-01/200026 и 451-03-47/2023-01/200168).

PARALLEL-DISPLACED INTERACTIONS BETWEEN S_8 RINGS IN CRYSTAL STRUCTURES: COMPREHENSIVE THEORETICAL STUDY

D. S. Kretić ^a, V. B. Medaković ^a, I. S. Veljković ^b

^a University of Belgrade – Faculty of Chemistry, Studentski trg 12-16, 11000 Belgrade, Serbia; ^b University of Belgrade – Institute of Chemistry, Technology and Metallurgy – National Institute of the Republic of Serbia, Njegoševa 12, 11000 Belgrade, Serbia; e-mail: ivana.veljkovic@ihtm.bg.ac.rs

Noncovalent interactions between S_8 molecules have been observed in crystal structures obtained from the Cambridge Structural Database (CSD) and the Inorganic Crystal Structure Database (ICSD). Analysis of geometric parameters shows that S_8 molecules adopt a parallel-displaced orientation in these crystal structures, as presented in Figure 1. This relative position of the S_8 rings results in the formation of layers consisting of stacking interactions between the S_8 rings.

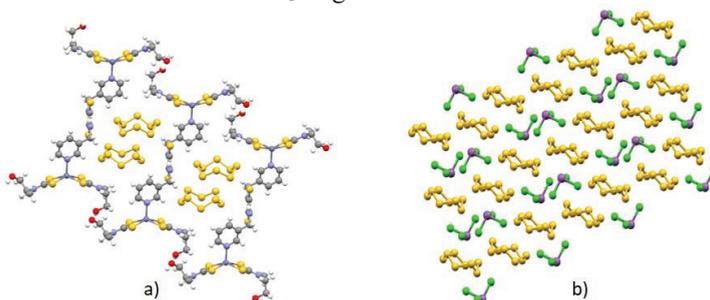


Figure 1. Parallel-displaced interactions between S_8 rings in a) HEHMOY crystal structure and b) Cl_3S_8Sb compound (ICSD ID: 35741).

Quantum chemical calculations confirm that the parallel-displaced orientation represents the most stable geometry for two S_8 molecules. The interaction in S_8 dimer is very strong with an energy of -8.70 kcal/mol, calculated on CCSD(T)/CBS level. According to the energy decomposition analysis using the SAPT 2+(3) method, the dispersion force is the main attractive force between two S_8 molecules, while the contribution of electrostatics is also significant.

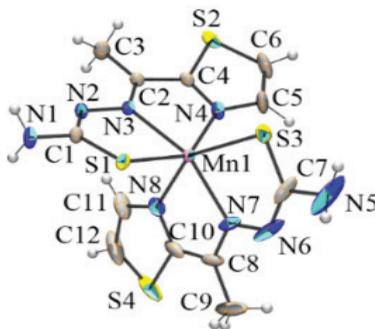
This research has been financially supported by the Ministry of Science, Technological Development and Innovation of Republic of Serbia (Contract No: 451-03-47/2023-01/200026 and 451-03-47/2023-01/200168).

СИНТЕЗА И КАРАКТЕРИЗАЦИЈА КОМПЛЕКСА Mn(II) СА КОНДЕНЗАЦИОНИМ ПРОИЗВОДОМ 2-АЦЕТИЛТИАЗОЛА И ТИОСЕМИКАРБАЗИДА

М. Јевтовић^а, **А. Певец**^б, **М. Шумар Ристовић**^в, **М. Савић**^г,
Д. Митић^а, **Н. Стевановић**^в

^а Иновациони центар Хемијског факултета д.о.о., Студентски трг 12-16, 11000 Београд, Србија; ^б Факултет за хемију и хемијску технологију, Универзитет у Љубљани, Вечна пот 113, 1000 Љубљана, Словенија; ^в Универзитет у Београду - Хемијски факултет, Студентски трг 12-16, 11000 Београд, Србија; ^г Универзитет у Београду - ИХТМ, Центар за хемију, Његошева 12, 11000 Београд, Србија
e-mail: mima@chem.bg.ac.rs

У реакцији лиганда **HL**, (*E*)-2-(1-(тиазол-2-ил)етилиден)хидразин-1-карботиоамид, са $MnCl_2 \cdot 4H_2O$ у молском односу 1 : 1 у смеси метанол/вода добијен је комплекс **1**, опште формуле $[MnL_2]$. Комплекс **1** кристалише у триклиничном кристалном систему просторне групе *P*-1. Асиметрична јединица комплекса **1** састоји се од два кристалографски независна молекула комплекса $[MnL_2]$. Јон Mn(II) је хексакоординован преко два тридентатно депротонована лиганда која садрже NNS доносници атома. Геометрија око централног металног јона је искривљена тригонална-призма (Слика 1).



Слика 1. Молекулска структура комплекса **1**.

Захвалница: Овај пројекат је финансиран од стране Фонда за науку Републике Србије, #7750288, Tailoring Molecular Magnets and Catalysts Based on Transition Metal Complexes – TMMagCat.

SYNTHESIS AND CHARACTERIZATION OF Mn(II) COMPLEX WITH THE CONDENSATION PRODUCT OF THIOSEMICARBAZIDE AND 2-ACETYLTHIAZOLE

M. Jevtović^a, A. Pevec^b, M. Šumar Ristović^c, M. Savić^d, D. Mitić^a, N. Stevanović^c

^aInnovative Centre of the Faculty of Chemistry Ltd., Studentski trg 12-16, 11000 Belgrade, Serbia; ^bFaculty of Chemistry and Chemical Technology, University of Ljubljana, Večna pot 113, 1000 Ljubljana, Slovenia; ^cUniversity of Belgrade - Faculty of Chemistry, Studentski trg 12-16, 11000 Belgrade, Serbia; ^dUniversity of Belgrade - ICTM, Department of Chemistry, Njegoševa 12, 11000 Belgrade, Serbia
e-mail: mima@chem.bg.ac.rs

The reaction of the HL ligand, (*E*)-2-(1-(thiazol-2-yl)ethylidene)hydrazine-1-carbothioamide, with the metal salt MnCl₂·4H₂O in a molar ratio 1:1 in methanol/water mixture results in the formation of bis Mn(II) complex (**2**) with composition [MnL₂]. Complex **1** crystallizes in the triclinic crystal system with space group *P*-1. The asymmetric unit of **1** consists of two crystallographically independent [Mn(L)₂] complex molecules. The Mn(II) ion is hexacoordinated with two tridentate ligands **L** through NNS sets of donor atoms. The geometry around the Mn is described as a distorted trigonal prism (Fig. 1).

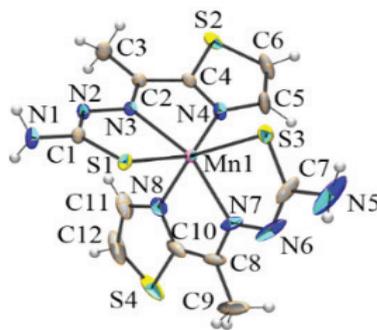


Figure 1. Molecular structure of complex **1**.

Acknowledgment: This research was supported by the Science Fund of the Republic of Serbia, #7750288, Tailoring Molecular Magnets and Catalysts Based on Transition Metal Complexes – TMMagCat.

СТРУКТУРНА СВОЈСТВА КЕРАМИКЕ BiFeO_3 ДОПИРАНЕ ЛАНТАНОМ И ЦИРКОНИЈУМОМ

А. Радојковић^а, Д. Луковић Голић^а, Н. Јовић Орсини^б, Н. Николић^а

^а Институт за мултидисциплинарна истраживања, Кнеза Вишеслава 1а, Београд, Универзитет у Београду, Република Србија; ^б Институт за нуклеарне науке "Винча" - Институт од националног значаја за Р. Србију, Мике Петровића Аласа 12-14, Винча, Република Србија
e-mail: natasaj@vin.bg.ac.rs

Бизмут-ферит (BiFeO_3) је један од најчешће проучаваних мултифероника који истовремено испољава и фeroелектрично и антиферромагнетно уређење на собној температури. Међутим, велика струја цурења, потешкоће у добијању чисте фазе и порозност керамике су неки од недостатака који спречавају ширу примену овог материјала. До сада су урађена многа истраживања како би се побољшала својства BiFeO_3 , било делимичном заменом катјона, било применом различитих метода синтезе.

Вектор спонтане фeroелектричне поларизације волуминозног BiFeO_3 поклапа се са једним од [111] праваца перовскитне структуре (просторна група $R3c$). Правац поларизације се може променити за 180° , 109° и 71° . Побољшање фeroелектричних својстава BiFeO_3 може се постићи одговарајућим допирањем узорака. У овом раду приказани су резултати допирања керамике BiFeO_3 лантаном (на местима Bi^{3+}) и цирконијумом (на местима Fe^{3+}). Серија од девет узорака са очекиваном стехиометријом $\text{Bi}_{1-x}\text{La}_x\text{Fe}_{1-y}\text{Zr}_y\text{O}_{3+\delta}$, за $x = 0; 0,10$ или $0,15$ и $y = 0; 0,002$ или $0,01$, синтетисана је методом отпаравања воденог раствора соли метала на 80°C . Прекурсорски прахови су оджарени на 650°C током 3 сата, а добијени керамички прахови пресовани и синтеровани на температурама између 780°C и 835°C . Rietveld-ова метода је коришћена за утачњавање дифрактограма синтерованих узорака и добијање информација о њиховој кристалној структури. Резултати су потврдили да допирање лантаном за $x = 0,10$ стабилизује структуру перовскита и не дозвољава формирање других фаза. Даље повећање садржаја лантана на $x = 0,15$ иницира прелазак кристалне структуре из ромбодарске (п.г. $R3c$) у орторомбичну (п.г. $Pnma$) фазу. Делимична замена јона Bi^{3+} јонима La^{3+} у положајима $6a$ доводи до контракције кристалне решетке, док делимична замена јона Fe^{3+} јонима Zr^{4+} доводи до повећања параметара решетке. Углови између Bi-Fe-Bi јона, као и катјон-катјон растојања могу бити корелисани са реманентном поларизацијом због чега су праћени у испитиваним системима BiFeO_3 .

STRUCTURAL PROPERTIES OF BiFeO_3 CERAMICS DOPED WITH LANTHANUM AND ZIRCONIUM

A. Radojković^a, D. Luković Golić^a, N. Jović Orsini^b, N. Nikolić^a

^a Institute for Multidisciplinary Research, Kneza Višeslava 1a, Belgrade, University of Belgrade, Serbia; ^b VINČA Institute of Nuclear Sciences - National Institute of the Republic of Serbia, University of Belgrade, P.O. Box 522, Belgrade, Serbia
e-mail: natasaj@vin.bg.ac.rs

Bismuth ferrite (BiFeO_3) is one of the most studied multiferroic materials due to its unique property of having both ferroelectric and antiferromagnetic ordering at room temperature. However, high leakage current, difficulties with pure phase synthesis and porosity of bulk ceramics are some of the drawbacks that still prevent it from being practically applied. Up to now, many investigations have been conducted to improve BiFeO_3 multiferroic properties, either by cation substitutions at the Bi^{3+} or Fe^{3+} site, or by applying various synthesis methods.

The spontaneous ferroelectric polarization in bulk BiFeO_3 lies along one of the [111] directions of the perovskite structure (space group $R3c$). The direction of the polarization can be switched by 180° , 109° and 71° . For the improvement of the ferroelectric properties of BiFeO_3 , numerous doping strategies have been demonstrated. In this paper, co-doping of bismuth ferrite ceramics with La (at Bi-site) and Zr (at Fe-site) was performed. A series of nine samples with the expected stoichiometry $\text{Bi}_{1-x}\text{La}_x\text{Fe}_{1-y}\text{Zr}_y\text{O}_{3+\delta}$, for $x = 0, 0.10$ or 0.15 and $y = 0, 0.002$ or 0.01 , were synthesized by a method of hydro-evaporation of water-soluble metal salts at 80°C . The precursor powders were calcined at 650°C , and the obtained ceramic powders were pressed and sintered at temperatures between 780°C and 835°C . The Rietveld method was used to refine the XRD patterns of the sintered samples and obtain information about their crystal structure. The results confirmed that doping with lanthanum for $x = 0.10$ stabilize the perovskite structure and does not allow the formation of secondary phases. Further increasing of lanthanum content to $x = 0.15$ initiates the transition of the crystal structure from the rhombohedral (S.G. $R3c$) to the orthorhombic (S.G. $Pnma$) phase. The substitution of Bi^{3+} ions by La^{3+} ions at $6a$ sites in the perovskite lattice leads to the contraction of the lattice, while the substitution of Fe^{3+} ions with Zr^{4+} ions at $6a$ sites brings to the increase of the lattice parameters. Attention was paid to the angles formed between Bi-Fe-Bi ions, as well as the values for cation-cation distances in the unit cell, to see if they can be correlated with the polarization in studied BiFeO_3 systems.

ТЕОРИЈСКО ПРОУЧАВАЊЕ $\text{Se}\cdots\text{Se}$ ИНТЕРАКЦИЈА У КРИСТАЛНИМ СТРУКТУРАМА

И. С. Вељковић ^a, Д. С. Кретић ^b, Д. Ж. Вељковић ^b

^a Универзитет у Београду - Институт за хемију, технологију и металургију, Његошева 12, Београд, Србија; ^b Универзитет у Београду - Хемијски факултет, Студентски трг 12-16, Београд, Србија
e-mail: danijela@chem.bg.ac.rs

Халкогена веза је посебна врста нековалентних интеракција између позитивно наелектрисаних региона халкогених атома који се зову σ -шупљине и негативно наелектрисаних региона другог атома [1]. Халкогене везе у органоселенијумским једињењима имају значајну улогу у хемији, биохемији и кристалном инжењерству. Иако су умерено јаке, ове интеракције имају кључну улогу у одржавању својстава наноматеријала на бази селена [2]. Поред тога, недавне студије су показале да ове интеракције могу бити од суштинског значаја за биолошку активност многих лекова који садрже селен [2]. Овде је представљена детаљна анализа кристалографских података у комбинацији са квантохемијским прорачунима за $\text{Se}\cdots\text{Se}$ интеракција у кристалним структурама органоселенијумских једињења. Анализа кристалографских података је показала да је у већини анализираних структура оријентација $\text{CH}_2\text{-Se-X}$ фрагмената антипаралелна. На основу ових резултата одабрали смо пет модел система и користили их за анализу декомпозиције енергије интеракција. Резултати су показали да енергији $\text{Se}\cdots\text{Se}$ интеракција највише доприноси дисперзија. Резултати такође сугеришу значајан допринос електростатичке компоненте која може подесити геометрију $\text{Se}\cdots\text{Se}$ интеракција. Ови резултати могу допринети бољем разумевању природе и својстава $\text{Se}\cdots\text{Se}$ интеракција и помоћи у дизајну материјала на бази селена.

[1] C. B. Aakeroy, D. L. Bryce, G. R. Desiraju, A. Frontera, A. C. Legon, F. Nicotra, K. Rissanen, S. Scheiner, G. Terraneo, P. Metrangolo, G. Resnati, *Pure Appl. Chem.*, **91** (2019) 1889–1892.

[2] L. Vogel, P. Wöhrer and S. M. Huber, *Angew. Chem. Int. Ed.*, **58** (2018) 1880–1891.

Захвалница: Истраживање је финансијски подржано од стране Министарства науке, технолошког развоја и иновација Републике Србије (Уговори бр.: 451-03-47/2023-01/200026; 451-03-47/2023-01/200168)

THEORETICAL STUDIES OF Se \cdots Se INTERACTION IN CRYSTAL STRUCTURES

I. S. Veljković ^a, D. S. Kretić ^b, D. Ž. Veljković ^b

^a University of Belgrade-Institute of Chemistry, Technology and Metallurgy, Njegoševa 12, Belgrade, Serbia ; ^b University of Belgrade-Faculty of Chemistry, Studentski trg 12-16, Belgrade, Serbia

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

Chalcogen bonding is a special type of non-covalent interaction between positively charged area of chalcogen atom called σ -hole and negatively charged area of other atom [1]. Chalcogen bonds in organoselenium compounds have a significant role in chemistry, biochemistry, and crystal engineering. Although moderately strong, these interactions are known to play a crucial role in maintaining the properties of selenium-based nanomaterials [2]. In addition, recent studies have found that these interactions might be essential for the biological activity of many selenium-containing drugs [2]. Here we presented a detailed analysis of crystallographic data combined with quantum chemical calculations of Se \cdots Se interactions in crystal structures of organoselenium compounds. The crystallographic data analysis showed that in majority of analyzed crystal structures orientation of CH₂-Se-X fragments is antiparallel. We selected five model systems based on the results of analysis of crystal structures and used them to perform the energy decomposition analysis. The results showed that dispersion contributes the most to the energy in Se \cdots Se interactions. Results also suggest that the contribution of the electrostatic component is also significant and may tune the geometry of Se \cdots Se interactions. These results may contribute to a better understanding of the nature and properties of Se \cdots Se interactions, and aid in the design of selenium-based materials.

[1] C. B. Aakeroy, D. L. Bryce, G. R. Desiraju, A. Frontera, A. C. Legon, F. Nicotra, K. Rissanen, S. Scheiner, G. Terraneo, P. Metrangolo, G. Resnati, *Pure Appl. Chem.*, **91** (2019) 1889–1892.

[2] L. Vogel, P. Wonner and S. M. Huber, *Angew. Chem. Int. Ed.*, **58** (2018) 1880–1891.

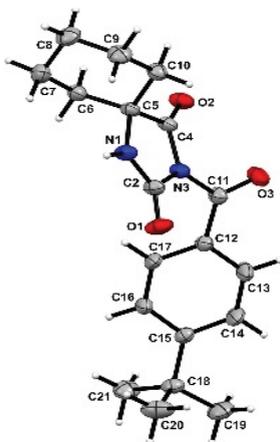
Acknowledgment: This research has been financially supported by Ministry of Science, Technological Development and Innovation of Republic of Serbia (Contract No: 451-03-47/2023-01/200026; 451-03-47/2023-01/200168)

**УЛОГА СТРУКТУРНИХ МОТИВА У ИЗГРАДЊИ
СУПРАМОЛЕКУЛСКЕ АРХИТЕКТУРЕ
3-(4-*TERC*-БУТИЛБЕНЗОИЛ)-1,3-
-ДИАЗАСПИРО[4.5]ДЕКАН-2,4-ДИОНА**

**А. Лазић^а, Л. Радовановић^а, Ј. Роган^б, Г. Јањић^в, И. Ђорђевић^в,
Н. Тришовић^б**

^а Универзитет у Београду, Иновациони центар Технолошко-металуришког факултета, Београд, Србија; ^б Универзитет у Београду, Технолошко-металуришки факултет, Београд, Србија; ^в Универзитет у Београду-Институт за хемију, технологију и металургију, Институт од националног значаја за Републику Србију, Београд, Србија
e-mail: ntrisovic@tmf.bg.ac.rs

Проучавано једињење (слика 1) синтетисано је полазећи од циклохексанона Бучерер-Бергсовом реакцијом и накнадним ациловањем добијеног спирохидантоина. Изградња кристалне структуре овог једињења проучавана је са аспекта доприноса једноставних димерних мотива који се успостављају преко различитих интермолекулских интеракција.



Слика 1 ORTEP приказ
једињења.
Figure 1 ORTEP drawing
of the compound.

Интермолекулске интеракције додатно су проучаване помоћу Хиршфелдових површина и 2Д графичких приказа отисака интеракција. Кристална структура, наиме, задржава мотив који се често среће код деривата хидантоина, у коме су два инверзано оријентисана молекула повезана паром N—H···O водоничних веза. Овај мотив формира два типа двоструких ланаца, који даље граде слој (слика 2). Осим тога, слабе C—H···O интеракције заједно са дисперзионим интеракцијама (π - π и хидрофобне интеракције) идентификоване су у овој кристалној структури.

Кристалографски подаци: C₁₉H₂₄N₂O₃,
M_r = 328,4, триклиничан систем, просторна група *P*-1,
a = 6,2810(2), *b* = 12,0586(4), *c* = 12,1852(5) Å,
 α = 77,624(3), β = 81,039(3), γ = 79,111(3) °,
V = 878.81(6) Å³, *Z* = 2, *F*(000) = 352, ρ_x = 1,380 g cm⁻³,
 $\mu(\text{MoK}\alpha)$ = 0,084 mm⁻¹. Утачњавање са *F*² (220 параметара) дало је *R*₁ = 0,0520, *wR*₂ = 0,1199, *S* = 1,033 за све податке и *R*₁ = 0,0443 за 3232 уочених рефлексција са *I* ≥ 2σ(*I*).

**ROLE OF STRUCTURAL MOTIFS IN FORMATION OF THE
SUPRAMOLECULAR ARCHITECTURE OF
3-(4-*TERT*-BUTYLBENZOYL)-1,3-DIAZASPIRO[4.5]DECANE-2,4-
-DIONE**

**A. Lazić^a, L. Radovanović^a, J. Rogan^b, G. Janjić^c, I. Đorđević^c,
N. Trišović^b**

^a University of Belgrade, Innovation Centre of the Faculty of Technology and Metallurgy, Belgrade, Serbia; ^b University of Belgrade, Faculty of Technology and Metallurgy, Belgrade, Serbia; ^c University of Belgrade - Institute of Chemistry, Technology and Metallurgy, National Institute of the Republic of Serbia, Belgrade, Serbia
e-mail: ntrisovic@tmf.bg.ac.rs

The title compound (Figure 1) was prepared from cyclohexanone in the Bucherer-Bergs reaction, followed by acylation of the obtained spirohydantoin. Formation of the crystal structure of this compound was analysed in terms of a number of simple dimeric motifs which are associated with different intermolecular interactions. The crystal structure retains the motif commonly found in hydantoin derivatives, where two molecules related by inversion are linked by a pair of N–H···O hydrogen bonds. This motif is involved in two types of double chains, which further form a layer (Figure 2). Intermolecular interactions were also investigated using Hirshfeld surface analysis and 2D fingerprint analysis. Weak C–H···O interactions together with the

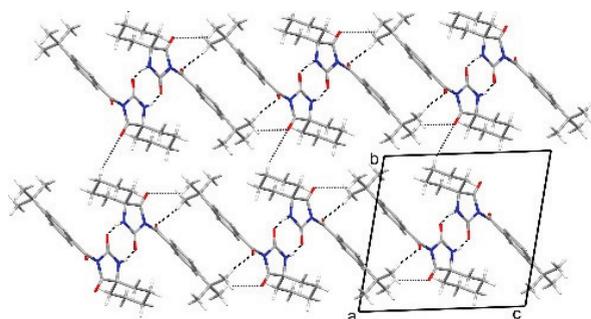


Figure 2 Formation of a layer within the crystal structure of the spirohydantoin derivative.

Слика 2 Формирање 2Д слоја у кристалној структури деривата спирохидантоина.

dispersion interactions (π - π and hydrophobic) as the source of attraction are identified in this crystal structure.

Crystal data: C₁₉H₂₄N₂O₃, $M_r = 328.4$, triclinic system, space group $P\bar{1}$, $a = 6.2810(2)$, $b = 12.0586(4)$, $c = 12.1852(5)$ Å, $\alpha = 77.624(3)^\circ$, $\beta = 81.039(3)^\circ$, $\gamma = 79.111(3)^\circ$, $V = 878.81(6)$ Å³, $Z = 2$, $F(000) = 352$, $\rho_x = 1.380$ g cm⁻³, $\mu(\text{MoK}\alpha) = 0.084$ mm⁻¹. The refinement on F^2 (220 parameters) yielded $R_1 = 0.0520$, $wR_2 = 0.1199$, $S = 1.033$ for all data, and $R_1 = 0.0443$ for 3232 observed reflections with $I \geq 2\sigma(I)$.

СУПРАМОЛЕКУЛСКИ ПРИСТУП БОЈЕЊУ: КРИСТАЛНО ПАКОВАЊЕ АЗО ПИРИДОНСКЕ БОЈЕ

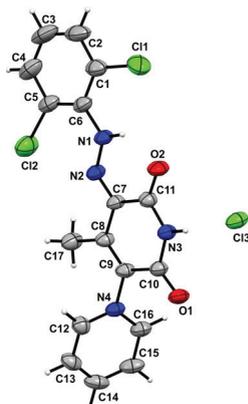
А. Машуловић^а, **Л. Радовановић**^а, **Ј. Лађаревић**^б, **А. Лазић**^а,
Н. Тришовић^б, **Ј. Роган**^б, **Д. Мијин**^б

^а Иновациони центар Технолошко-металуришког факултета, Универзитет у Београду, Карнегијева 4, Београд, Србија; ^б Универзитет у Београду, Технолошко-металуришки факултет, Београд, Србија
e-mail: amasulovic@tmf.bg.ac.rs

Реакција азо купловања омогућава лаку синтезу низа молекула са различитим својствима, што чини азо боје најраспрострањенијим колорантима. Поред примене азо боја у текстилној индустрији, примењују се и код производа напредних технологија. Такође, позната су и по својој изванредној биолошкој активности. Присуство језгра пиридина значајно побољшава обојење и постојаност боја. Супрамолекулским приступом објашњавају се интра- и интер-молекулске интеракције, што омогућава боље разумевање интеракција између боја и текстилног влакна [1].

У овом раду добијен је 5'-(2-(2,6-дихлорфенил)хидразон)-4'-метил-2',6'-диоокси-1',2',5',6'-тетрахидро-[1,3'-бипиридин]-1-иум-хлорид (слика). Структура једињења потврђена је NMR, ATR-FTIR, UV-Vis спектроскопијама и рендгенском структурном анализом. Супрамолекулско умрежавање постигнуто је водоничним везама, π -интеракцијама, интеракцијама атома хлора везаних за фенилно језгро као и интеракцијама Cl^- -јона који се налази у кристалној решетки. Овим интеракцијама објашњена је и способност везивања боје за текстилно влакно.

Кристалнографски подаци: $\text{C}_{34}\text{H}_{26}\text{Cl}_6\text{N}_8\text{O}_4$,
 $M_r = 823,33$, $P-1$, $a = 7,3784(15)$, $b = 10,394(2)$,
 $c = 13,254(3)$ Å, $\alpha = 103,29(3)$, $\beta = 105,71(3)$,
 $\gamma = 106,11(3)^\circ$, $V = 887,5(4)$ Å³, $Z = 1$,
 $F(000) = 420$, $\rho_x = 1,541$ g cm⁻³,
 $\mu(\text{MoK}\alpha) = 0,537$ mm⁻¹. Утачњавање са F^2 (236
параметара) дало је $R_1 = 0,0561$ и $S = 1,063$ за
3247 примећених рефлексија са $I \geq 2\sigma(I)$.



Слика. ORTEP приказ молекула
азо боје.

[1] А. Маšуловић, Ј. Лађаревић, А. Ивановска, С. Ступар, М. Вукчевић, М. Костић, Д. Мијин, *Dyes Pigment.*, **195** (2021) 109741.

SUPRAMOLECULAR APPROACH OF DYEING: CRYSTAL PACKING OF PYRIDONE AZO DYE

**A. Mašulović^a, L. Radovanović^a, J. Lađarević^b, A. Lazić^a, N. Trišović^b,
J. Rogan^b, D. Mijin^b**

^a *Innovation Centre of the Faculty of Technology and Metallurgy, University of Belgrade, Karnegijeva 4, Belgrade, Serbia;* ^b *Faculty of Technology and Metallurgy, University of Belgrade, Karnegijeva 4, Belgrade, Serbia;*
e-mail: amasulovic@tmf.bg.ac.rs

The reaction of azo coupling easily provides access to a wide range of different molecules with numerous material properties, therefore making azo dyes most widely used colorants. Their use is not limited only on textile dyeing as it expands on usage in advanced technology products. On the other hand, these compounds are known for their remarkable biological activities. Inclusion of a pyridine ring into the molecular architecture leads to a better color properties. Supramolecular organization of azo dyes provides details on the molecular conformation, including intra- and inter-molecular interactions in the solid state. This information assists towards understanding of molecular properties as well as dye–fibre interactions [1].

In this work azo coupling reaction was employed to obtain 5'-(2-(2,6-dichlorophenyl)hydrazono)-4'-methyl-2',6'-dioxo-1',2',5',6'-tetrahydro-[1,3'-bipyridin]-1-ium chloride (Figure). The molecular structure was confirmed by ¹H, ¹³C NMR, ATR-FTIR, UV-Vis spectroscopies and by single-crystal X-Ray diffraction. Various hydrogen bonds, π -stacking interactions and interactions involving chlorine substituents, as well as the chloride ion are responsible for supramolecular organization. Furthermore these interactions were used to explain dye-fiber affinities.

Crystal data: C₃₄H₂₆Cl₆N₈O₄, *M*_r = 823.33, *P*-1, *a* = 7.3784(15), *b* = 10.394(2), *c* = 13.254(3) Å, α = 103.29(3), β = 105.71(3), γ = 106.11(3)°, *V* = 887.5(4) Å³, *Z* = 1, *F*(000) = 420, ρ_x = 1.541 g cm⁻³, μ (MoK α) = 0.537 mm⁻¹. The refinement on *F*² (236 parameters) yielded *R*₁ = 0.0561 and *S* = 1.063 for 3247 observed reflections with *I* ≥ 2 σ (*I*).

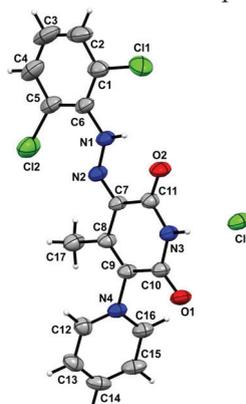


Figure. ORTEP diagram of a molecule of the dye.

[1] A. Mašulović, J. Lađarević, A. Ivanovska, S. Stupar, M. Vukčević, M. Kostić, D. Mijin, *Dyes Pigm.*, **195** (2021) 109741.

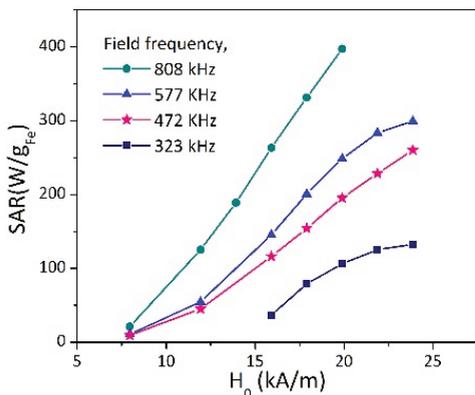
СТРУКТУРНЕ, МАГНЕТНЕ И ХИПЕРТЕРМИЈСКЕ ОСОБИНЕ НАНОЧЕСТИЦА ОКСИДА ГВОЖЂА ОБЛОЖЕНИХ PVP СУРФАКТАНТОМ

М. М. Милић, Н. Јовић Орсини

Институт "Винча"- Универзитет у Београду, Мике Петровића Аласа 12-14, Винча, Београд, Република Србија
e-mail: mikac@vin.bg.ac.rs

Захваљујући својој биокompatибилности, ниској токсичности, доброј хемијској стабилности и одличним магнетним особинама наночестични системи на бази оксида гвожђа представљају главног кандидата за грејног агенса у лечењу малигних тумора методом магнетне хипертермије. Ипак, потрага за наночестичним грејним агенсом оптимизованих особина и максималне топлотне ефикасности још увек није завршена.

У овом раду синтетисали смо магнетне наночестице оксида гвожђа обложене поливинилпиролондом користећи методу копреципитације из водено-етиленгликолног раствора FeCl_2 и FeCl_3 уз NH_3 као таложног реагенса. Структурне, морфолошке и магнетне особине добијених наночестица испитиване су различитим експерименталним техникама. Утврђено је да су синтетисане наночестице приближно сферног облика, просечне величине $D_{\text{TEM}} = 15 \text{ nm}$ и да кристалишу у



спинелној структури (просторна група $Fd-3m$) са просечном величином кристалита од 12 nm . Мезбауерова спектроскопија и параметар јединичне ћелије од $a=8,361 \text{ \AA}$ указују на то да кристална структура узорка одговара структури јако оксидованог магнетита. Добијене наночестице оксида гвожђа су суперпарамагнетне и имају високу вредност сатурационе магнетизације $M_s = 81 \text{ emu/g}$ (на 300 K). Хипертермијски потенцијал колоидног воденог

раствора ових наночестица испитиван је калориметријским мерењима, а у функцији од вредности јачине, H_0 , и учестаности, f , променљивог магнетног поља. Добијене вредности специфичне апсорбоване снаге (SAR) и ILP (Intrinsic Loss Power) параметра потврђују могућност примене PVP-обложених наночестица гвожђе оксида у терапеутске сврхе.

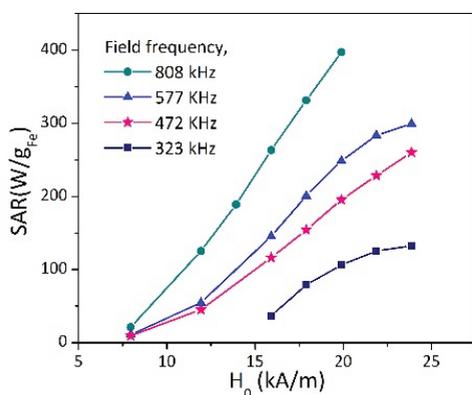
STRUCTURAL, MAGNETIC AND HYPERTHERMIC PROPERTIES OF PVP COATED IRON OXIDE NANOPARTICLES

M. M. Milić, N. Jović Orsini

VINČA Institute of Nuclear Sciences - National Institute of the Republic of Serbia, University of Belgrade, P.O. Box 522, 11001 Belgrade, Serbia
e-mail: mikac@vin.bg.ac.rs

Currently, iron oxide based nanoparticulate systems are regarded as a first choice candidate for heat generators in magnetic hyperthermia tumor treatment due to their biocompatibility, low toxicity, good chemical stability, excellent magnetic properties and facile and cheap preparation. Yet, finding the heating agent with optimized heating properties is still an ongoing research problem.

In this work we prepared polyvinylpyrrolidone (PVP) coated magnetic iron oxide nanoparticles (MIONs) under mild synthesis conditions using a simple co-precipitation method from aqueous-ethylene glycol $\text{FeCl}_2\text{-FeCl}_3$ solution and employing NH_3 as a precipitating agent. Morphology, structure and magnetic properties of the prepared MIONs were assessed by X-ray diffractometry (XRD), transmission electron microscopy (TEM), Mossbauer and Fourier transmission infrared (FTIR) spectroscopy, SQUID magnetometry, and dynamic light scattering (DLS) technique. It was found that the studied MIONs were roughly spherical in shape with average particle size, $D_{\text{TEM}} = 15$ nm and crystallized in the cubic spinel structure (S.G. $Fd-3m$), with average crystallite sizes of 12 nm. Mossbauer data and the unit cell parameter of $a = 8.361$ Å indicate that the crystal structure corresponds to the one of highly oxidized magnetite. Studied iron oxide nanoparticles were superparamagnetic in nature with high saturation magnetization, $M_s = 81$ emu/g, and zero values of



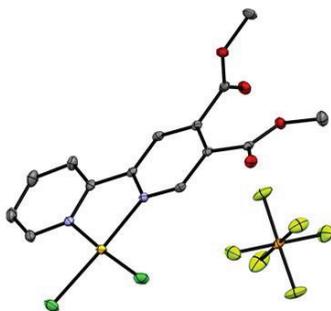
coercivity and remanence at 300 K. Heating efficiency of MIONs colloid solution was investigated by calorimetric measurements for different values of AC magnetic field amplitudes, H_0 , and frequencies, f . Evaluated specific absorption rate (SAR) and intrinsic loss power (ILP) values suggest potential use of PVP coated iron oxide nanoparticles in therapeutic magnetic hyperthermia.

СИНТЕЗА И КРИСТАЛНА СТРУКТУРА ЗЛАТО(III) КОМПЛЕКСА СА ДИМЕТИЛ 2,2'-БИПИРИДИН-4,5-ДИКАРБОКСИЛАТОМ

**Б. В. Пантовић^а, Т. П. Андрејевић^а, Ј. Кљун^б, И. Турел^б, Д. П. Ашанин^в,
М. И. Ђуран^г, Б. Б. Глишић^а**

^а Универзитет у Крагујевцу, Природно-математички факултет, Институт за хемију, Радоја Домановића 12, 34000 Крагујевац, Србија; ^б Универзитет у Љубљани, Факултет за хемију и хемијску технологију, Вечна пот 113, SI-1000, Љубљана, Словенија; ^в Универзитет у Крагујевцу, Институт за информационе технологије, Департман за природно-математичке науке, Јована Цвијића бб, 34000 Крагујевац, Србија; ^г Српска академија наука и уметности, Кнез Михаилова 35, 11000 Београд, Србија
e-mail: bojana.pantovic@pmf.kg.ac.rs

Диметил 2,2'-бипиридин-4,5-дикарбоксилат (ру-2ру) је коришћен као лиганд за синтезу мононуклеарног комплекса злата(III), $[\text{Au}(\text{ru-2ru})\text{Cl}_2]\text{PF}_6$. Реакција између $\text{K}[\text{AuCl}_4]$, ру-2ру и KPF_6 је изведена у молском односу 1 : 1,1 : 2 у смеси етанола и воде (v/v 2 : 1) на 70 °С. Синтетисани комплекс злата(III) је окарактерисан применом спектроскопских (IR, ^1H и ^{13}C NMR) и електрохемијских метода (циклична волтаметрија, CV), док је кристална структура одређена применом рендгенске структурне анализе. У овом комплексу, ру-2ру лиганд је бидентатно координован за $\text{Au}(\text{III})$ јон преко два атома азота пиридинских прстенова, док преостала координациона места заузимају два хлоридо лиганда. Као резултат, долази до формирања катјонске комплексне честице $[\text{Au}(\text{ru-2ru})\text{Cl}_2]^+$, која је неутралисана хексафлуорофосфатом (PF_6^-) као контра ањоном. Геометрија добијеног комплекса злата(III) је квадратно-планарна.



Кристална структура $[\text{Au}(\text{ru-2ру})\text{Cl}_2]\text{PF}_6$ комплекса

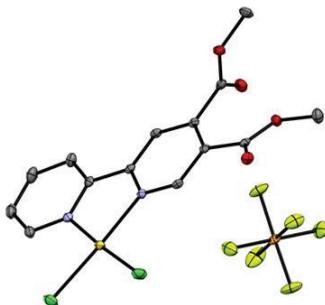
SYNTHESIS AND CRYSTAL STRUCTURE OF A GOLD(III) COMPLEX WITH DIMETHYL 2,2'-BIPYRIDINE-4,5-DICARBOXYLATE

B. V. Pantović^a, **T. P. Andrejević**^a, **J. Kljun**^b, **I. Turel**^b, **D. P. Ašanin**^c,
M. I. Djuran^d, **B. Đ. Glišić**^a

^a University of Kragujevac, Faculty of Science, Department of Chemistry, Radoja Domanovića 12, 34000 Kragujevac, Serbia; ^b University of Ljubljana, Faculty of Chemistry and Chemical Technology, Večna pot 113, SI-1000, Ljubljana, Slovenia; ^c Institute for Information Technologies, Department of Science, Jovana Cvijića bb, 34000 Kragujevac, Serbia; ^d Serbian Academy of Sciences and Arts, Knez Mihailova 35, 11000 Belgrade, Serbia

e-mail: bojana.pantovic@pmf.kg.ac.rs

Dimethyl 2,2'-bipyridine-4,5-dicarboxylate (py-2py) was used as a ligand for the synthesis of a new mononuclear gold(III) complex, $[\text{Au}(\text{py-2py})\text{Cl}_2]\text{PF}_6$. The reaction of KAuCl_4 , py-2py and KPF_6 was performed in 1 : 1.1 : 2 molar ratio in a mixture of solvents, ethanol and water (v/v 2 : 1) at 70 °C. The synthesized gold(III) complex was characterized by spectroscopic (IR, ^1H and ^{13}C NMR) and electrochemical methods (cyclic voltammetry, CV), while its crystal structure was determined by single-crystal X-ray diffraction analysis. In this complex, py-2py ligand is bidentately coordinated to the Au(III) ion through the pyridine nitrogen atoms, while the remaining coordination sites are occupied by two chlorido ligands. This led to the formation of a cationic $[\text{Au}(\text{py-2py})\text{Cl}_2]^+$ moiety that is neutralized by the hexafluorophosphate (PF_6^-) as a counter anion. The geometry of the synthesized gold(III) complex is square-planar.



Crystal structure of $[\text{Au}(\text{py-2py})\text{Cl}_2]\text{PF}_6$ complex

СИНТЕЗА И КРИСТАЛНА СТРУКТУРА КОМПЛЕКСА ПАЛАДИЈУМ(II) СА (*S,S*)-ПРОПИЛЕНДИАМИН-*N,N'*-ДИ-2-(3-МЕТИЛ) БУТАНСКОМ КИСЕЛИНОМ

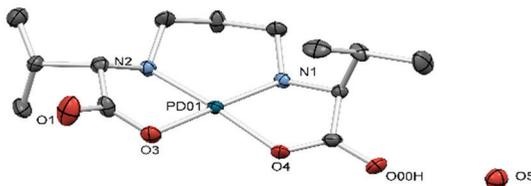
Ђ. С. Петровић^a, В. В. Јевтић^a, О. Р. Клисурић^b, С. С. Јовичић Милић^b, Д. Љ. Стојковић^b

^a Универзитет у Крагујевцу, Природно-математички факултет, Радоја Домановића 12, 34000 Крагујевац, Република Србија; ^b Универзитет у Новом Саду, Природно-математички факултет, Институт за физику, Трг Доситеја Обрадовића 4, 21000 Нови Сад, Република Србија;

^c Универзитет у Крагујевцу, Институт за информационе технологије, Департман за природно-математичке науке, Јована Цвијића бб, 34000 Крагујевац, Република Србија

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

Раствору калијум-тетрахлоридопаладата додата је *S,S*-пропилен-диамин-*N,N'*-ди-2-(3-метил) бутанска киселина. Реакциона смеша је загревана на 60 °C током 2 сата уз мешање. Током овог периода, у малим порцијама додат је раствор литијум-хидроксида, након чега је добијен окер жути комплекс (Слика 1). Кристалографски подаци: моноклинични систем, просторна група $P2_1$, величина кристала $0,49 \times 0,14 \times 0,11 \text{ mm}^3$, $a = 7,9015(3)$, $b = 7,1579(3)$, $c = 14,1318(7) \text{ \AA}$, $\beta = 91,753(4)^\circ$, $V = 798,89(6) \text{ \AA}^3$, $Z = 2$, $\rho = 1,641 \text{ g cm}^{-3}$, $\mu = 1,18 \text{ mm}^{-1}$, $R = 0,031$, $wR = 0,070$.



Слика 1. Кристална структура комплекса паладијума(II)

Аутори се захваљују за делимичну финансијску подршку Покрајинском секретеријату за високо образовање и научноистраживачку делатност АПВ, број пројекта 142-451-3154/2022-01/2, као и Министарству науке, технолошког развоја и иновација број: 451-03-47/2023-01/200378 и 451-03-47/2023-01/200122.

SYNTHESIS AND CRYSTAL STRUCTURE OF PALLADIUM(II) COMPLEX WITH (*S,S*)-PROPYLENE-DIAMINE-*N,N'*-DI-2-(3-METHYL) BUTANOIC ACID

D. S. Petrović^a, V. V. Jevtić^a, O. R. Klisurić^b, S. Jovičić Milić^c, D. Lj. Stojković^c

^a University of Kragujevac, Faculty of Science, Radoja Domanovića 12, 34000 Kragujevac, Republic of Serbia; ^b University of Novi Sad, Faculty of Sciences, Department of Physics, Trg Dositeja Obradovića 4, 21000 Novi Sad, Republic of Serbia; ^c University of Kragujevac, Institut for Information Technologies, Department of science, Jovana Cvijića bb, 34000 Kragujevac, Republic of Serbia
e-mail: djordje.petrovic@pmf.kg.ac.rs

S,S-propylenediamine-*N,N'*-di-2-(3-methyl)butanoic acid was added to the potassium tetrachloropalladate solution. The reaction mixture was heated at 60 °C for 2 hours with stirring. During this period, lithium hydroxide solution was added in small portions after which an other yellow complex was obtained (Figure 1). Crystal data: monoclinic, space group $P2_1$, crystal size $0.49 \times 0.14 \times 0.11$ mm³, $a = 7.9015(3)$, $b = 7.1579(3)$, $c = 14.1318(7)$ Å, $\beta = 91.753(4)^\circ$, $V = 798.89(6)$ Å³, $Z = 2$, $\rho = 1.641$ g cm⁻³, $\mu = 1.18$ mm⁻¹, $R = 0.031$, $wR = 0.070$.

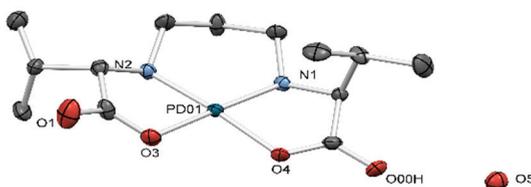


Fig. 1 Crystal structure of palladium(II) complex

The authors acknowledge the partial financial support of the APV Provincial Secretariat for Higher Education and Scientific Research project no.142-451-3154/2022-01/2 as well as the Ministry of Science, Technological Development and Innovation number: 451-03-47/2023-01/200378 and 451-03-47/2023-01/200122.

KRISTALOGRAFSKO, SPEKTROSKOPSKO I RAČUNARSKO ISPITIVANJE KOMPLEKSA CINKA SA 2,2'-DIPIRIDILAMINOM I ANJONOM FURANDIKARBOKSILNE KISELINE

L. Radovanović^a, D. P. Malenov^b, J. Rogan^c

^a Inovacioni centar Tehnološko-metalurškog fakulteta, Univerzitet u Beogradu, Beograd, Srbija; ^b Univerzitet u Beogradu, Hemijski fakultet, Beograd, Srbija; ^c Univerzitet u Beogradu, Tehnološko-metalurški fakultet, Beograd, Srbija

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

Koordinacioni polimeri intenzivno se proučavaju zbog svojih različitih strukturnih oblika i brojnih mogućnosti primene [1]. Anjoni 2,5-furandikarboksilne kiseline (H₂fdc), biološkog porekla, odlični su mostovni ligandi za sintezu koordinacionih polimera zbog strukturne sličnosti sa anjonima tereftalne kiseline [1].

Polimerni kompleks [Zn(fdc)(dipya)]·H₂O, **1**, sa 2,2'-dipiridilaminom (dipya) i dianjonom H₂fdc sintetisan je u obliku monokristala i okarakterisan rendgenskom strukturnom analizom i FTIR-spektroskopijom, kao i proračunom nekovalentnih interakcija. Atomi Zn nalaze se u deformisanom tetraedarskom okruženju koje čine helatno koordinirani dipya-ligand i dva bis-monodentatno koordinirana fdc²⁻-liganda. Zbog mostovnog načina koordinacije fdc, strukturni fragmenti formiraju polimerne cik-cak lance, dok je supramolekulsko 3D umrežavanje postignuto preko mnogobrojnih nekovalentnih interakcija. Izračunate Hiršfildove površine i odgovarajući 2D grafički prikazi otisaka nekovalentnih interakcija za monomernu jedinku kompleksa **1** pokazuju da atom metala ne učestvuje u uspostavljanju interakcija. Dve tetraedarske jedinice povezane su prvenstveno kombinacijom C–H···O i π–π interakcija, čija energija, izračunata B3LYP-D3/def2-SVP metodom, iznosi –20,75 kcal/mol, dok je dodatno povezivanje omogućeno preko C–H···π i C–H···O interakcija (–14,04 kcal/mol). Dalja stabilizacija postignuta je vodoničnim vezama između nekoordiniranog molekula vode sa dipya- (–10,88 kcal/mol) i fdc-ligandima (–6,87 kcal/mol).

Kristalografski podaci: C₁₆H₁₃N₃O₆Zn, M_r = 408,7, rombičan kristalni sistem, prostorna grupa C222₁, a = 5,7164(11), b = 18,986(4), c = 15,248(3) Å, V = 1654,9(6) Å³, Z = 4, F(000) = 832, ρ_x = 1,64 g cm⁻³, μ(MoKα) = 1,524 mm⁻¹. Utačnjavanje sa F² (123 parametara) dalo je R₁ = 0,0217, wR₂ = 0,0511, S = 1,083 za sve podatke i R₁ = 0,0203 za 1455 uočenih refleksija sa I ≥ 2σ(I).

[1] E. R. Engel, J. L. Scott, *Green Chem.*, **22** (2020) 3693–3715.

CRYSTALLOGRAPHIC, SPECTROSCOPIC AND COMPUTATIONAL STUDY OF ZINC COMPLEX WITH 2,2'-DIPYRIDYLAMINE AND ANION OF FURANDICARBOXYLIC ACID

L. Radovanović^a, D. P. Malenov^b, J. Rogan^c

^a Innovation Centre of the Faculty of Technology and Metallurgy, University of Belgrade, Belgrade, Serbia; ^b University of Belgrade, Faculty of Chemistry, Belgrade, Serbia; ^c University of Belgrade, Faculty of Technology and Metallurgy, Belgrade, Serbia
e-mail: lradovanovic@tmf.bg.ac.rs

Coordination polymers (CPs) have received significant attention due to their structural diversities and numerous possible applications [1]. The anions of bio-based 2,5-furandicarboxylic acid (H₂fdc) are versatile bridging ligands for the synthesis of CPs because of the structural similarity to the anions of terephthalic acid [1].

The single crystals of CP with 2,2'-dipyridylamine (dipya) and dianion of H₂fdc, [Zn(fdc)(dipya)]·H₂O, **1**, have been synthesized and characterized by single-crystal X-ray diffraction and FTIR spectroscopy, together with computational analysis of noncovalent interactions. Zn centers are situated in a deformed tetrahedral environment consisting of one chelate dipya and two bis-monodentate fdc²⁻ ligands. Due to the bridging role of fdc, the structural fragments form polymeric zigzag chains, while the 3D supramolecular network is established through numerous noncovalent interactions. The Hirshfeld surface and corresponding 2D fingerprint plots of noncovalent interactions for monomer unit of **1** show non-involvement of metal center in any of the interactions. Two tetrahedral units interact primarily *via* the combination of C–H···O and stacking interactions, with B3LYP-D3/def2-SVP interaction energy of –20.75 kcal/mol, while another contact is established through C–H···π and C–H···O interactions (–14.04 kcal/mol). Additional stabilization is provided by hydrogen bonds of uncoordinated water molecule with dipya (–10.88 kcal/mol) and fdc ligands (–6.87 kcal/mol).

Crystal data: C₁₆H₁₃N₃O₆Zn, *M_r* = 408.7, orthorhombic system, space group C222₁, *a* = 5.7164(11), *b* = 18.986(4), *c* = 15.248(3) Å, *V* = 1654.9(6) Å³, *Z* = 4, *F*(000) = 832, *ρ_x* = 1.64 g cm⁻³, *μ*(MoKα) = 1.524 mm⁻¹. The refinement on *F*² (123 parameters) yielded *R*₁ = 0.0217, *wR*₂ = 0.0511, *S* = 1.083 for all data, and *R*₁ = 0.0203 for 1455 observed reflections with *I* ≥ 2σ(*I*).

[1] E. R. Engel, J. L. Scott, *Green Chem.*, **22** (2020) 3693–3715.

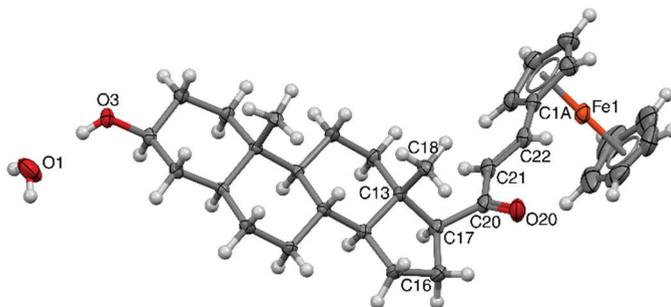
КРИСТАЛНА СТРУКТУРА НОВОГ КОНЈУГАТА ФЕРОЦЕНА СА СТЕРОИДОМ ПРЕГНАНСКОГ СКЕЛЕТА

В. Раичевић^a, М. Сакач^a, Н. Радуловић^b, М. Родић^a

^a Департман за хемију, биохемију и заштиту животне средине, Природно-математички факултет, Универзитет у Новом Саду, Трг Доситеја Обрадовића 3, 21000 Нови Сад, Србија; ^b Департман за хемију, Природно-математички факултет, Универзитет у Нишу, Вишеградска 33, 18000 Ниш, Србија.
e-mail: vidak.raicevic@dh.uns.ac.rs

Конјугати фeroцена са стероидним молекулима могу испољавати различита повољна биолошка својства, од којих је најзначајније селективно антипролиферативно дејство на ћелије канцера [1]. У Клајзен-Шмитовој реакцији фeroценкарбалдехида и епиалопрегнанолона добијен је (21*E*)-21-(фeroценилметилен)-3β-хидрокси-5α-прегнан-20-он (**1**) у облику монокристала погодних за рендгенску структурну анализу.

Кристалографски подаци за **1**: C₃₂H₄₂FeO₂·H₂O, моноклинични кристални систем, *C*2, *a* = 10,0616(3) Å, *b* = 7,6073(2) Å, *c* = 35,9703(7) Å, *V* = 2752,95(12) Å³, *Z* = 4, измерено рефлексција 15740, утачњавано параметара 343, број ограничења 8, *R*₁ = 0,031, *wR*₂ = 0,082, *S* = 1,04, Flack *x* = -0,008(15).



[1] V. Raičević, N. Radulović, M. Sakač, *Eur. J. Inorg. Chem.*, (2022) e202100951.

CRYSTAL STRUCTURE OF A NEW FERROCENE CONJUGATE WITH A PREGNANE-TYPE STEROID

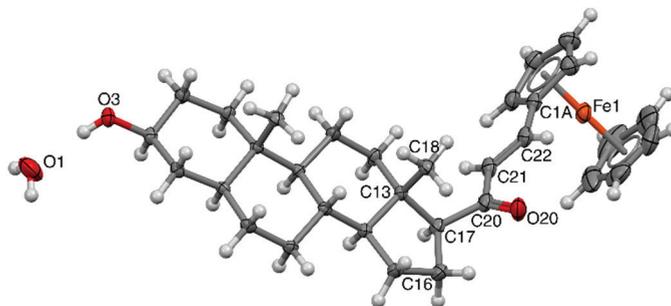
V. Raičević^a, M. Sakač^a, N. Radulović^b, M. Rodić^a

^a Department of Chemistry, Biochemistry and Environmental Protection, Faculty of Sciences, University of Novi Sad, Trg Dositeja Obradovića 3, 21000 Novi Sad, Serbia; ^b Department of Chemistry, Faculty of Sciences and Mathematics, University of Niš, Višegradska 33, 18000 Niš, Serbia.

e-mail: vidak.raicevic@dh.uns.ac.rs

Conjugates of ferrocene with steroid molecules can exhibit a wide variety of favorable biological effects, with selective antiproliferative activity toward cancer cells being the most important [1]. A Claisen-Schmidt reaction of ferrocenecarboxaldehyde and epiallopregnanolone yielded (21*E*)-21-(ferrocenylmethylidene)-3β-hydroxy-5α-pregnan-20-one (**1**) as single crystals suitable for X-ray crystallography.

Crystallographic data for **1**: C₃₂H₄₂FeO₂·H₂O, monoclinic crystal system, C2, $a = 10.0616(3)$ Å, $b = 7.6073(2)$ Å, $c = 35.9703(7)$ Å, $V = 2752.95(12)$ Å³, $Z = 4$, no. of reflections measured 15740, no. of parameters refined 343, no. of restraints 8, $R_1 = 0.031$, $wR_2 = 0.082$, $S = 1.04$, Flack $x = -0.008(15)$.



[1] V. Raičević, N. Radulović, M. Sakač, *Eur. J. Inorg. Chem.*, (2022) e202100951.

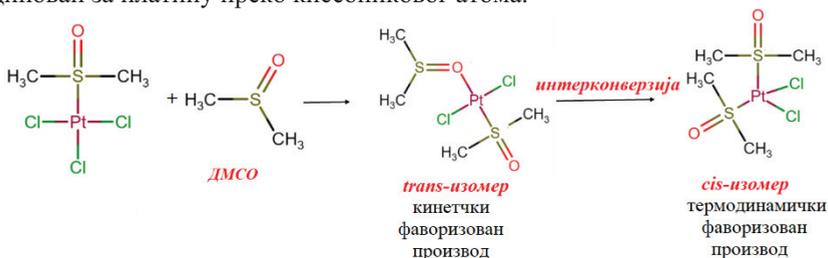
КРИСТАЛОГРАФСКА И КВАНТНО-ХЕМИЈСКА АНАЛИЗА КООРДИНАЦИЈЕ ДИМЕТИЛСУЛФОКСИДА ЗА ПЛАТИНУ

А. А. Ракић^а, М. Минић^б, П. Станић^в, Г. В. Јањић^г

^а Факултет за физичку хемију-Универзитет у Београду, Студентски трг 12-16, Београд, Србија; ^б Optima Apps BGD d.o.o., Јасеничка 7, Београд, Србија; ^в Институт за информационе технологије Крагујевац, Универзитет у Крагујевцу, Јована Цвијића бб, Крагујевац, Србија; ^г Институт за хемију, технологију и металургију, Универзитет у Београду, Института од националног значаја за Републику Србију, Његошева 12, Београд, Србија.

e-mail: saska@ffh.bg.ac.rs

Растварање комплекса платине у ДМСО приликом испитивања биолошке активности може довести до супституције лиганда и промене структуре комплекса [1]. Квантно-хемијски прорачуни су показали да је координовање ДМСО преко кисеониковог атома кинетички фаворизовано, након чега долази до интерконверзије (замене места) лиганда и координовања ДМСО преко сумповог атома (слика). Настали (везивни) изомер је термодинамички стабилнији. Претрагом Кембричке базе структурних података, екстархована је 561 структура комплекса платине са ДМСО координованим преко сумповог атома, и само 7 структура са ДМСО координованим преко кисеониковог атома. Уколико су лиганди, који се налазе у *cis* положају у односу на О-координовани ДМСО лиганд, део хелатног или мостног лиганда, не долази до интерконверзије лиганда, па ДМСО остаје координован за платину преко кисеониковог атома.



[1] M. D. Hall, K. A. Telma, K.-E. Chang, T. D. Lee, J. P. Madigan, J. R. Lloyd, I. S. Goldlust, J. D. Hoeschele, M. M. Gottesman, *Cancer Res.*, **74** (2014) 3913–3922.

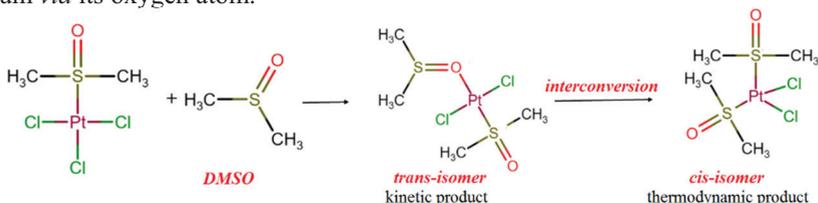
CRYSTALLOGRAPHIC AND QUANTUM-CHEMICAL ANALYSIS OF DMSO COORDINATION TO PLATINUM

A. A. Rakić^a, M. Minić^b, P. Stanić^c, G. V. Janić^d

^a Faculty of Physical Chemistry, University of Belgrade, Studentski trg 12-16, 11000 Belgrade, Serbia; ^b Optima Apps BGD d.o.o., Jasenička 7, 11000 Belgrade, Serbia; ^c Institute for Information Technologies, University of Kragujevac, Jovana Cvijića bb, 34 000 Kragujevac, Serbia; ^d 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

Dissolving platinum complexes in DMSO to study biological activity can lead to ligand displacement and changes in complex structures [1]. Quantum chemical calculations indicate that the coordination of DMSO via the oxygen atom is kinetically favoured over coordination to platinum via sulfur. This is followed by ligand interconversion, resulting in the S-coordination of the DMSO molecule in platinum complexes (Figure). The resulting (binding) isomer is thermodynamically more stable. A search of the Cambridge structural database identified 561 platinum complexes with an S-bound DMSO ligand. However, only 7 platinum complexes had DMSO molecule ligated through the oxygen atom. The presence of chelating or bridging ligands in the *cis* position with respect to the O-bound DMSO molecule can prevent the DMSO from undergoing ligand interconversion. In such cases, the DMSO molecule remains coordinated to platinum *via* its oxygen atom.



[1] M. D. Hall, K. A. Telma, K.-E. Chang, T. D. Lee, J. P. Madigan, J. R. Lloyd, I. S. Goldlust, J. D. Hoeschele, M. M. Gottesman, *Cancer Res.*, **74** (2014) 3913–3922.

ФАЗНЕ И МОРФОЛОШКЕ ПРОМЕНЕ У ЛИТИЈУМ-НИОБИЈУМ-ТИТАН-ОКСИДНОМ СИСТЕМУ ИНДУКОВАНЕ МАЛИМ ДОДАЦИМА ЦИНК-ОКСИДА

Р. Р. Раонић^а, **Д. Л. Секулић**^б, **Р. Yatskiv**^в, **Ј. Maixner**^г,
С. Р. Лукић-Петровић^а, **Т. Б. Иветић**^а

^а Универзитет у Новом Саду, Природно-математички факултет, Трг Доситеја Обрадовића 3, 21000 Нови Сад, Србија;^б Универзитет у Новом Саду, Факултет техничких наука, Трг Доситеја Обрадовића 6, 21000 Нови Сад, Србија;

^в Институт за фотонику и електронику, Чешка академија наука, Chaberská 1014/57, 182 00 Praha 8-Kobylisy, Чешка Република; ^г Централне лабораторије, Институт хемијских технологија у Прагу, Technická 5, 166 28 Prague 6, Чешка Република

e-mail: rados.raonic@df.uns.ac.rs

M-фазни чврсти раствори $\text{Li}_{1+x-y}\text{Nb}_{1-x-3y}\text{Ti}_{x+4y}\text{O}_3$ ($0,05 < x < 0,3$, $0 < y < 0,182$) у систему $\text{Li}_2\text{O}-\text{Nb}_2\text{O}_5-\text{TiO}_2$ (LNTO) имају електрична и диелектрична својства која су врло погодна за њихову примену у микроталасним компонентама и уређајима. LNTO-керамика је синтетисана комбинацијом методе сагоревања и реакцијама у чврстом стању. Пошто структура и морфологија има велики утицај на диелектрична и електрична својства, испитиване су промене ових својстава узроковане малим додацима ZnO дифракцијом X -зрачења (XRD) и комбинованом скенирајућом електронском микроскопијом (SEM) са енергијски дисперзивном спектроскопијом (EDS) уз мапирање елемената. Рендгенски дифрактограми показују појаву *M*-фаза са $x = 0,15$, $y = 0,17$ и $x = 0,1$, $y = 0,15$ у општој формули, нову фазу $\text{Li}_{1,33}\text{Zn}_2\text{Ti}_{2,67}\text{O}_8$, као и трагове $\text{Li}_8\text{Nb}_4\text{Ti}_5\text{O}_{21}$ и $\text{Li}_{1,377}\text{Nb}_{0,017}\text{Ti}_{1,607}\text{O}_{3,945}$ чврстих раствора који не припадају *M*-фазној групи. Добијени SEM-EDS резултати подржавају XRD закључке и такође показују типичну анизотропну морфологију *M*-фазних честица у виду штапића и дискова, као и пораст у густини керамике са повећањем количине ZnO .

Захвалница:

Овај рад је финансирано Министарство науке, технолошког развоја и иновација Републике Србије (ев. бр. 451-03-47/2023-01/200125) и делимично АПВ Покрајински секретаријат за високо образовање и научноистраживачку делатност (Назив пројекта: „Развој нових високо-осетљивих сензора за мониторинг гасних загађења и влажности у Војводини“, бр. пројекта 142-451-3154/2022-01/2).

PHASE AND MORPHOLOGY CHANGES IN THE LITHIUM-NIOBIUM-TITANIUM-OXIDE SYSTEM INDUCED BY SMALL ADDITIONS OF ZINC OXIDE

R. R. Raonić^a, **D. L. Sekulić**^b, **R. Yatskiv**^c, **J. Maixner**^d, **S. R. Lukić-Petrović**^a, **T. B. Ivetić**^a

^a University of Novi Sad, Faculty of Sciences, Trg Dositeja Obradovića 3, 21000 Novi Sad, Serbia; ^b University of Novi Sad, Faculty of Technical Sciences, Trg Dositeja Obradovića 6, 21000 Novi Sad, Serbia; ^c Institute of Photonics and Electronics, Czech Academy of Sciences, Chaberská 1014/57, 182 00 Praha 8-Kobylisy, Czech Republic; ^d Central Laboratories, Institute of Chemical Technology Prague, Technická 5, 166 28 Prague 6, Czech Republic
e-mail: rados.raonic@df.uns.ac.rs

M-phase solid solutions $\text{Li}_{1+x-y}\text{Nb}_{1-x-3y}\text{Ti}_{x+4y}\text{O}_3$ ($0.05 < x < 0.3$, $0 < y < 0.182$) in the $\text{Li}_2\text{O-Nb}_2\text{O}_5\text{-TiO}_2$ (LNTO) system have electric and dielectric properties which are very suitable for their application in microwave components and devices. LNTO ceramics are synthesized by a combination of the combustion method and solid-state reactions. Since the structure and morphology have a great influence on the dielectric and electric properties, the changes in these properties caused by small additions of ZnO were investigated by X-ray diffraction (XRD) and combined scanning electron microscopy (SEM) with energy dispersive spectroscopy (EDS) with elemental mapping. XRD patterns show the appearance of *M*-phases with $x = 0.15$, $y = 0.17$ and $x = 0.1$, $y = 0.15$ in the general formula, a new phase $\text{Li}_{1.33}\text{Zn}_2\text{Ti}_{2.67}\text{O}_8$, as well as traces of $\text{Li}_8\text{Nb}_4\text{Ti}_5\text{O}_{21}$ and $\text{Li}_{1.377}\text{Nb}_{0.017}\text{Ti}_{1.607}\text{O}_{3.945}$ solid solutions that do not belong to the *M*-phase group. The obtained SEM-EDS results support the XRD conclusions and also show the typical anisotropic morphology of *M*-phase particles in the form of rods and discs, as well as an increase in the density of ceramics with increasing ZnO content.

Acknowledgements:

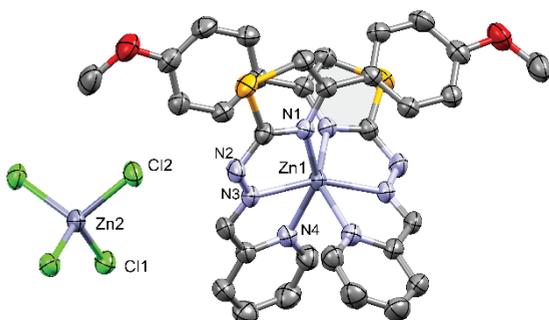
This work was financed by the Ministry of Science, Technological Development and Innovation of the Republic of Serbia (grant no. 451-03-47/2023-01/200125) and partially by the APV Provincial Secretariat for Higher Education and Scientific Research (Project name: "Development of new highly-sensitive sensors for monitoring of gas pollution and humidity in Vojvodina", project no. 142-451-3154/2022-01/2).

Zn(II) КОМПЛЕКС СА 1,3-СЕЛЕНАЗОЛИЛ-ХИДРАЗОНОМ НА БАЗИ ПИРИДИНА

П. Ристић^а, А. Вишњевац^б, Ј. Арашков^а, Н. Филиповић^в, Т. Тодоровић^а

^а Универзитет у Београду – Хемијски факултет, Студентски трг 12-16, Београд; ^б Институт Руђер Бошковић, Бијеничка 54, Загреб, Хрватска; ^в Универзитет у Београду – Пољопривредни факултет, Немањина 6, Београд-Земун, Србија.
e-mail: predrag@chem.bg.ac.rs

Због своје могућности да оствари координационе бројеве од 2 до 9, високе биодоступност и афинитета према *N*, *O*, *S*-донорским атомима, Zn(II) се користи за синтезу комплекса у циљу њихове специфичне примене. У Кембричкој структурној бази података је депоновано само осам кристалних структура комплекса Zn(II), Cd(II) и Co(III) са *N*-хетероароматичним 1,3-селеназолил-хидразонским лигандима. У овом раду је фокус био на кристалној структури комплекса Zn(II) са лигандом HLSe² (**2-Cl-Se**; Слика 1). Молекулска и кристална структура новог комплекса **2-Cl-Se** је упоређена са претходно објављеним Zn(II) комплексом са лигандом HLS² (**2-Cl**), структурним аналогом лиганда HLSe² [1]. Праћен утицај изостерне S/Se замене на топологију и енергетску дистрибуцију интермолекулских интеракција у Zn(II) комплексима са 1,3-селеназолил/тиазолил-хидразонима на бази пиридина.



Слика 1. ORTEP приказ молекулске структуре **2-Cl-Se**. Термални елипсоиди су приказани са 50 % вероватноће. Атоми водоника су изостављени због прегледности.

[1] J. B. Araškov, A. Višnjevac, J. Popović, V. Blagojević, H. S. Fernandes, S. F. Sousa, I. Novaković, J. M. Padrón, B. Barta Holló, M. Monge, M. Rodríguez-Castillo, J. M. López-de-Luzuriaga, N. R. Filipović, T. R. Todorović, *CrystEngComm*, **24** (2022) 5194–5214.

Zn(II) COMPLEX WITH PYRIDINE BASED 1,3-SELENAZOLYL-HYDRAZONE

P. Ristić^a, A. Višnjevac^b, J. Araškov^a, N. Filipović^c, T. Todorović^a

^a University of Belgrade – Faculty of Chemistry, Studentski trg 12-16, Belgrade, Serbia; ^b Institute Ruđer Bošković, Bijenička 54, Zagreb, Croatia; ^c University of Belgrade – Faculty of Agriculture, Nemanjina 6, Belgrade-Zemun, Serbia.

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

Due to its ability to achieve coordination numbers from 2 to 9, high bioavailability, and affinity to *N*, *O*, and *S*-donor atoms, Zn(II) is used for the synthesis of complexes with the aim of their specific application. Only eight crystal structures of Zn(II), Cd(II), and Co(III) complexes with *N*-heteroaromatic 1,3-selenazolyl-hydrazone ligands are deposited in the Cambridge Structural Database. This work is focused on the crystal structure of the Zn(II) complex with the HLSe² ligand (**2-Cl-Se**; Figure 1). The molecular and crystal structure of the new **2-Cl-Se** complex was compared with the previously published Zn(II) complex with the HLS² ligand (**2-Cl**), a structural analog of the HLSe² ligand [1]. The influence of isosteric S/Se substitution on the topology and energy distribution of intermolecular interactions in Zn(II) complexes with pyridine-based 1,3-selenazolyl/thiazolyl-hydrazones was analysed [1].

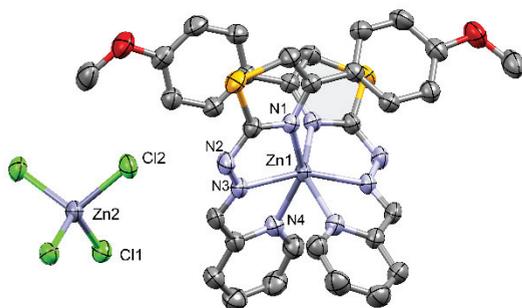


Figure 1. ORTEP drawing of the molecular structure of **2-Cl-Se**. Displacement ellipsoids are shown at 50 % probability level. Hydrogen atoms are omitted for clarity.

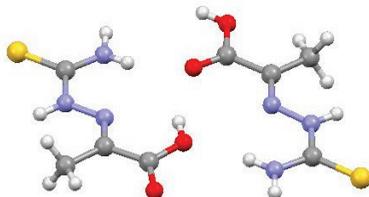
[1] J. B. Araškov, A. Višnjevac, J. Popović, V. Blagojević, H. S. Fernandes, S. F. Sousa, I. Novaković, J. M. Padrón, B. Barta Holló, M. Monge, M. Rodríguez-Castillo, J. M. López-de-Luzuriaga, N. R. Filipović, T. R. Todorović, *CrystEngComm*, **24** (2022) 5194–5214.

СИНТЕЗА И КРИСТАЛНА СТРУКТУРА ТИОСЕМИКАРБАЗОНА ПИРОГРОЖЂАНЕ КИСЕЛИНЕ И ЊЕГОВЕ НАТРИЈУМОВЕ СОЛИ

М. В. Родић ^а, С. Б. Новаковић ^б, Г. А. Богдановић ^б, С. Белошевић ^в,
В. М. Леовац ^а

^а Природно-математички факултет, Универзитет у Новом Саду, Трг Доситеја Обрадовића 3, Нови Сад, Србија; ^б Институт за нуклеарне науке "Винча"-Институт од националног значаја за Републику Србију, Универзитет у Београду, Београд, Србија; ^в Факултет техничких наука, Универзитет у Приштини (Косовска Митровица), Кнеза Милоша 7, Косовска Митровица, Србија
e-mail: snovak@vin.bg.ac.rs

Нова кристална форма тиосемикарбазона пирогрождјане киселине (НЛ) кристализовала је из воденог раствора у присуству СаСО₃, уместо очекиване соли калцијума. Натријумова со тиосемикарбазона пирогрождјане киселине (NaL·4H₂O) добијена је у реакцији натријум-пирувата и тиосемикарбазида. Поређење ових кристалних структура указало је на конформационе варијације и значајне разлике у водоничним везама. Асиметрична јединица структуре НЛ садржи два кристалографски независна молекула са главном разликом у оријентацији киселинског остатка (торзиони угао N–C–C–O(H) износи 179.0 и 4.8° у молекулима А и Б). Водоничне везе N–H···O типа, које укључују тиоамидну и карбоксилну групу, повезују молекуле у парове преко цикличних структурних мотива R²₂(16) и R²₂(12) [1]. Центросиметрична N–H···S интеракција, са хидразинским дозором, формира типичне R²₂(8) прстенове који парове молекула повезују у слојеве. У структури NaL·4H₂O, органски ањони се повезују преко два типа цикличних N–H···S интеракција [два R²₂(8) мотива], које укључују хидразинске и тиоамидне доноре. Карбоксилна група интерагује са катјонима Na⁺ и молекулима воде електростатичким интеракцијама и водоничним везама.



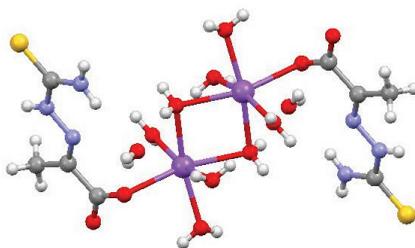
[1] M. C. Etter, *Acc. Chem. Res.*, **23** (1990) 120–126.

SYNTHESIS AND CRYSTAL STRUCTURES OF PYRUVIC ACID THIOSEMICARBAZONE AND ITS SODIUM SALT

M. V. Rodić ^a, S. B. Novaković ^b, G. A. Bogdanović ^b, S. Belošević ^c, V. M. Leovac ^a

^a Faculty of Sciences, University of Novi Sad, Trg Dositeja Obradovica 3, Novi Sad, Serbia; ^b Vinča Institute of Nuclear Sciences - National Institute of the Republic of Serbia, University of Belgrade, Belgrade, Serbia; ^c Faculty of Technical Sciences, University of Priština in Kosovska Mitrovica, Kneza Miloša 7, Kosovska Mitrovica, Serbia
e-mail: snovak@vin.bg.ac.rs

New crystal form of pyruvic acid thiosemicarbazone (HL) crystallized from the aqueous solution in the presence of CaCO₃, instead of the expected calcium salt. Sodium pyruvate thiosemicarbazone (NaL·4H₂O) was obtained from the reaction of sodium pyruvate and thiosemicarbazide. The comparison of crystal structures indicates conformational variations and significant differences in hydrogen bonding patterns. Asymmetric unit of HL contains two crystallographically independent molecules with the main difference in orientation of the carboxylic acid residue (torsion angle N–C–C–O(H) is 179.0 and 4.8° in molecules A and B). The N–H···O hydrogen bonds, involving thioamide and carboxyl groups, serve to link the molecular pairs through the cyclic structural motifs R²₂(16) and R²₂(12) [1]. The centrosymmetric N–H···S interaction, involving the hydrazine donor, leads to typical R²₂(8) rings, which arrange the molecular pairs into layers. In NaL·4H₂O, the organic anions are connected by two types of cyclic N–H···S interactions [two R²₂(8) motifs], involving both hydrazine and thioamide donors. The carboxyl group interacts with Na⁺ cations and water molecules, by electrostatic and hydrogen bonding interactions, respectively.



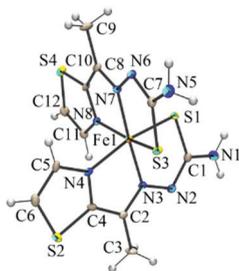
[1] M. C. Etter, *Acc. Chem. Res.*, **23** (1990) 120–126.

СИНТЕЗА И КАРАКТЕРИЗАЦИЈА КОМПЛЕКСА Fe(III) СА КОНДЕНЗАЦИОНИМ ПРОИЗВОДОМ 2-АЦЕТИЛТИАЗОЛА И ТИОСЕМИКАРБАЗИДА

М. Савић^а, А. Певец^б, Д. Радановић^а, М. Златар^а, М. Јевтовић^в

^а Универзитет у Београду - ИХТМ, Центар за хемију, Његошева 12, 11000 Београд, Србија; ^б Факултет за хемију и хемијску технологију, Универзитет у Љубљани, Вечна пот 113, 1000 Љубљана, Словенија; ^в Иновациони центар Хемијског факултета д.о.о., Студентски трг 12-16, 11000 Београд, Србија
e-mail: milica.savic@ihtm.bg.ac.rs

Лиганд (**HL**), (*E*)-2-(1-(тиазол-2-ил)етилиден)хидразин-1-карботиоамид, добијен је у кондензационој реакцији тиосемикарбазида и 2-ацетилтиазола у води. Реакција лиганда и Fe(BF₄)₂·6H₂O у молском односу 1 : 1 у метанолу резултовала је добијањем бис-лиганд комплекса Fe(III), формуле [Fe(L)₂]BF₄·H₂O (**1**). Координовањем два молекула депротонованог лиганда (**L**), преко NNS донорског сета атома формира се *ter* окружење око Fe(III) јона искривљене октаедарске геометрије (Слика 1). Комплекс **1** кристалише у орторомбичном кристалном систему, у просторној групи *Pbca*. Асиметрична јединица комплекса **1** састоји се од комплексног катјона [Fe(L)₂]⁺, анјона BF₄⁻ и једног молекула воде.



Слика 1. Молекулска структура комплексног катјона [Fe(L)₂]⁺.

Захвалница: Овај пројекат је финансиран од стране Фонда за науку Републике Србије, #7750288, Tailoring Molecular Magnets and Catalysts Based on Transition Metal Complexes – TMMagCat.

SYNTHESIS AND CHARACTERIZATION OF Fe(III) COMPLEX WITH THE CONDENSATION PRODUCT OF THIOSEMICARBAZIDE AND 2-ACETYLTHIAZOLE

M. Savić^a, A. Pevec^b, D. Radanović^a, M. Zlatar^a, M. Jevtović^c

^a University of Belgrade - ICTM, Department of Chemistry, Njegoševa 12, 11000 Belgrade, Serbia; ^b Faculty of Chemistry and Chemical Technology, University of Ljubljana, Večna pot 113, 1000 Ljubljana, Slovenia; ^c Innovative Centre of the Faculty of Chemistry ltd., Studentski trg 12-16, 11000 Belgrade, Serbia
e-mail: milica.savic@ihtm.bg.ac.rs

The **HL** ligand, (*E*)-2-(1-(thiazol-2-yl)ethylidene)hydrazine-1-carbothioamide, was obtained from the condensation reaction of thiosemicarbazide and 2-acetylthiazole in water. The reaction of the ligand **HL** with $\text{Fe}(\text{BF}_4)_2 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$ in a molar ratio 1 : 1 in methanol results in the formation of bis-ligand Fe(III) complex with composition $[\text{Fe}(\text{L})_2]\text{BF}_4 \cdot \text{H}_2\text{O}$ (**1**). The Fe(III) ion with **L** form six-coordinate complexes $[\text{Fe}(\text{L})_2]\text{BF}_4 \cdot \text{H}_2\text{O}$ (**1**) in which two deprotonated ligand molecules coordinate in a *mer* arrangement, forming a distorted octahedral complex by chelation through NNS sets of donor atoms (Fig. 1). Complex **1** crystallizes in the orthorhombic crystal system with space group *Pbca*. The asymmetric unit of **1** consists of a complex cation $[\text{Fe}(\text{L})_2]^+$, BF_4^- counter anion, and one water molecule.

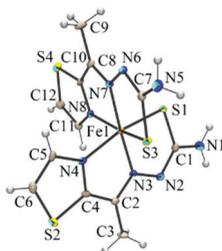


Figure 1. Molecular structure of $[\text{Fe}(\text{L})_2]^+$ complex cation.

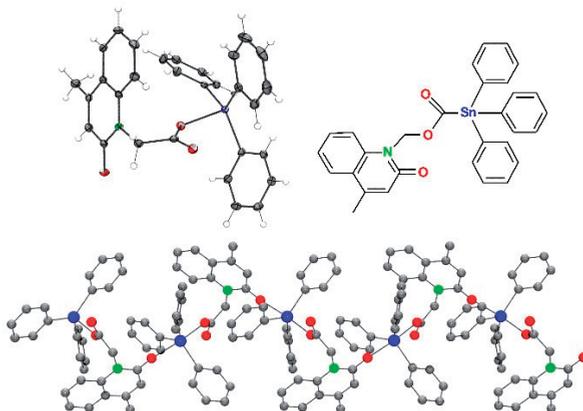
Acknowledgment: This research was supported by the Science Fund of the Republic of Serbia, #7750288, Tailoring Molecular Magnets and Catalysts Based on Transition Metal Complexes – TMMagCat.

MOLEKULARNA I KRISTALNA STRUKTURA 2-(4-METIL-2-OKSOHINOLINIL-1(2H)-IL)ETANOATO)TRIFENILKALAJ(IV) KOMPLEKSA

M.P. Kasalović^{a,b}, **T. Rüffer**^c, **V.V. Jevtić**^b, **N.Đ. Pantelić**^{a,d}, **G.N. Kaluderović**^a

^a Department of Engineering and Natural Sciences, University of Applied Sciences Merseburg, Eberhard-Leibnitz-Straße 2, 06217 Merseburg, Nemačka; ^b Institut za hemiju, Prirodno-matematički fakultet, Univerzitet u Kragujevcu, Radoja Domanovića 12, 34 000 Kragujevac, Srbija; ^c Institute of Chemistry, Chemnitz University of Technology, Straße der Nationen 62, D-09111 Chemnitz, Nemačka; ^d Katedra za hemiju i biohemiju, Poljoprivredni fakultet, Univerzitet u Beogradu, Nemanjina 6, 11080 Beograd, Srbija
e-mail: kasalovicmarijana@gmail.com

2-(4-Metil-2-oksohinolinil-1(2H)-il)etanoato)trifenilkalaj(IV) (**1**) dobijen je u reakciji između 2-(4-metil-2-oksohinolinil-1(2H)-il)etanske kiseline i trifenilkalaj(IV) hlorida. U čvrstom obliku **1** formira cik-cak polimerni lanac, u kome se jon kalaja(IV) nalazi u centru distorgovane trigonalne bipiramide sa tri fenil grupe u ekvatorijalnoj ravni, dok aksijalne položaje zauzimaju jedan kiseonikov atom iz karboksilne grupe i kiseonikov atom iz karbonilne grupe hinolonskog prstena (Slika 1). **1** kristališe u prostornoj grupi P21/c monokliničnog sistema sa parametrima jedinične ćelije: $a = 9.9429(1)$ Å, $b = 13.8691(2)$ Å, $c = 17.5691(3)$ Å, $\alpha = 90^\circ$, $\beta = 92.210(2)^\circ$, $\gamma = 90^\circ$ i $Z = 4$.



Slika 1. Iznad: Molekulska i hemijska struktura **1**. Ispod: Izabrani deo cik-cak lanca koji formira **1**. H atomi su izostavljeni zbog jasnoće.

Istraživanje je podržano od strane Ministarstva za nauku, tehnološki razvoj i inovacije Republike Srbije (Br.: 451-03-47/200116) i DAAD HAW (HoMe.International) projekta Univerziteta Primenjenih Nauka u Merseburgu.

MOLECULAR AND CRYSTAL STRUCTURE OF THE 2-(4-METHYL-2-OXOQUINOLINYL-1(2H)- -YL)ETHANOATO)TRIPHENYLTIN(IV)

M.P. Kasalović^{a,b}, **T. Ruffer**^c, **V.V. Jevtić**^b, **N.Đ. Pantelić**^{a,d} **G.N. Kaluderović**^a

^a Department of Engineering and Natural Sciences, University of Applied Sciences Merseburg, Eberhard-Leibnitz-Straße 2, 06217 Merseburg, Germany; ^b Department of Chemistry, Faculty of Science, University of Kragujevac, Radoja Domanovića 12, 34000 Kragujevac, Serbia; ^c Institute of Chemistry, Chemnitz University of Technology, Straße der Nationen 62, D-09111 Chemnitz, Germany; ^d Department of Chemistry and Biochemistry, Faculty of Agriculture, University of Belgrade, Nemanjina 6, 11080 Belgrade, Serbia

e-mail: kasalovicmarijana@gmail.com

2-(4-Methyl-2-oxoquinoliny-1(2H)-yl)ethanoato)triphenyltin(IV) (**1**) was obtained by reacting 2-(4-methyl-2-oxoquinoliny-1(2H)-yl)acetic acid and triphenyltin(IV) chloride. In solid state **1** forms a zig-zag polymeric chain in which the tin(IV) ion is based in the centre of distorted trigonal-bipyramide with three phenyl groups building the equatorial plane, while the apical positions are occupied by one oxygen atom from the carboxylic group and oxygen from the carbonyl-group of quinolone ring (Figure 1). **1** crystallizes in the monoclinic space group $P2_1/c$ with unit cell parameters: $a = 9.9429(1)$ Å, $b = 13.8691(2)$ Å, $c = 17.5691(3)$ Å, $\beta = 92.210(2)^\circ$ and $Z = 4$.

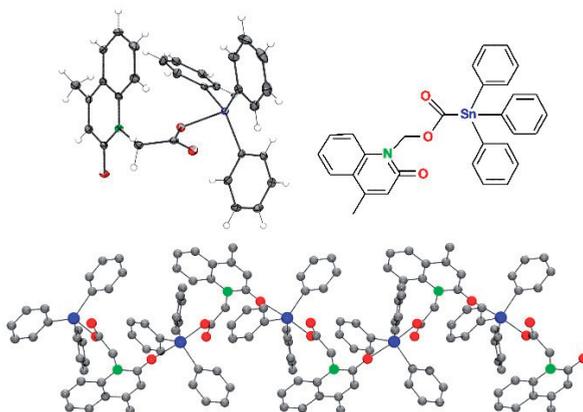


Figure 1. Above: Molecular and chemical structure of **1**. Below: Selected part of one of the zig-zag chains formed by **1**. H atoms are omitted for clarity.

Research was supported by Ministry of Science, Technological Development and Innovation of the Republic of Serbia (Grant No: 451-03-47/200116) and DAAD HAW (HoMe.International) project of the University of Applied Sciences Merseburg.

