

**СРПСКО КРИСТАЛОГРАФСКО ДРУШТВО**

**SERBIAN CRYSTALLOGRAPHIC SOCIETY**

**XXIX КОНФЕРЕНЦИЈА  
СРПСКОГ КРИСТАЛОГРАФСКОГ ДРУШТВА**

**Изводи радова**

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

**Abstracts**

Рума – Ruma  
2024.

**XXIX КОНФЕРЕНЦИЈА СРПСКОГ  
КРИСТАЛОГРАФСКОГ ДРУШТВА**

**Изводи радова**

Издавач:  
Српско кристалографско друштво,  
Ђушина 7, 11000 Београд,  
тел./факс: 011/2635-217

За издавача:  
Марко Родић

Уредник:  
Марко Родић

Технички уредник:  
Марко Родић  
Мирјана Радановић

Помоћни технички уредник:  
Маријана Костић

Издавање ове публикације финансијски је помогло Министарство науке, технолошког развоја и иновација Републике Србије.

© Српско кристалографско друштво

ISBN 978-86-912959-7-4  
ISSN 0354-5741

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

Тираж: 80

Београд  
2024.

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

**Abstracts**

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

On behalf of the Publisher:  
Marko Rodić

Editor:  
Marko Rodić

Technical Editor:  
Marko Rodić  
Mirjana Radanović

Assistant Technical Editor:  
Marijana Kostić

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

© Serbian Crystallographic Society

ISBN 978-86-912959-7-4  
ISSN 0354-5741

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

Copies: 80

Belgrade  
2024.

СР - Каталогизација у публикацији  
Народна библиотека Србије, Београд

548/549(048)

**СРПСКО кристалографско друштво. Конференција (29 ; 2024 ; Рума)**

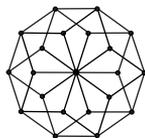
Изводи радова / XXIX конференција Српског кристалографског друштва, Рума ; [уредник Марко Родић] = Abstracts / 29th Conference of the Serbian Crystallographic Society, Ruma 2024. ; [editor Marko Rodić]. - Београд : Српско кристалографско друштво = Belgrade : Serbian Crystallographic Society, 2024 (Београд : Научна КМД = Beograd : Naučna KMD). - XIV, 123 стр. : илустр. ; 24 см. - ([Изводи радова - Српско кристалографско друштво], ISSN 0354-5741)

Апстрактни упоредо на срп. и енгл. језику. - Текст ћир. и лат. - Тираж 80. - Библиографија уз већину апстраката.

ISBN 978-86-912959-7-4

а) Кристалографија – Апстракти б) Минералологија – Апстракти

COBISS.SR-ID 147170057



СРПСКО  
КРИСТАЛОГРАФСКО  
ДРУШТВО

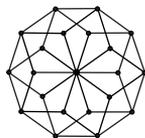
**XXIX КОНФЕРЕНЦИЈА  
СРПСКОГ КРИСТАЛОГРАФСКОГ  
ДРУШТВА**

**Научни одбор:**

др Љилјана Карановић, РГФ, Београд  
др Верица Јевтић, ПМФ, Крагујевац  
др Оливера Клисурић, ПМФ, Нови Сад  
др Александар Кременовић, РГФ, Београд  
др Срђан Ракић, ПМФ, Нови Сад  
др Јелена Роган, ТМФ, Београд  
др Тамара Тодоровић, ХФ, Београд  
др Андријана Жекић, ФФ, Београд  
др Горан Богдановић, „ВИНЧА”, Београд  
др Божидар Чобелић, ХФ, Београд  
др Александра Дапчевић, ТМФ, Београд  
др Мирјана Радановић, ПМФ, Нови Сад  
др Марко Родић, ПМФ, Нови Сад  
др Душан Вељковић, ХФ, Београд  
др Наташа Јовић Орсини, „ВИНЧА”, Београд  
др Мирјана Милић, „ВИНЧА”, Београд  
др Маја Ђукић, ПМФ, Крагујевац  
др Сабина Ковач, РГФ, Београд  
др Лидија Радовановић, ИЦТМФ, Београд

**Организациони одбор:**

др Марко Родић, ПМФ, Нови Сад  
др Оливера Клисурић, ПМФ, Нови Сад  
др Мирјана Радановић, ПМФ, Нови Сад  
др Видак Раичевић, МФ, Нови Сад  
мср Никола Радновић, ПМФ, Нови Сад  
мср Милица Богдановић, ПМФ, Нови Сад  
мср Маријана Костић, ПМФ, Нови Сад



SERBIAN  
CRYSTALLOGRAPHIC  
SOCIETY

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

**Scientific Committee:**

Dr. Ljiljana Karanović, RGF, Belgrade  
Dr. Verica Jevtić, PMF, Kragujevac  
Dr. Olivera Klisurić, PMF, Novi Sad  
Dr. Aleksandar Kremenović, RGF, Belgrade  
Dr. Srđan Rakić, PMF, Novi Sad  
Dr. Jelena Rogan, TMF, Belgrade  
Dr. Tamara Todorović, HF, Belgrade  
Dr. Andrijana Žekić, FF, Belgrade  
Dr. Goran Bogdanović, “VINČA”, Belgrade  
Dr. Božidar Čobeljić, HF, Belgrade  
Dr. Aleksandra Dapčević, TMF, Belgrade  
Dr. Mirjana Radanović, PMF, Novi Sad  
Dr. Marko Rodić, PMF, Novi Sad  
Dr. Dušan Veljković, HF, Belgrade  
Dr. Nataša Jović-Orsini, “VINČA”, Belgrade  
Dr. Mirjana Milić, “VINČA”, Belgrade  
Dr. Maja Đukić, PMF, Kragujevac  
Dr. Sabina Kovač, RGF, Belgrade  
Dr. Lidija Radovanović, ICTMF, Belgrade

**Organizing Committee:**

Dr. Marko Rodić, PMF, Novi Sad  
Dr. Olivera Klisurić, PMF, Novi Sad  
Dr. Mirjana Radanović, PMF, Novi Sad  
Dr. Vidak Raičević, MF, Novi Sad  
M.Sc. Nikola Radnović, PMF, Novi Sad  
M.Sc. Milica Bogdanović, PMF, Novi Sad  
M.Sc. Marijana Kostić, PMF, Novi Sad

# Садржај – Contents

## Пленарна предавања – Plenary Lectures

**Chris S. Hawes**

STRUCTURAL STUDIES OF FUSED HETEROCYCLES FOR FUNCTIONAL COORDINATION NETWORKS.....2

**Volker Kahlenberg**

IRON ORE SINTER – CRYSTALLOGRAPHY MEETS PYROMETALLURGY .....3

**Tibor Tóth-Katona**

LIQUID CRYSTALS BEYOND DISPLAY TECHNOLOGY – A PERSONAL VIEW.....4

**Franc Perdih**

ANTIDIABETIC ACTIVITY OF ZINC AND VANADIUM COORDINATION COMPOUNDS .....6

**Matic Lozinšek**

RECENT DEVELOPMENTS IN STRUCTURAL AND SYNTHETIC CHEMISTRY OF XENON .....7

**Irina S. Konovalova**

COMBINATION OF X-RAY DIFFRACTION AND QUANTUM CHEMISTRY METHODS FOR CRYSTAL PACKING ANALYSIS OF HALOGEN SUBSTITUTED ANILINES .....9

## Усмена саопштења – Oral Presentations

**Marko Dunatov, Krešimir Molčanov, Zoran Štefanić, Robert Kruk, Lidija Androš Dubraja**

СТРУКТУРНЕ ТРАНСФОРМАЦИЈЕ КОМПЛЕКСА АМОНИЈУМ-ВАНАДИЛ-Л-ТАРТАРАТА ИНДУКОВАНЕ ДЕХИДАРАТАЦИЈОМ И РЕХИДРАТАЦИЈОМ .....12

**Marko Dunatov, Krešimir Molčanov, Zoran Štefanić, Robert Kruk, Lidija Androš Dubraja**

DEHYDRATION-REHYDRATION INDUCED STRUCTURAL TRANSFORMATIONS IN AMMONIUM VANADYL-L-TARTARATE COMPLEX .....13

---

<b><u>Милица Г. Богдановић, Бојана Срећо Зеленовић, Слађана Станисављевић, Мирјана Попсавин, Велимир Попсавин, Guido J. Reiss, Марко В. Родић</u></b> АНАЛИЗА МЕЂУМОЛЕКУЛСКИХ ИНТЕРАКЦИЈА У ПОЛИМОРФИМА МУРИКАТАЦИНА .....	14
<b><u>Milica G. Bogdanović, Bojana Srećo Zelenović, Slađana Stanisavljević, Mirjana Popsavin, Velimir Popsavin, Guido J. Reiss, Marko V. Rodić</u></b> ANALYSIS OF INTERMOLECULAR INTERACTIONS IN MURICATACIN POLYMORPHS .....	15
<b><u>Miha Virant, Erik Uran, Kristian Radan, Mirela Dragomir, Matic Lozinšek</u></b> СТУДИЈА ЧВРСТОГ СТАЊА НОВИХ ЈЕДИЊЕЊА СА Хе–N ВЕЗАМА .....	16
<b><u>Miha Virant, Erik Uran, Kristian Radan, Mirela Dragomir, Matic Lozinšek</u></b> SOLID-STATE STUDY OF NOVEL XE–N-BONDED COMPOUNDS .....	17
<b><u>Marijana Jurić, Ana Lozančić, Sanja Burazer, Sanja Renka, Krešimir Molčanov, Lidija Androš Dubraja</u></b> ПРОТОНСКА ПРОВОДЉИВОСТ ХОМО- И ХЕТЕРОМЕТАЛНИХ ЈЕДИЊЕЊА РАЗЛИЧИТЕ ДИМЕНЗИОНАЛНОСТИ СА (АЛКИЛ)АМОНИЈУМСКИМ КАТЈОНИМА .....	18
<b><u>Marijana Jurić, Ana Lozančić, Sanja Burazer, Sanja Renka, Krešimir Molčanov, Lidija Androš Dubraja</u></b> PROTON CONDUCTIVITY OF HOMO- AND HETEROMETALLIC COMPOUNDS OF DIFFERENT DIMENSIONALITY CONTAINING (ALKYL)AMMONIUM CATIONS .....	19
<b><u>Маријана С. Костић, Милица Г. Богдановић, Вукадин М. Леовац, Мирјана М. Радановић</u></b> СТРУКТУРА КОМПЛЕКСА ЦИНКА(II) СА НОВОМ ШИФОВОМ БАЗОМ 2,6-ДИАЦЕТИЛПИРИДИНА .....	20
<b><u>Marijana S. Kostić, Milica G. Bogdanović, Vukadin M. Leovac, Mirjana M. Radanović</u></b> STRUCTURE OF ZINC(II) COMPLEX WITH NOVEL SCHIFF BASE OF 2,6-DIACETYLPIRIDINE .....	21

<b><u>Maја Мариновић, Душан Шкорић, Софија Бекић, Michael Kugler, Jiří Brynda, Jana Škerlová, Pavlína Řezáčová, Анђелка Ђелић, Едвард Петри</u></b> ПОРЕЂЕЊЕ СТРУКТУРА АЛДО-КЕТО РЕДУКТАЗЕ 1Ц3 (АКР1Ц3) У АПОПРОТЕИНСКОЈ ФОРМИ И У КОМПЛЕКСУ СА ТЕТРАЗОЛНИМ ДЕРИВАТОМ ЖУЧНИХ КИСЕЛИНА .....	22
<b><u>Maја Marinović, Dušan Škorić, Sofija Bekić, Michael Kugler, Jiří Brynda, Jana Škerlová, Pavlína Řezáčová, Anđelka Čelić, Edward Petri</u></b> COMPARISON OF ALDO-KETO REDUCTASE 1C3 (AKR1C3) STRUCTURES IN APROTEIN FORM AND BOUND TO BILE-ACID FUSED TETRAZOLE INHIBITOR .....	23
<b><u>Klemen Motaln, Matic Lozinšek</u></b> СИНТЕЗА И СТРУКТУРНА КАРАКТЕРИЗАЦИЈА НОВИХ СОЛИ КОЈЕ САДРЖЕ ЈЕДИНСТВЕНЕ $[M^{IV}F_3(XeF_2)_3]^+$ (M = Pd, Pt) КАТЈОНЕ .....	24
<b><u>Klemen Motaln, Matic Lozinšek</u></b> SYNTHESIS AND STRUCTURAL CHARACTERIZATION OF THE NOVEL SALTS CONTAINING UNIQUE $M^{IV}F_3(XeF_2)_3]^+$ (M = Pd, Pt) CATIONS .....	25
<b><u>Jasminka Popović, Aleksandra Djurišić, Juraj Ovčar, Ivor Lončarić</u></b> СТАБИЛИЗАЦИЈА 2D ПЕРОВСКИТА ПОСРЕДСТВОМ МЕШОВИТИХ ХАЛОГЕНИДНИХ АНЈОНА .....	26
<b><u>Jasminka Popović, Aleksandra Djurišić, Juraj Ovčar, Ivor Lončarić</u></b> STABILIZATION OF 2D PEROVSKITES VIA MIXED HALIDE ANIONS .....	27
<b><u>Kristian Radan, Valentina Milašinović, Miha Virant, Matic Lozinšek</u></b> КСЕНОН–КИСЕОНИК-ВЕЗАНИ КАТЈОН $[H_2NC(F)OXeF]^+$ .....	28
<b><u>Kristian Radan, Valentina Milašinović, Miha Virant, Matic Lozinšek</u></b> THE XENON–OXYGEN-BONDED CATION $[H_2NC(F)OXeF]^+$ .....	29
<b><u>Никола Д. Радновић, Берта Барта Холо, Марко В. Родић</u></b> СИНТЕЗА И СТРУКТУРА ЈОНСКОГ КОКРИСТАЛА Ag(I) СА ЛИГАНДОМ ТИПА ПИРАЗОЛА .....	30
<b><u>Nikola D. Radnović, Berta Barta Holló, Marko V. Rodić</u></b> SYNTHESIS AND STRUCTURE OF IONIC CO-CRYSTAL OF Ag(I) WITH PYRAZOLE-TYPE LIGAND .....	31
<b><u>Лидија Радовановић, Душан Маленов, Јелена Роган</u></b> СЛОЈЕВИТИ ЦИНК–2,2'-БИПИРИМИДИН КОМПЛЕКС СА АНЈОНОМ МЕЛИТНЕ КИСЕЛИНЕ .....	32
<b><u>Lidija Radovanović, Dušan Malenov, Jelena Rogan</u></b> LAYERED ZINC–2,2'-BIPYRIMIDINE COMPLEX WITH ANION OF MELLITIC ACID .....	33

**Guido J. Reiss**

ПОЛИЈОДИДИ ЗАРОБЉЕНИ У ВОДОНИЧНО БЕЗАНИМ УМРЕЖЕНИМ  
СТРУКТУРАМА НЕКИХ ЕТИЛКСАНТИНИЈУМ-КАТЈОНА .....34

**Guido J. Reiss**

POLYIODIDES TRAPPED IN HYDROGEN BONDED FRAMEWORKS OF  
SOME METHYLXANTHINIUM CATIONS.....35

**Ivo B. Rietveld, Gabin Gbabode, Kangli Li, Béatrice Nicolai**

КОМПРЕСИЈА И ТЕРМИЧКА ЕКСПАНЗИЈА ОРГАНСКИХ МОЛЕКУЛА  
ИЗУЧАВАНА ДИФРАКЦИЈОМ ПОЛИКРИСТАЛНИХ УЗОРАКА НА  
СИНХРОТРОНУ .....36

**Ivo B. Rietveld, Gabin Gbabode, Kangli Li, Béatrice Nicolai**

COMPRESSION AND THERMAL EXPANSION OF ORGANIC MOLECULES  
BY SYNCHROTRON POWDER DIFFRACTION .....37

**Mišel Hozjan, Franc Perdih**

КОМПЛЕКСНА ЈЕДИЊЕЊА ЦИНКА СА ДЕРИВАТИМА ПИКОЛИНСКЕ  
КИСЕЛИНЕ.....38

**Mišel Hozjan, Franc Perdih**

ZINC COORDINATION COMPOUNDS WITH PICOLINIC ACID  
DERIVATIVES.....39

**Постерска саопштења – Poster Presentations****Тина П. Андрејевић, Марта Почкај, Невена Љ. Стевановић, Дарко П.**

**Ашанин, Изток Турел, Милош И. Ђуран, Биљана Ђ. Глишић**  
СИНТЕЗА И КРИСТАЛНА СТРУКТУРА КОМПЛЕКСА ЗЛАТА(III) СА  
АЗАКОНАЗОЛОМ .....42

**Tina Andrejević, Marta Počkaj, Nevena Stevanović, Darko Ašanin, Iztok**  
**Turel, Miloš Djuran, Biljana Glišić**

SYNTHESIS AND CRYSTAL STRUCTURE OF GOLD(III) COMPLEX WITH  
AZACONAZOLE.....43

**Тина П. Андрејевић, Бојана В. Пантовић, Јакоб Кљун, Дарко П.**

**Ашанин, Изток Турел, Милош И. Ђуран, Биљана Ђ. Глишић**  
КРИСТАЛНА СТРУКТУРА КОМПЛЕКСА ЗЛАТА(III) СА  
4,5- ДИАЗАФЛУОРЕН-9-ОНОМ.....44

**Tina P. Andrejević, Bojana V. Pantović, Jakob Kljun, Darko P. Ašanin, Iztok**  
**Turel, Miloš I. Djuran, Biljana Đ. Glišić**

CRYSTAL STRUCTURE OF GOLD(III) COMPLEX WITH  
4,5-DIAZAFLUOREN-9-ONE .....45

<b><u>Јована Арашков</u>, Александар Вишњевац, Тамара Тодоровић, Ненад Филиповић</b> МОЛЕКУЛСКА И КРИСТАЛНА СТРУКТУРА КОМПЛЕКСА Zn(II) СА ХИДРАЗОНИЛ-ТИАЗОЛСКИМ ЛИГАНДОМ.....	46
<b><u>Jovana Araškoy</u>, Aleksandar Višnjevac, Tamara Todorović, Nenad Filipović</b> MOLECULAR AND CRYSTAL STRUCTURES OF Zn(II) COMPLEXES WITH HYDRAZONYL-THIAZOLE LIGAND .....	47
<b><u>Милица Г. Богдановић</u>, Видак Н. Раичевић, Маик Wyshusek, Ема В. Беговић, Вања С. Николић, Ивана Д. Пештерић, Сандра З. Шереш, Марко В. Родић</b> СИНТЕЗА И КРИСТАЛНА СТРУКТУРА ДЕРИВАТА ХИНУКЛИДИНОНА .....	48
<b><u>Milica G. Bogdanović</u>, Vidak N. Raičević, Maik Wyshusek, Ema V. Begović, Vanja S. Nikolić, Ivana D. Pešterić, Szandra Z. Seres, Marko V. Rodić</b> SYNTHESIS AND CRYSTAL STRUCTURE OF QUINUCLIDINONE DERIVATES .....	49
<b><u>Љубица Брењо</u>, Оливера Клисурић, Александар Окљеша</b> КРИСТАЛОГРАФСКЕ И РАЧУНАРСКЕ СТУДИЈЕ НОВОГ ХИДРАЗОНО-ТЕТРАЗОЛА .....	50
<b><u>Ljubica Brenjo</u>, Olivera Klisurić, Aleksandar Oklješa</b> CRYSTALLOGRAPHIC AND COMPUTATIONAL STUDIES OF A NEW HYDRAZONO TETRAZOLE COMPOUND .....	51
<b><u>Ивана С. Вељковић</u>, Данијела С. Кретић, Душан Ж. Вељковић</b> УТИЦАЈ СУПСТИТУЕНАТА НА ОСЕТЉИВОСТ ВИСОКОЕНЕРГЕТСКИХ НИТРОАРОМАТИЧНИХ МОЛЕКУЛА .....	52
<b><u>Ivana S. Veljković</u>, Danijela S. Kretić, Dušan Ž. Veljković</b> INFLUENCE OF THE SUBSTITUENTS ON THE SENSITIVITY OF HIGH-ENERGY NITROAROMATIC MOLECULES .....	53
<b>Јелена И. Радовановић, Душан Ж. Вељковић</b> ПНИКТОГЕНЕ ИНТЕРАКЦИЈЕ У КРИСТАЛНИМ СТРУКТУРАМА НИТРОАРОМАТИЧНИХ ЕКСПЛОЗИВА.....	54
<b>Jelena I. Radovanović, Dušan Ž. Veljković</b> PNICTOGEN INTERACTIONS IN CRYSTAL STRUCTURES OF NITROAROMATIC EXPLOSIVES .....	55
<b><u>Martina Vrankić</u>, Takeshi Nakagawa, Yang Ding, Jasminka Popović, Anna Moliterni, Damir Pajić</b> СУСРЕТ КРИСТАЛОГРАФИЈЕ И НАУКЕ О МАТЕРИЈАЛИМА .....	56

---

<b><u>Martina Vrankić, Takeshi Nakagawa, Yang Ding, Jasminka Popović, Anna Moliterni, Damir Pajić</u></b> WHERE CRYSTALLOGRAPHY MEETS MATERIALS SCIENCE .....	57
<b><u>Предраг Дабић, Александар Кременовић, Љиљана Карановић</u></b> СИНТЕЗА МОНОКРИСТАЛА ТЕСЕРАЛНЕ $K_{1-x}Al_{1-x}Si_xO_2$ ФАЗЕ .....	58
<b><u>Predrag Dabić, Aleksandar Kremenović, Ljiljana Karanović</u></b> SYNTHESIS OF $K_{1-x}Al_{1-x}Si_xO_2$ CUBIC SINGLE CRYSTAL .....	59
<b><u>Сања Ђокић, Марко В. Родић, Мирјана Попсавин, Велимир Попсавин, Јована Француз</u></b> МОЛЕКУЛСКЕ И КРИСТАЛНЕ СТРУКТУРЕ (+)-АСПЕРИЛАКТОНА Ц И 7- <i>epi</i> -(+)-АСПЕРИЛАКТОНА Ц .....	60
<b><u>Sanja Đokić, Marko V. Rodić, Mirjana Popsavin, Velimir Popsavin, Jovana Francuz</u></b> MOLECULAR AND CRYSTAL STRUCTURES OF (+)-ASPERILACTONE C AND 7- <i>epi</i> -(+)-ASPERILACTONE C .....	61
<b><u>Сања Ђокић, Марко В. Родић, Мирјана Попсавин, Велимир Попсавин, Јована Француз</u></b> МОЛЕКУЛСКЕ И КРИСТАЛНЕ СТРУКТУРЕ (+)- И (-)-АСПЕРИЛАКТОНА Б .....	62
<b><u>Sanja Đokić, Marko V. Rodić, Mirjana Popsavin, Velimir Popsavin, Jovana Francuz</u></b> MOLECULAR AND CRYSTAL STRUCTURES OF (+)- AND (-)-ASPERILACTONES B .....	63
<b><u>Маја Б. Ђукић, Јелена М. Петронијевић, Марија С. Ристић, Слађана Б. Новаковић</u></b> СИНТЕЗА И КРИСТАЛНА СТРУКТУРА [Ru- <i>p</i> -cymene-L] КОМПЛЕКСА .....	64
<b><u>Maја B. Đukić, Jelena M. Ptronijević, Marija S. Jeremić, Slađana B. Novaković</u></b> SYNTHESIS AND CRYSTAL STRUCTURE OF [Ru- <i>p</i> -cymene-L] COMPLEX .....	65
<b><u>Горан В. Јањић, Љиљана Т. Суручић, Александра А. Ракић, Немања П. Тришовић</u></b> ТЕОРИЈСКА СТРАТЕГИЈА ЗА ПРОИЗВОДЊУ ПОЛИМОРФА V КАРБАМАЗЕПИНА .....	66
<b><u>Goran V. Janjić, Ljiljana T. Surčić, Aleksandra A. Rakić, Nemanja P. Trišović</u></b> THEORETICAL STRATEGY FOR THE PRODUCTION OF THE CARBAMAZEPINE POLYMORPH V .....	67

<b><u>Наташа Јовић Орсини</u>, Мирјана М. Милић, Душан К. Божанић</b> ОПТИЧКЕ, МАГНЕТНЕ И СТРУКТУРНЕ ОСОБИНЕ НАНОКОМПЗИТА ЦИНК-ФЕРИТ/ТИТАН(IV)-ОКСИД .....	68
<b><u>Nataša Jović Orsini</u>, Mirjana M. Milić, Dušan K. Božanić</b> OPTICAL, MAGNETIC AND STRUCTURAL PROPERTIES OF ZINC FERRITE COUPLED TITANIA NANOCOMPOSITE.....	69
<b>Данијела Луковић Голић, Наташа Јовић Орсини, Александар</b> <b>Радојковић, Ненад Николић, Милутин Ивановић</b> XRD И XPS АНАЛИЗА КЕРАМИКЕ БИЗМУТ-ФЕРИТА ДОПИРАНЕ ЛАНТАНОМ И ЕУРОПИЈУМОМ .....	70
<b>Danijela Luković Golić, Nataša Jović Orsini, Aleksandar Radojković, Nenad</b> <b>Nikolić, Milutin Ivanović</b> XRD AND XPS ANALYSIS OF BISMUTH FERRITE CERAMICS DOPED WITH LANTHANUM AND EUROPIUM.....	71
<b>Сања Б. Коканов, Александар Вишњевац, Тамара Тодоровић, Ненад</b> <b>Филиповић</b> СИНТЕЗА И КАРАКТЕРИЗАЦИЈА КОМПЛЕКСА Cd(II) СА ХИДРАЗОНИЛ-1,3-ХАЛКОГЕНАЗОЛИМА .....	72
<b><u>Sanja B. Kokanov</u>, Aleksandar Višnjevac, Tamara Todorović, Nenad</b> <b>Filipović</b> SYNTHESIS AND CHARACTERIZATION OF COMPLEXES Cd(II) WITH HYDRAZONYL-1,3-CHALCOGENAZOLES .....	73
<b>Данијела С. Кретић, Весна Б. Медаковић, Душан Ж. Вељковић,</b> <b>ПОРЕЂЕЊЕ ЕЛЕКТРОСТАТИЧКИХ ПОТЕНЦИЈАЛА У КРИТИЧНИМ</b> <b>ТАЧКАМА ЗА РАЗЛИЧИТЕ КРИСТАЛНЕ СТРУКТУРЕ</b> <b>ВИСОКОЕНЕРГЕТСКИХ МАТЕРИЈАЛА .....</b>	74
<b><u>Danijela S. Kretić, Vesna B. Medaković, Dušan Ž. Veljković</u></b> COMPARING ELECTROSTATIC POTENTIAL VARIATIONS IN CRITICAL POINTS FOR DIFFERENT CRYSTAL STRUCTURES OF HIGH-ENERGY MATERIALS .....	75
<b><u>Јелена Лађаревић, Лидија Радовановић, Александра Машуловић,</u></b> <b>Немања Тришовић, Жељко Витник, Јелена Роган, Душан Мијин</b> <b>АНАЛИЗА КРИСТАЛНОГ ПАКОВАЊА ХЛОРО-ДЕРИВАТА АЗО</b> <b>ПИРИДОНСКЕ БОЈЕ .....</b>	76
<b><u>Jelena Lađarević, Lidija Radovanović, Aleksandra Mašulović, Nemanja</u></b> <b>Trišović, Željko Vitnik, Jelena Rogan, Dušan Mijin</b> ANALYSIS OF THE CRYSTAL PACKING OF AZO PYRIDONE DYE BEARING CHLORINE ATOM.....	77

---

<b><u>Анита Лазич, Нађа Грозданић Станисављевић, Лидија Радовановић, Јелена Роган, Горан Јањић, Ивана Ђорђевић, Немања Тришовић</u></b> СТРУКТУРНА АНАЛИЗА СПИРОХИДАНТОИНА СА УВРНУТОМ АМИДНОМ ВЕЗОМ КАО АНТИКАНЦЕРСКИХ АГЕНАСА .....	78
<b><u>Anita Lazić, Nada Grozdanić Stanislavljević, Lidija Radovanović, Jelena Rogan, Goran Janjić, Ivana Đorđević, Nemanja Trišović</u></b> STRUCTURAL ANALYSIS OF TWISTED AMIDES BASED ON THE SPIRONYDANTOIN SCAFFOLD WITH THE ANTICANCER ACTIVITY .....	79
<b><u>Биљана Максимовић, Бранислава Вучетић, Андријана Жекић, Милица Милојевић</u></b> ПРОУЧАВАЊЕ УТИЦАЈА ИСТОРИЈЕ РАСТА НА ПАРАМЕТРЕ РАСТА КРИСТАЛА КАЛИЈУМ-ДИХИДРОГЕНФОСФАТА .....	80
<b><u>Biljana Maksimović, Branislava Vučetić, Andrijana Žekić, Milica Milojević</u></b> STUDY OF THE INFLUENCE OF THE GROWTH HISTORY ON THE GROWTH PARAMETERS OF POTASSIUM DIHYDROGEN PHOSPHATE (KDP) CRYSTALS .....	81
<b><u>Александра Машуловић, Кристина Гак Симић, Ивана Ђорђевић, Лидија Радовановић, Franck Camerel, Olivier Jeannin, Немања Тришовић</u></b> КРИСТАЛНА СТРУКТУРА ТРИНУКЛЕАРНОГ ЦИНК(II)–АЦЕТАТО КОМПЛЕКСА СА ЛИГАНДОМ НА БАЗИ АЗОПИРИДИНА .....	82
<b><u>Aleksandra Mašulović, Kristina Gak Simić, Ivana Đorđević, Lidija Radovanović, Franck Camerel, Olivier Jeannin, Nemanja Trišović</u></b> CRYSTAL STRUCTURE OF A TRINUCLEAR ZINC(II)–ACETATO COMPLEX WITH AN AZOPYRIDINE-BASED LIGAND .....	83
<b><u>Мирјана М. Милић, Наташа Јовић Орсини</u></b> ТОПЛОТНО ИНДУКОВАНО ФОРМИРАЊЕ $\varepsilon$ -Fe <sub>2</sub> O <sub>3</sub> ФАЗЕ ИЗ НАНОЧЕСТИЦА АКАГАНИТА .....	84
<b><u>Mirjana M. Milić, Nataša Jović Orsini</u></b> HEAT-INDUCED FORMATION OF $\varepsilon$ -Fe <sub>2</sub> O <sub>3</sub> PHASE FROM SILICA COATED AKAGANEITE NANOPARTICLES .....	85
<b><u>Андреј Миливојац, Александар Вишњевац, Ненад Филиповић, Тамара Тодоровић</u></b> КОМПЛЕКСИ Cu(II) СА ДИПИРИДИЛ И БЕНЗОИЛ-ПИРИДИН ХИДРАЗОНИЛ-ТИАЗОЛИМА .....	86
<b><u>Andrej Milivojac, Aleksandar Višnjevac, Tamara Todorović, Nenad Filipović</u></b> Cu(II) COMPLEXES WITH DIPYRIDYL AND BENZOYL-PYRIDINE HYDRAZONYL-THIAZOLES .....	87

<b><u>Наталија Милојковић, Бојана Симовић, Александра Дапчевић</u></b> NANOANATAS ДОПИРАН ЈОНИМА ПРЕЛАЗНИХ МЕТАЛА ЗА ПРИМЕНУ У ФОТОКАТАЛИЗИ И АДСОРПЦИЈИ .....	88
<b><u>Natalija Milojković, Bojana Simović, Aleksandra Dapčević</u></b> TRANSITION METAL ION DOPED NANOANATASE FOR PHOTOCATALYTIC AND ADSORPTION APPLICATION.....	89
<b><u>Јована Бугариновић, Слађана Новаковић, Горан Богдановић, Драгана Стевановић, Марко Пешић, Анка Тодосијевић, Иван Дамљановић</u></b> НОВИ ДЕРИВАТИ ТЕТРАХИДРОПИРАЗОЛОПИРАЗОЛОНА .....	90
<b><u>Jovana Bugarinović, Slađana Novaković, Goran Bogdanović, Dragana Stevanović, Marko Pešić, Anka Todosijević, Ivan Damljanović</u></b> NEW TETRAHYDROPIRAZOLOPYRAZOLONE DERIVATIVES .....	91
<b><u>Марија М. Петковић Benazzouz, Мирјана Ж. Сарван, Ивана Ђорђевић, Катарина М. Милетић, Горан В. Јањић</u></b> ИСПИТИВАЊЕ УТИЦАЈА ГЕОМЕТРИЈСКИХ ПАРАМЕТАРА НА ИНТЕРАКЦИЈЕ ИЗМЕЂУ АТОМА ФЛУОРА И АТОМА КИСЕОНИКА (F···O).....	92
<b><u>Marija M. Petković Benazzouz, Mirjana Ž. Sarvan, Ivana Djordjevic, Katarina M. Miletić, Goran V. Janjić</u></b> EXPLORING THE INFLUENCE OF GEOMETRIC PARAMETERS ON FLUORINE-OXYGEN (F···O) INTERACTIONS.....	93
<b><u>Видак Раичевић, Милица Г. Богдановић, Нико Радуловић, Марко В. Родић</u></b> КРИСТАЛОГРАФИЈА ПРУЖА НОВИ УВИД У КОНДЕНЗАЦИЈУ 17 $\alpha$ -МЕТИЛТЕСТОСТЕРОНА И ФЕРОЦЕНКАРБАЛДЕХИДА .....	94
<b><u>Vidak Raičević, Milica G. Bogdanović, Niko Radulović, Marko V. Rodić</u></b> CRYSTALLOGRAPHY PROVIDES NEW INSIGHTS INTO THE CONDENSATION OF 17 $\alpha$ -METHYLTESTOSTERONE AND FERROCENECARBOXALDEHYDE.....	95
<b><u>Предраг Ристић, Марко Родић, Ненад Филиповић, Тамара Тодоровић</u></b> ДИНУКЛЕАРНИ КОМПЛЕКС Cu(II) СА КОНДЕНЗАЦИОНИМ ПРОИЗВОДОМ 2-АЦЕТИЛПИРИДИНА И ДИХИДРАЗИДА МАЛОНСКЕ КИСЕЛИНЕ.....	96
<b><u>Predrag Ristić, Marko Rodić, Nenad Filipović, Tamara Todorović</u></b> DINUCLEAR Cu(II) COMPLEX WITH THE CONDENSATION DERIVATIVE OF 2-ACETILPYRIDINE AND MALONIC ACID DIHYDRAZIDE .....	97

<b><u>Милица Савић, Божидар Чобелић, Матија Златар, Маја Груден, Андреј Певец</u></b> КРИСТАЛНЕ СТРУКТУРЕ ТРИ НОВА ХИДРАЗОНСКА КОМПЛЕКСА ЦИНКА .....	98
<b><u>Milica Savić, Božidar Čobeljić, Matija Zlatar, Maja Gruden, Andrej Pevec</u></b> CRYSTAL STRUCTURES OF THREE NEW Zn(II) HYDRAZONE COMPLEXES .....	99
<b>Марија М. Петковић Benazzouz, <u>Мирјана Ж. Сарван, Катарина М. Милетић, Горан В. Јањић, Александра А. Ракић</u></b> ИСПИТИВАЊЕ F...F ИНТЕРАКЦИЈА У КРИСТАЛНИМ СТРУКТУРАМА: УВИД У ГЕОМЕТРИЈСКО УРЕЂЕЊЕ .....	100
<b>Marija M. Petković Benazzouz, <u>Mirjana Ž. Sarvan, Katarina M. Miletić, Goran V. Janjić, Aleksandra A. Rakic</u></b> EXPLORING F...F INTERACTIONS IN CRYSTAL STRUCTURES: INSIGHTS INTO GEOMETRIC ARRANGEMENTS .....	101
<b><u>Снежана Селаковић, Марко В. Родић, Маја Шумар Ристовић</u></b> СИНТЕЗА И КАРАКТЕРИЗАЦИЈА КОМПЛЕКСА Cu(II) СА ДЕРИВАТОМ САЛИЦИЛАЛДЕХИДА И $\alpha$ -ДИИМИНА .....	102
<b><u>Snežana Selaković, Marko V. Rodić, Maja Šumar Ristović</u></b> SYNTHESIS AND CHARACTERIZATION OF Cu(II) COMPLEXES WITH SALICYLALDEHYDE DERIVATE AND $\alpha$ -DIIMINES .....	103
<b><u>Павле Танчић, Александар Кременовић</u></b> УТИЦАЈ БАЗНЕ ЛИНИЈЕ НА РЕЗУЛТАТЕ РИТВЕЛД АНАЛИЗЕ ФОСФОР-ВОЛФРАМОВЕ БРОНЗЕ .....	104
<b><u>Pavle Tančić, Aleksandar Kremenović</u></b> THE INFLUENCE OF THE BASE LINE ON THE RESULTS OF THE RIETVELD ANALYSIS OF PHOSPHORUS-TUNGSTEN BRONZE .....	105
<b><u>Желько Јаћимовић, Сергиу Шова, Давид Кочовић, Миљан Бигович, Зоран Д. Томић</u></b> ТРИНУКЛЕАРНИ КОМПЛЕКС КОБАЛТА СА ДВОСТРУКИМ ХЛОРИДНИМ МОСТОВИМА И 5-(4-БРОМФЕНИЛ)-3-МЕТИЛ- ПИРАЗОЛОМ .....	106
<b><u>Željko Jaćimović, Sergiu Shova, David Kočović, Miljan Bigović, Zoran D. Tomić</u></b> TRINUCLEAR DICHLORO-BRIDGED COBALT COMPLEX WITH 5-(4-BROMOPHENYL)-3-METHYL-1H-PYRAZOLE .....	107

---

<b>Кристина Гак Симић, Александра Машуловић, Ивана Ђорђевић, Лидија Радовановић, Franck Camerel, Olivier Jeannin, <u>Немања Тришовић</u></b> КОМПЛЕКС ЦИНКА(II) СА ЛИГАНДОМ НА БАЗИ АЗОПИРИМИДИНА: КРИСТАЛОГРАФСКА И КВАНТНО-ХЕМИЈСКА АНАЛИЗА .....108	108
<b>Kristina Gak Simić, Aleksandra Mašulović, Ivana Đorđević, Lidija Radovanović, Franck Camerel, Olivier Jeannin, <u>Nemanja Trišović</u></b> ZINC(II) COMPLEX WITH AN AZOPYRIMIDINE-BASED LIGAND: A CRYSTALLOGRAPHIC AND QUANTUM-CHEMICAL STUDY .....109	109
<b><u>Марија Шуљагић</u>, Љубица Анђелковић, Александар Кременовић, Владимир Павловић</b> СТРУКТУРНА И МОРФОЛОШКА СВОЈСТВА $\text{Bi}_2\text{O}_3$ СИНТЕТИСАНОГ МЕТОДОМ МОДИФИКОВАНЕ РЕВЕРЗНЕ КОПРЕЦИПИТАЦИЈЕ .....110	110
<b><u>Marija Šuljagić</u>, Ljubica Anđelković, Aleksandar Kremenović, Vladimir Pavlović</b> STRUCTURAL AND MORPHOLOGICAL PROPERTIES OF $\text{Bi}_2\text{O}_3$ PREPARED BY MODIFIED REVERSED COPRECIPITATION ROUTE .....111	111

**Пленарна предавања**

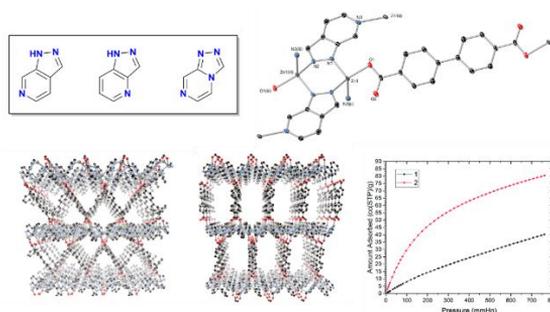
**Plenary Lectures**

## STRUCTURAL STUDIES OF FUSED HETEROCYCLES FOR FUNCTIONAL COORDINATION NETWORKS

Chris S. Hawes <sup>a</sup>  <https://orcid.org/0000-0001-6902-7939>

<sup>a</sup> School of Chemical and Physical Sciences, Keele University, Keele, United Kingdom  
e-mail: c.s.hawes@keele.ac.uk

Despite their ever-increasing popularity in inorganic chemistry and materials science research, industrial applications of Metal-Organic Frameworks (MOFs) are still hampered by recurring issues around stability and cost. Wider exploration of ligand-centred functionalities may overcome this bottleneck and lead to a wider and more diverse application scope for these materials. While much of the periodic table is represented in MOF chemistry in terms of metal nodes, organic ligands in the most well-known MOFs are still mostly drawn from aromatic carboxylates alongside smaller sub-groups of heterocyclic ligands [1]. The unique properties of azolate ligands, however, have been responsible for significant improvement in the industrial performance of some of the top candidate CO<sub>2</sub> capture materials, such as CALF-20 [2]. Our goal is to examine the crystalline coordination assemblies of ligands containing fused azolate functionalities [3] exploiting the hydrolysis resistance offered by strong metal-azolate bonds and the opportunities for new geometries and backbone functionalities in these systems (**Figure 1**). This presentation will outline our progress in using novel pyrazolopyridine and triazolopyrazine building blocks to construct crystalline MOFs and coordination assemblies exhibiting improved stabilities and CO<sub>2</sub> uptake performance.



**Figure 1.** Examples of fused pyrazolopyridine and triazolopyrazine ligands, their resulting coordination compounds and indicative CO<sub>2</sub> uptake performance.

- [1] F. A. A. Paz, *et al.*, *Chem. Soc. Rev.* **41** (2012) 1088  
 [2] J.-B. Lin, *et al.*, *Science* **374** (2021) 1464  
 [3] A. M. Swarbrook, *et al.*, *Dalton Trans.* **51** (2022) 1056; O. G. Wood, *et al.*, *CrystEngComm* **25** (2023) 6371.

*Acknowledgement:* C.S.H. gratefully acknowledges the Royal Society of Chemistry (E21-4110373157; U21-3181589040), The Royal Society (RGS\R1\191227) and the School of Chemical and Physical Sciences, Keele University, for funding support.

## IRON ORE SINTER – CRYSTALLOGRAPHY MEETS PYROMETALLURGY

**Volker Kahlenberg** <sup>a</sup>  <https://orcid.org/0000-0002-0652-7984>

<sup>a</sup> *Institute of Mineralogy and Petrography, University of Innsbruck, Innsbruck, Austria*  
e-mail: volker.kahlenberg@uibk.ac.at

The blast furnace is the central component of the steelmaking process, where metallic iron is produced by reducing iron ore. The ore undergoes initial mechanical processing, resulting in two main particle fractions: lump (31.5 to 6.3 mm) and fine (<6.3 mm) products. However, the fine fraction, which constitutes the majority of the particles, cannot be directly utilized in the blast furnace process due to particle loss in the top gas and clogging of the furnace's gas permeability. Consequently, fines are often transformed into larger sinter pieces through a complex series of high-temperature reactions in a sinter plant. These reactions result in the formation of porous, semi-molten, centimeter-sized aggregates that contain ore particles (hematite and magnetite, 40 to 70% by volume) cemented by a matrix of Ca-rich ferrites (20 to 50%), up to 10% of quenched melt (glass), and approximately 10% of calcium silicates such as larnite [1].

The acronym SFCA was created for the aforementioned Ca-rich ferrites that contain silica and alumina. SFCAs represent complex solid solutions in the  $\text{CaO}(\text{+MgO})\text{-Al}_2\text{O}_3\text{-Fe}_2\text{O}_3(\text{+FeO})\text{-SiO}_2$  system and act as the primary binder to keep the sinters intact to withstand loading stress within the blast furnace.

From a structural perspective, the SFCA series can be divided into four distinct phases with a general composition of  $\text{A}_{14+6n}\text{O}_{20+8n}$ . These phases are denoted as SFCA, SFCA-I, SFCA-II, and SFCA-III for  $n = 0, 1, \frac{1}{2},$  and 2, respectively. The crystal structures of the SFCAs can be classified by different stacking sequences of pyroxene (P) and spinel (S) modules. Complications arise from the fact that SFCAs are subject to polytypism, disorder, twinning phenomena, and intricate cation substitutions, making them one of the most complex groups of inorganic compounds.

Despite the critical role that SFCA phases play in the production of iron ore sinters, there are still many unanswered questions regarding their composition, atomic structure, thermochemistry, and stability. This contribution provides an overview of the current state of crystallographic knowledge about these fascinating materials.

[1] T. Patrick, R. Lovel, *ISIJ International* **41** (2001) 128.

## LIQUID CRYSTALS BEYOND DISPLAY TECHNOLOGY – A PERSONAL VIEW

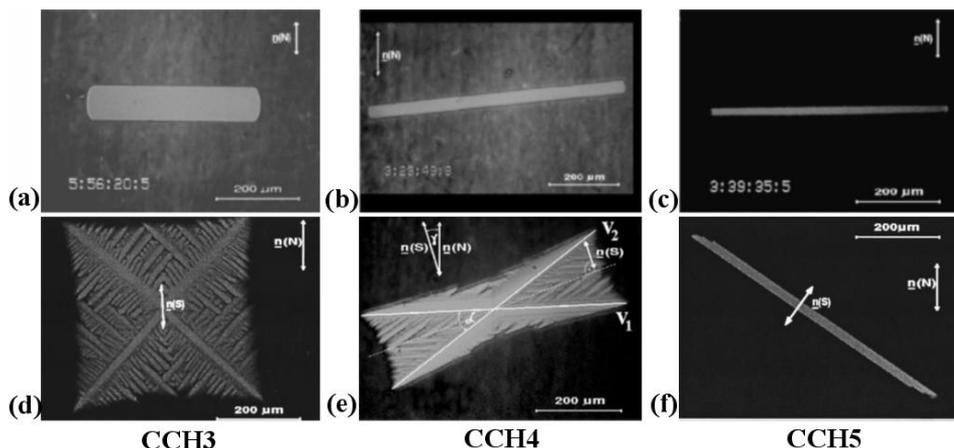
Tibor Tóth-Katona <sup>a</sup>  <https://orcid.org/0000-0002-5075-9782>

<sup>a</sup> Institute for Solid State Physics and Optics, HUN-REN Wigner Research Centre for Physic, Budapest, Hungary

e-mail: tothkatona.tibor@wigner.hun-ren.hu

After a brief introduction to liquid crystals (LCs), I will discuss their basic optical, elastic, viscous, electric and magnetic properties, as well as the anchoring of LCs at the interface with other media [1]. The purpose of the presentation is to demonstrate that the capabilities of LCs go far beyond the display technology to which they owe their reputation. To do so, I will consider some examples of LCs in thermal-, electric-, magnetic-, and optical fields from my personal experience.

In particular, as an example of LCs in thermal field, the 1<sup>st</sup> order nematic-to-smectic B liquid crystal phase transition will be discussed, in which the role of the surface tension anisotropy (see **Figure 1**) [2] and the heat diffusion anisotropy [3] will be emphasized. The effect of spatially homogeneous time-periodic forcing on the dendritic crystal growth will be demonstrated through tuning the dendritic side-branching via oscillating pressure (that changes the phase transition temperature in accordance with the Clausius–Clapeyron relation), or via electrical heating [4]. Such modulations in crystallizing systems might open new routes in designing materials.



**Figure 1.** (a)-(c) Shape of the smectic B germ surrounded by nematic phase in thermal equilibrium for three CCH $n$  ( $n=3,4,5$ ) members of cyano-bicyclohexane homologous series. (d)-(f) Nucleation and free growth of the smectic B phase in the undercooled nematic phase of CCH $n$  compounds.

As a representative example of LCs in electric field, the electroconvection (EHC) of the nematic LCs will be mentioned. Besides of the traditional, electro-optical observations, fluctuation measurements on the injected electric power will be discussed,

which have established close analogy between defects in EHC and thermal plumes in Rayleigh–Bénard convection [5]. The probability distribution function (PDF) of the fluctuations in many cases exhibited non-Gaussian character, showing instead the so-called generalized Fisher–Tippet–Gumbel distribution (sometimes called universal distribution), known from very disparate non-equilibrium systems (e.g., turbulent swirling von Kármán flow, fluctuations in Danube water level, simulations of the 3D X-Y model at criticality) [6].

Because of the low magnetic susceptibility anisotropy of nematic LCs ( $|\chi_a| \sim 10^{-7}$ ), the so called *ferronematics* have been used for investigations in magnetic fields. Ferronematics are colloidal systems in which nematic LCs are doped with magnetic nanoparticles in low volume fractions (typically  $\sim 10^{-4}$ – $10^{-3}$ ). Two effects will be considered: the response of ferronematics to very low magnetic fields (magnetic induction of  $B \sim 10$  mT) [7], and the tuneability of the nematic-to-isotropic phase transition temperature with magnetic fields [8].

Regarding liquid crystals in optical fields, light-induced instability at the substrate with photosensitive monolayer will be discussed, and the mechanism behind it will be presented briefly [9]. Photoalignment phenomena at the polymer–LC interface, demonstrating the importance of the interactions between the polymer layer and the LC molecules will also be mentioned [10].

Finally, some unique effects will be presented on recently discovered [11] ferroelectric nematic phase (not to be mixed with the above mentioned ferronematics), which proves beyond doubt that liquid crystals are about much more than display technology.

- [1] N. Tomašovičová *et al.*, *Nanoscale Adv.* **3** (2021) 2777
- [2] Á. Buka *et al.*, *Phys. Rev. E* **49** (1994) 5271; *Ibid.*, **51** (1995) 571; T. Tóth-Katona *et al.*, *Phys. Rev. E* **54** (1996) 1574
- [3] R. González-Cinca *et al.*, *J. Cryst. Growth* **193** (1997) 712
- [4] T. Börzsönyi *et al.*, *Phys. Rev. Lett.* **83** (1999) 2853
- [5] T. Tóth-Katona *et al.*, *Phys. Rev. E* **68** (2003) 030101(R)/1–4
- [6] T. Tóth-Katona, J.T. Gleeson, *Phys. Rev. Lett.* **91** (2003) 264501/1–4
- [7] N. Tomašovičová *et al.*, *Phys. Rev. E*, **87** (2013) 014501/1–4; T. Tóth-Katona *et al.*, *J. Magn. Magn. Mater.* **372** (2014) 117
- [8] P. Kopčansky *et al.*, *IEEE Trans. Magn.* **47** (2011) 4409; N. Tomašovičová *et al.*, *Liq. Cryst.*, **42** (2015) 959; T. Tóth-Katona *et al.*, *Soft Matter*. **14** (2018) 1647
- [9] I. Jánossy *et al.*, *Phys. Rev. E* **89** (2014) 012504/1–6
- [10] T. Tóth-Katona, I. Jánossy, *J. Mol. Liq.* **285** (2019) 323; A. R. K. Nassrah, *et al.*, *J. Mol. Liq.* **312** (2020) 113309/1–7
- [11] R. J. Mandle *et al.*, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **19** (2017) 11429; H. Nishikawa *et al.*, *Adv. Mater.* **29** (2017) 170354/1–8.

*Acknowledgement:* Financial support from Hungarian National Research, Development, and Innovation Office under Grant NKFIH FK142643 and the EIG CONCERT-Japan project FerroFluid (2023-1.2.1-ERA\_NET-2023-00008) is acknowledged.

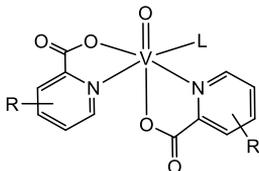
## ANTIDIABETIC ACTIVITY OF ZINC AND VANADIUM COORDINATION COMPOUNDS

**Franc Perdih**<sup>a</sup>  <https://orcid.org/0000-0002-8416-7291>

<sup>a</sup> Faculty of Chemistry and Chemical Technology, University of Ljubljana, Ljubljana, Slovenia

e-mail: franc.perdih@fkkt.uni-lj.si

One of the most widespread lifestyle-related diseases in the 21<sup>st</sup> century is thought to be the diabetes mellitus (DM). The worldwide number of patients suffering from DM was estimated to be 530 million in 2021 representing ~10.5% of the adult population and is expected to increase to 780 million by 2045. DM is generally classified into Type 1 DM that is caused by an absolute lack of insulin secretion and Type 2 DM that is characterized by insulin resistance and abnormal insulin secretion. The most common treatment for DM is insulin and also the oral hypoglycaemic drugs are used, however, they are often associated with undesirable side effects or a drop in efficacy after prolonged use is observed. Thus, the development of novel orally active compounds as an alternative for insulin injections as well as for the existing antidiabetics is still required. Zinc and vanadium-containing compounds have proven insulin-like anti-diabetic effects both *in vivo* and *in vitro* [1] and, for example bis(ethylmaltolato)oxovanadium(IV) has finished phase IIa of clinical trials [2]. As part of our ongoing research  $\text{VO}^{2+}$ ,  $\text{VO}_2^+$  and  $\text{Zn}^{2+}$  complexes were prepared [3]. Derivatives of picolinic and pyrazine-2-carboxylic acid were used as organic carrier ligands and their influence on the structural characteristics were determined using single crystal X-ray diffraction. For selected compounds structures in solution, interactions with serum proteins and *in vitro* bioactivity were also examined.



- [1] a) K. D. Mjos, C. Orvig, *Chem. Rev.* **114** (2014) 4540; b) J. Costa Pessoa *et al.*, *Coord. Chem. Rev.* **301-302** (2015) 24
- [2] K. H. Thompson *et al.*, *J. Inorg. Biochem.* **103** (2009) 554
- [3] a) T. Koleša-Dobravc *et al.*, *Inorg. Chem.* **53** (2014) 7960; b) T. Koleša-Dobravc *et al.*, *New J. Chem.* **41** (2017) 735; **42** (2018) 3619; c) D. Sanna *et al.*, *J. Med. Chem.* **62** (2019) 654; d) D. Sanna, *et al.*, *Polyhedron* **212** (2022) 115590.

*Acknowledgement:* We are grateful for the financial support from the program grant P1-0175 of the Slovenian Research Agency (ARRS).

## RECENT DEVELOPMENTS IN STRUCTURAL AND SYNTHETIC CHEMISTRY OF XENON

**Matic Lozinšek** <sup>a</sup>  <https://orcid.org/0000-0002-1864-4248>

<sup>a</sup> *Jožef Stefan Institute, Ljubljana, Slovenia*  
e-mail: matic.lozinsek@ijs.si

The landmark synthesis of “XePtF<sub>6</sub>” and the discovery of noble-gas reactivity by Neil Bartlett in 1962 has shattered the long-standing dogma about inertness of the group 18 elements [1]. This fascinating, albeit exotic field of main-group chemistry has continued to provide interesting textbook examples of compounds, structures, chemical reactivity and bonding modalities [2–4]. Noble-gas compounds serve as exemplary molecular structures well-suited to study and teach fundamental chemical concepts, such as valence shell electron pair repulsion (VSEPR) model [5]. Indeed, virtually all modern university textbook on inorganic chemistry contain a section on noble-gas chemistry and the new editions typically include also some of the novel developments in the field. However, the pace of experimental synthetic results in noble-gas chemistry has in recent years reduced to essentially a trickle. It might therefore be assumed that not much remains to be discovered in this field. Nevertheless, this notion is erroneous.

In this lecture I will describe our efforts to expand the synthetic and structural chemistry of xenon. This includes the exploration of mechanochemistry as a new synthetic methodology for the preparation of noble-gas compounds, structural determination of poorly characterized species by single-crystal X-ray diffraction and 3D electron diffraction, and the study of noble-gas compounds under extreme conditions of high pressure in diamond anvil cells in pressure range 10 000–100 000 bar (**Figure 1**). Moreover, our recent synthetic work was focused on the synthesis, structural characterization, and reactivity studies of novel Xe–N- and Xe–O-bonded compounds.



**Figure 1.** A Merrill-Bassett diamond anvil cell during a single-crystal X-ray diffraction measurement employing Ag K $\alpha$  radiation.

- [1] N. Bartlett, *Proc. Chem. Soc.* (1962) 218.
- [2] D. S. Brock, G. J. Schrobilgen, B. Žemva, Noble-Gas Chemistry, In: *Comprehensive Inorganic Chemistry II: From Elements to Applications*, J. Reedijk, K. Poeppelmeier, Eds., Elsevier, **1** (2013) 755–822
- [3] J. R. De Backere, *et al.*, *Angew. Chem. Int. Ed.* **55** (2016) 11917
- [4] M. Lozinšek, *et al.*, *Angew. Chem. Int. Ed.* **60** (2021) 8149
- [5] R. J. Gillespie, *Chem. Soc. Rev.* **21** (1992) 59.

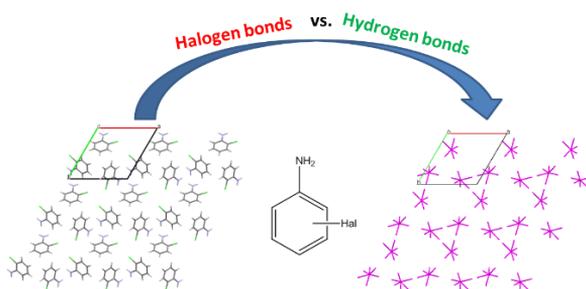
*Acknowledgement:* Funding by the European Research Council Starting Grant (950625) under the European Union's Horizon 2020 Research and Innovation Programme; the Jožef Stefan Institute Director's Fund; the Slovenian Research and Innovation Agency (N1-0189 and N1-0225), and the Marie Skłodowska-Curie Actions Postdoctoral Fellowship (10111119) under the European Union's Horizon Europe Research and Innovation Programme, are gratefully acknowledged.

## COMBINATION OF X-RAY DIFFRACTION AND QUANTUM CHEMISTRY METHODS FOR CRYSTAL PACKING ANALYSIS OF HALOGEN SUBSTITUTED ANILINES

**Irina S. Konovalova** <sup>a,b</sup>  <https://orcid.org/0000-0001-6245-6642>,

<sup>a</sup> *Institut für Bioanorganische Chemie, Heinrich-Heine-Universität Düsseldorf, Düsseldorf, Germany;* <sup>b</sup> *SSI "Institute for Single Crystals", National Academy of Science of Ukraine, Kharkiv, Ukraine*  
e-mail: [ikonovalova0210@gmail.com](mailto:ikonovalova0210@gmail.com)

The halogen substituted anilines (**Figure 1**) are key structural blocks of bioactive products, medically important compounds and organic functional materials. Therefore, the study of molecular and crystal structure of such a type of compounds has an immense importance.



**Figure 1.** Crystal packing (on the left) and the energetic vector diagram (on the right) of *o*-chloroaniline.

All modern approaches to the molecular crystal structure analysis base on the comparison of the geometric characteristics of intermolecular interactions. However, these approaches are useless in many cases: a lot of weak interactions presence, the specific directed interactions absence, etc.

In the case of halogen substituted anilines the presence only of weak (N/C–H... $\pi$ , N–H...N and halogen bonds) types of intermolecular interactions complicates the description of the crystal structures. It is difficult to define the main structural motif in the solid state just on the basis of geometrical considerations. Taking into account the significant attention to halogen bonds in recent years, it is interesting to compare the crystal structures of the isomers of halogen substituted anilines from energetic viewpoint and analyze the role of different types of intermolecular interactions. The crystal packing analysis from energetic viewpoint indicates that the role of halogen bonds in supramolecular architecture depends on the position of halogen atom in the aromatic cycle.

*Acknowledgement:* This project has received funding through the MSCA4Ukraine project, which is funded by the European Union.



**Усмена саопштења**

**Oral Presentations**

## СТРУКТУРНЕ ТРАНСФОРМАЦИЈЕ КОМПЛЕКСА АМОНИЈУМ-ВАНАДИЛ-*L*-ТАРТАРАТА ИНДУКОВАНЕ ДЕХИДАРАТАЦИЈОМ И РЕХИДРАТАЦИЈОМ

**Marko Dunatov** <sup>a</sup>  <https://orcid.org/0000-0002-2864-177X>,

**Krešimir Molčanov** <sup>a</sup>  <https://orcid.org/0000-0002-5477-2861>,

**Zoran Štefanić** <sup>a</sup>  <https://orcid.org/0000-0002-3486-4291>,

**Robert Kruk** <sup>b</sup>  <https://orcid.org/0000-0003-4951-0717>,

**Lidija Androš Dubraja** <sup>a</sup>  <https://orcid.org/0000-0002-7648-4940>

<sup>a</sup> *Ruđer Bošković Institute, Zagreb, Croatia*; <sup>b</sup> *Institute of Nanotechnology, Karlsruhe Institute of Technology, Eggenstein-Leopoldshafen, Germany*  
имејл: Lidija.Andros@irb.hr

Увођење структурне флексибилности у чврстом стању може се постићи имитацијом природе и употребом природних супстанци у кристалном инжењерству. Међутим, ова структурна флексибилност повремено може бити ограничавајући фактор стабилности ових једињења, јер су подложна различитим хемијским или структурним трансформацијама изазваним факторима средине и спољашњим стимулусима, чак и када они подразумевају само благу промену влажности или температуре. Са становишта примене, ова способност реаговања на стимулусе може бити веома драгоцено својство. Стога је од суштинске важности оптимизовати и тестирати услове под којима се јављају одређене структурне трансформације.

Винска киселина се у природи јавља у енантимерно чистом облику (као *L*-винска киселина) и стога представља одличан и лако доступан хирални лиганд за синтезу неорганско–органских материјала. Ипак, број комплекса прелазних метала са *L*-винском киселином није велики (мање од 300 уноса у Кембричкој банци структурних података). Ово ограничење може бити повезано са сложеним понашањем ове наизглед једноставне  $\alpha$ -хидроксикарбоксилне киселине, које зависи од експерименталних услова, као и са проблемима стабилности које неки од комплекса винске киселине показују у чврстом стању. Да бисмо истражили стабилност и понашање комплекса винске киселине који реагују на стимулусе, проучавали смо амонијум-бис(*L*-тартарато)оксвадат(IV)-дихидрат. Ово једињење се трансформише у суву фазу  $(\text{NH}_4)_4[\text{V}_2\text{O}_2(\text{L-tart})_2]$  дехидратацијом у сувим условима и у хидратну фазу  $(\text{NH}_4)_4[\text{V}_2\text{O}_2(\text{L-tart})_2] \cdot 2\text{H}_2\text{O}$  реверзибилном рехидратацијом при високим релативним влажностима. Кристалографска анализа густине наелектрисања  $(\text{NH}_4)_4[\text{V}_2\text{O}_2(\text{L-tart})_2] \cdot 2\text{H}_2\text{O}$  спроведена је да би се проучили могући ефекти преноса наелектрисања између молекула донора и акцептора и открили фини детаљи водоничног везивања.

[1] M. Dunatov, *et al.*, *Inorg. Chem.* **63** (2024) 163.

*Захвалница:* Захваљујемо се на финансијској подршци Хрватске закладе за знаност (УИП-2019-04-7433).

## DEHYDRATION-REHYDRATION INDUCED STRUCTURAL TRANSFORMATIONS IN AMMONIUM VANADYL L-TARTARATE COMPLEX

**Marko Dunatov** <sup>a</sup>  <https://orcid.org/0000-0002-2864-177X>,  
**Krešimir Molčanov** <sup>a</sup>  <https://orcid.org/0000-0002-5477-2861>,  
**Zoran Štefanić** <sup>a</sup>  <https://orcid.org/0000-0002-3486-4291>,  
**Robert Kruk** <sup>b</sup>  <https://orcid.org/0000-0003-4951-0717>,  
**Lidija Androš Dubraja** <sup>a</sup>  <https://orcid.org/0000-0002-7648-4940>

<sup>a</sup> Ruđer Bošković Institute, Zagreb, Croatia; <sup>b</sup> Institute of Nanotechnology, Karlsruhe Institute of Technology, Eggenstein-Leopoldshafen, Germany  
e-mail: Lidija.Andros@irb.hr

The introduction of structural flexibility in the solid state can be achieved by imitating nature and using naturally occurring substances in crystal engineering. However, the aforementioned structural flexibility can occasionally be a limiting factor for the stability of these compounds, i.e., they are subject to various chemical or structural transformations caused by environmental factors and external stimuli, even if these stimuli involve only a slight change in humidity or temperature. From an application point of view, stimuli-responsiveness can be a very valuable property. Therefore, it is very important to optimize and test the conditions under which certain structural transformations occur.

Tartaric acid occurs in nature in an enantiopure form (as L-tartaric acid) and is therefore an excellent and readily available chiral ligand for preparing inorganic–organic materials. Nevertheless, the number of L-tartaric transition metal complexes is not very large (less than 300 deposits in the Cambridge Structural Database). This could be related to the rather complex behavior of this apparently simple  $\alpha$ -hydroxycarboxylic acid, which strongly depends on the experimental conditions, as well as to the stability problems that some of the tartrate complexes exhibit in the solid state. To test the stability problems and the stimuli-responsive behavior of tartrate complexes, we studied the ammonium bis(L-tartrato)oxovanadate(IV) dihydrate [1]. This compound transforms into a dry phase  $(\text{NH}_4)_4[\text{V}_2\text{O}_2(\text{L-tart})_2]$  by dehydration under dry conditions and into the hydrate phase  $(\text{NH}_4)_4[\text{V}_2\text{O}_2(\text{L-tart})_2]\cdot 2\text{H}_2\text{O}$  by reversible rehydration at high relative humidity. Crystallographic charge density analysis of the  $(\text{NH}_4)_4[\text{V}_2\text{O}_2(\text{L-tart})_2]\cdot 2\text{H}_2\text{O}$  was conducted to study possible charge transfer effects between donor and acceptor molecules and reveal the fine details of hydrogen bonding.

[1] M. Dunatov, *et al.*, *Inorg. Chem.* **63** (2024) 163.

*Acknowledgement:* Financial support from the Croatian Science Foundation (UIP-2019-04-7433) is gratefully acknowledged.

## АНАЛИЗА МЕЃУМОЛЕКУЛСКИХ ИНТЕРАКЦИЈА У ПОЛИМОРФИМА МУРИКАТАЦИНА

**Милица Г. Богдановић**<sup>a</sup>  <https://orcid.org/0000-0001-7122-6929>,  
**Бојана Срећо Зеленовић**<sup>a</sup>  <https://orcid.org/0000-0003-0216-2583>,  
**Слађана Станисављевић**<sup>a</sup>  <https://orcid.org/0000-0002-4766-9137>,  
**Мирјана Попсавин**<sup>a</sup>  <https://orcid.org/0000-0002-0924-1041>,  
**Велимир Попсавин**<sup>a,б</sup>  <https://orcid.org/0000-0001-9910-2987>,  
**Guido J. Reiss**<sup>в</sup>  <https://orcid.org/0000-0002-3004-3955>,  
**Марко В. Родић**<sup>а</sup>  <https://orcid.org/0000-0002-4471-8001>

<sup>a</sup> Универзитет у Новом Саду, Природно-математички факултет, Нови Сад, Србија; <sup>б</sup> Српска академија наука и уметности, Београд, Србија, <sup>в</sup> Institut für Bioanorganische Chemie, Heinrich-Heine-Universität Düsseldorf, Düsseldorf, Germany;

имејл: milica.bogdanovic@dh.uns.ac.rs

γ-Лактони (+)-мурикатацин и (–)-мурикатацин природни су ацетогенини који показују запажену антипролиферативну активност према извесним човечјим малигним ћелијским линијама [1, 2].

Разумевање комплексних међумолекулских интеракција унутар кристалних структура је кључно за детаљно проучавање њихових својстава и понашања. Ово разумевање се уобичајено постиже анализом специфичних атом–атом интеракција. Међутим, недавна истраживања [3] указују на ограничења овог приступа, наглашавајући потребу за свеобухватнијом евалуацијом енергија међумолекулских интеракција. У овом истраживању смо користили „приступ целог молекула” како бисмо израчунали енергије интеракција и открили њихову праву хијерархију у полиморфима мурикатацина.

Оба полиморфа кристалишу у моноклиничној просторној групи  $P2_1$ . Претходно објављена структура мурикатацина ( $\alpha$ -полиморф) [4] садржи само један молекул у асиметричној јединици, док други полиморф који је представљен овде ( $\beta$ -полиморф) у асиметричној јединици садржи два кристалографски независна молекула. Резултати анализе показују да су основне структурне јединице паковања слојеви молекула, при чему су енергије интеракција у распону од  $-25$  до  $-57$  kJ mol<sup>-1</sup> за  $\alpha$ -полиморф и од  $-31$  до  $-87$  kJ mol<sup>-1</sup> за  $\beta$ -полиморф. У најјачим интеракцијама, поред водоничног везивања, дисперзија доминира над електростатиком.

[1] V. Popsavin, *et al.*, *Bioorg. Med. Chem.* **18** (2008) 5182

[2] B. Srećo, *et al.*, *Tetrahedron* **67** (2011) 9358

[3] A. J. Edwards, *et al.*, *Faraday Discuss.* **203** (2017) 93

[4] Y. Fall, *et al.*, *Tetrahedron Lett.* **52** (2011) 5983.

*Захвалница:* Истраживања је подржало Министарство науке, технолошког развоја и иновација Републике Србије (Ев. бр. 451-03-66/2024-03/200125 и 451-03-65/2024-03/200125), немачко–српски билатерални пројекат: Примена квантно-кристалографских метода у проширеној рутинској рендгенској структурној анализи малих молекула (Ев. бр. 337-00-253/2023-05/12) и истраживачки пројекат Српске академије наука и уметности (Ев. бр. F-130).

## ANALYSIS OF INTERMOLECULAR INTERACTIONS IN MURICATACIN POLYMORPHS

**Milica G. Bogdanović**<sup>a</sup>  <https://orcid.org/0000-0001-7122-6929>,  
**Bojana Srećo Zelenović**<sup>a</sup>  <https://orcid.org/0000-0003-0216-2583>,  
**Slađana Stanisavljević**<sup>a</sup>  <https://orcid.org/0000-0002-4766-9137>,  
**Mirjana Popsavin**<sup>a</sup>  <https://orcid.org/0000-0002-0924-1041>,  
**Velimir Popsavin**<sup>a,b</sup>  <https://orcid.org/0000-0001-9910-2987>,  
**Guido J. Reiss**<sup>d</sup>  <https://orcid.org/0000-0002-3004-3955>,  
**Marko V. Rodić**<sup>c</sup>  <https://orcid.org/0000-0002-4471-8001>

<sup>a</sup> University of Novi Sad, Faculty of Sciences, Novi Sad, Serbia; <sup>b</sup> Serbian Academy of Sciences and Arts, Belgrade, Serbia, <sup>d</sup> Institut für Bioanorganische Chemie, Heinrich-Heine-Universität Dusseldorf, Dusseldorf, Germany  
e-mail: milica.bogdanovic@dh.uns.ac.rs

$\gamma$ -Lactones (+)- and (-)-muricatacin are naturally occurring acetogenins that show remarkable antiproliferative activities against a panel of human malignant cell lines [1, 2].

Understanding the intricate intermolecular interactions governing crystal structures is pivotal for elucidating their properties and behaviors. Traditionally, this comprehension has been achieved through the analysis of specific atom–atom contacts. However, recent studies [3] have unveiled the limitations of this atom-centric approach, highlighting the necessity for a more comprehensive evaluation of intermolecular interactions. In this study, we employ a whole-molecule approach to calculate interaction energies and unravel the true significance of intermolecular interactions in muricatacin polymorphs.

Both muricatacin polymorphs crystallize in a monoclinic crystal system within the  $P2_1$  space group. The previously reported muricatacin structure (denoted  $\alpha$ ) features a single molecule in the asymmetric unit [4]. Here, we report a second polymorph structure of muricatacin (denoted  $\beta$ ), distinguished by the presence of two identical molecules in the asymmetric unit.

Results have shown that basic structural units in both polymorphs are layers of molecules within which interaction energies are in the range from  $-25$  to  $-57$   $\text{kJ mol}^{-1}$  for the  $\alpha$  polymorph and from  $-31$  to  $-87$   $\text{kJ mol}^{-1}$  for the  $\beta$  polymorph. Despite classical hydrogen bonding, in the strongest interactions dispersion dominates over electrostatics.

- [1] V. Popsavin, *et al.*, *Bioorg. Med. Chem.* **18** (2008) 5182
- [2] B. Srećo, *et al.*, *Tetrahedron* **67** (2011) 9358
- [3] A. J. Edwards, *et al.*, *Faraday Discuss.* **203** (2017) 93
- [4] Y. Fall, *et al.*, *Tetrahedron Lett.* **52** (2011) 5983.

*Acknowledgement:* This research was supported by the Ministry of Science, Technological Development and Innovation of the Republic of Serbia (Grants No. 451-03-66/2024-03/ 200125 & 451-03-65/2024-03/200125), German–Serbian joint scientific co-operation project: Application of quantum-crystallographic methods in extended routine X-ray structural analysis of small molecules (Grant No. 337-00-253/2023-05/12) and research project from the Serbian Academy of Sciences and Arts (Grant No. F-130).

## СТУДИЈА ЧВРСТОГ СТАЊА НОВИХ ЈЕДИЊЕЊА СА Хе–N ВЕЗАМА

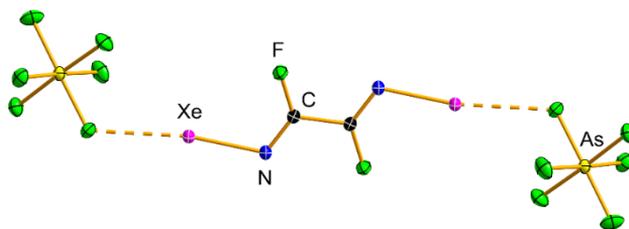
**Miha Virant**<sup>a</sup>  <https://orcid.org/0000-0002-5919-3631>,  
**Erik Uran**<sup>a,b</sup>  <https://orcid.org/0000-0002-5450-4090>,  
**Kristian Radan**<sup>a</sup>  <https://orcid.org/0000-0003-4554-3976>,  
**Mirela Dragomir**<sup>a,b</sup>  <https://orcid.org/0000-0002-4910-253X>,  
**Matic Lozinšek**<sup>a,b</sup>  <https://orcid.org/0000-0002-1864-4248>

<sup>a</sup> *Jožef Stefan Institute, Ljubljana, Slovenia*; <sup>b</sup> *Jožef Stefan International Postgraduate School, Ljubljana, Slovenia*

имејл: miha.virant@ijs.si

У већини једињења ксенона(II), атом племенитог гаса је везан само за флуор. Међутим, у литератури су такође пријављени и неки примери у којима долази до формирања Хе<sup>II</sup>–N веза [1–4]. Синтеза ових једињења је експериментално захтевна због њихове термалне нестабилности и осетљивости на ваздух, што ограничава даље истраживање њихове интересантне хемије и хемијских својстава.

У овом раду, хемија Хе<sup>II</sup>–N-везаних једињења проширена је реакцијом цијаногена, најједноставније дитопне sp-хибридизоване азотне базе, са соли [XeF]<sup>+</sup>. Синтеза и кристализација на ниској температури омогућили су изоловање и структурну карактеризацију првог примера бис-координоване азотне базе са остацима племенитог гаса. У овом једињењу долази до преуређивања флуорида на собној температури да би се добила со са јединственим модалитетом веза C=N–Xe (Слика 1). σ-групе на поларизованим атомима ксенона чине ово једињење интересантним реагенсом за студије међумолекулских интеракција везивања племенитих гасова и даљу диверзификацију хемије ксенона(II).



Слика 1. Кристална структура новог једињења са Хе<sup>II</sup>–N-везом.

- [1] A. A. A. Emara, G. J. Schrobilgen, *J. Chem. Soc. Chem. Commun.* (1987) 1644
- [2] A. A. A. Emara, G. J. Schrobilgen, *J. Chem. Soc. Chem. Commun.* (1988) 257
- [3] B. Fir, *M. Sc. Thesis*, McMaster University (1999)
- [4] G. L. Smith, *et al.*, *Inorg. Chem.* **50** (2011) 12359.

*Захвалница:* Овај рад је финансиран уз подршку Стартинг гранта Европског истраживачког савета (ERC) у оквиру Програма за истраживање и иновације Хоризон 2020 Европске уније (Уговор о гранту број 950625).

## SOLID-STATE STUDY OF NOVEL XE–N-BONDED COMPOUNDS

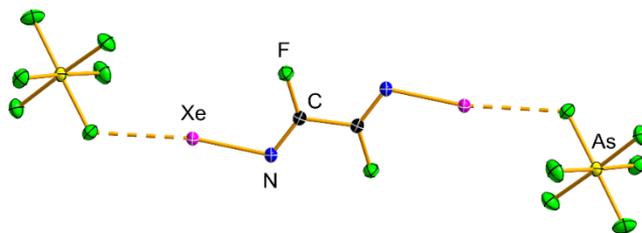
**Miha Virant**<sup>a</sup>  <https://orcid.org/0000-0002-5919-3631>,  
**Erik Uran**<sup>a,b</sup>  <https://orcid.org/0000-0002-5450-4090>,  
**Kristian Radan**<sup>a</sup>  <https://orcid.org/0000-0003-4554-3976>,  
**Mirela Dragomir**<sup>a,b</sup>  <https://orcid.org/0000-0002-4910-253X>,  
**Matic Lozinšek**<sup>a,b</sup>  <https://orcid.org/0000-0002-1864-4248>

<sup>a</sup> *Jožef Stefan Institute, Ljubljana, Slovenia;* <sup>b</sup> *Jožef Stefan International Postgraduate School, Ljubljana, Slovenia*

e-mail: miha.virant@ijs.si

In the majority of xenon(II) compounds, the noble-gas atom is bonded only to fluorine. However, a limited number of examples in which Xe<sup>II</sup>–N bond is formed were also reported in the literature [1–4]. The synthesis of these compounds is experimentally challenging due to their thermal instability and air sensitivity, which hinders further exploration of their interesting chemistry and chemical properties.

In this work, the chemistry of Xe<sup>II</sup>–N-bonded compounds was expanded by reacting cyanogen, the simplest ditopic sp-hybridized nitrogen base, with a [XeF]<sup>+</sup> salt. The low-temperature synthesis and crystallization enabled the isolation and structural characterization of the first example of a nitrogen base *bis*-coordinated by noble-gas moieties. This compound undergoes a formal fluoride rearrangement at room temperature to afford the salt with a unique C=N–Xe bonding modality (**Figure 1**). The  $\sigma$ -holes on polarized xenon atoms render this compound an interesting reagent for studies of intermolecular noble-gas bonding interactions and further diversification of xenon(II) chemistry.



**Figure 1.** Crystal structure of a novel Xe<sup>II</sup>–N-bonded compound.

- [1] A. A. A. Emara, G. J. Schrobilgen, *J. Chem. Soc. Chem. Commun.* (1987) 1644
- [2] A. A. A. Emara, G. J. Schrobilgen, *J. Chem. Soc. Chem. Commun.* (1988) 257
- [3] B. Fir, *M. Sc. Thesis*, McMaster University (1999)
- [4] G. L. Smith, *et al.*, *Inorg. Chem.* **50** (2011) 12359.

*Acknowledgement:* This work was funded by the European Research Council (ERC) Starting Grant under the European Union's Horizon 2020 Research and Innovation Programme (Grant agreement No. 950625).

## ПРОТОНСКА ПРОВОДЉИВОСТ ХОМО- И ХЕТЕРОМЕТАЛНИХ ЈЕДИЊЕЊА РАЗЛИЧИТЕ ДИМЕНЗИОНАЛНОСТИ СА (АЛКИЛ)АМОНИЈУМСКИМ КАТЈОНИМА

**Marijana Jurić**<sup>a</sup>  <https://orcid.org/0000-0001-5951-9366>,

**Ana Lozančić**<sup>a</sup>  <https://orcid.org/0000-0002-8739-0368>,

**Sanja Burazer**<sup>a</sup>  <https://orcid.org/0000-0002-5266-5827>,

**Sanja Renka**<sup>a</sup>  <https://orcid.org/0009-0006-7770-725X>,

**Krešimir Molčanov**<sup>a</sup>  <https://orcid.org/0000-0002-4328-3181>,

**Lidija Androš Dubraja**<sup>a</sup>  <https://orcid.org/0000-0002-7648-4940>

<sup>a</sup> *Ruđer Bošković Institute, Zagreb, Croatia*

имејл: Marijana.Juric@irb.hr

Развој протонских проводника који реагују на стимулансе од интереса је због практичне примене, нпр. ослобађање лекова, сензори, меморија и дисплеј уређаји, али и ради бољег разумевања путева транспорта протона [1]. Познато је да се транспорт протона одвија преласком протона преко мреже водоничних веза, а координациона једињења су се показала као занимљиви системи за моделовање мрежа ових веза због широког спектра могућих конфигурација. Најједноставнија метода увођења протонских носача је уграђивање контрајона попут  $\text{H}_3\text{O}^+$ ,  $\text{NH}_4^+$ ,  $(\text{CH}_3)_2\text{NH}_2^+$ , и др. који ће изградити јонско једињење. Ови контрајони стварају канале кроз које се проводе протони формирањем водоничних веза са молекулима воде или другим конституентима. Иако дводимензионалне (2D) и тродимензионалне (3D) структуре често карактерише висока проводљивост протона, и нискодимензионалне структуре могу показати изузетну проводљивост протона путем ланца водоничних веза, будући да мала запремина шупљина може бити повољна за прелазак протона [1, 2].

Испитана је протонска проводљивост мононуклеарних једнодимензионалних (1D) једињења  $\text{Fe(III)}$  са  $\text{NH}_4^+$ ,  $(\text{CH}_3)_2(\text{C}_2\text{H}_5)\text{NH}^+$ ,  $(\text{CH}_3)(\text{C}_2\text{H}_5)_2\text{NH}^+$  и  $(\text{CH}_3)(\text{C}_2\text{H}_5)_3\text{NH}^+$  контрајонима [3]. Поред тога, проучаван је транспорт протона за структурно окарактерисана хетерометална једињења, 2D [ $\text{Mn}^{\text{II}}\text{Cr}^{\text{III}}$ ], и она која садрже мононуклеарне јединице, [ $\text{Co}^{\text{II}}\text{Cr}^{\text{III}}$ ], са  $(\text{CH}_3)_2(\text{C}_2\text{H}_5)\text{NH}^+$  или  $(\text{CH}_3)(\text{C}_2\text{H}_5)_2\text{NH}^+$  [1, 2]. Утврђено је да су, уместо димензионалности, за добијање материјала са високом проводљивошћу изузетно важни заступљеност протонваних носача протона који имају улогу донора протона, број непротонваних места која имају улогу акцептора протона, као и ефикасаност пута транспорта протона који се састоји од мреже водоничних веза.

[1] A. Lozančić, *et al.*, *J. Alloys Compd.* **986** (2024) 174087

[2] A. Lozančić, *et al.*, *Inorg. Chem.* **62** (2023) 9418

[3] M. Jurić, *et al.*, *CrystEngComm* **26** (2024) 1892.

*Захвалница:* Овај рад је финансиран од стране Хрватске научне фондације (ИП-2019-04-5742).

**PROTON CONDUCTIVITY OF  
HOMO- AND HETEROMETALLIC COMPOUNDS OF  
DIFFERENT DIMENSIONALITY CONTAINING  
(ALKYL)AMMONIUM CATIONS**

**Marijana Jurić** <sup>a</sup>  <https://orcid.org/0000-0001-5951-9366>,

**Ana Lozančić** <sup>a</sup>  <https://orcid.org/0000-0002-8739-0368>,

**Sanja Burazer** <sup>a</sup>  <https://orcid.org/0000-0002-5266-5827>,

**Sanja Renka** <sup>a</sup>  <https://orcid.org/0009-0006-7770-725X>,

**Krešimir Molčanov** <sup>a</sup>  <https://orcid.org/0000-0002-4328-3181>,

**Lidija Androš Dubraja** <sup>a</sup>  <https://orcid.org/0000-0002-7648-4940>

<sup>a</sup> *Ruder Bošković Institute, Zagreb, Croatia*

e-mail: Marijana.Juric@irb.hr

The development of proton conductors that respond to stimuli is of interest not only in terms of practical applications such as drug delivery, sensors, memory, and display devices, but also to gain a better understanding of proton transport pathways [1]. It is well known that proton transport occurs by proton hopping over a network of hydrogen bonds (H-bonds), and coordination compounds have proven to be interesting systems for modeling H-bond networks due to the wide range of possible configurations. The simplest method of introducing proton carriers is to embed a counterion such as hydronium ( $\text{H}_3\text{O}^+$ ) or ammonium [ $\text{NH}_4^+$ ,  $(\text{CH}_3)_2\text{NH}_2^+$ , ...], forming the charged compounds. The counterions create proton-conducting channels by forming H-bond arrangements with the guest water or other constituents. Although two-dimensional (2D) and three-dimensional (3D) assemblies often exhibit high proton conductivity, low-dimensional structures can also exhibit excellent proton conductivity *via* the H-bonding chain, as a small void space can be advantageous for proton hopping [1, 2].

We have investigated the proton conductivity of mononuclear and one-dimensional (1D) iron(III) compounds, prepared and characterized in our group, containing  $\text{NH}_4^+$ ,  $(\text{CH}_3)_2(\text{C}_2\text{H}_5)\text{NH}^+$ ,  $(\text{CH}_3)(\text{C}_2\text{H}_5)_2\text{NH}^+$  and  $(\text{CH}_3)(\text{C}_2\text{H}_5)_3\text{NH}^+$  as counterions [3]. In addition, proton transport was also studied for structurally characterized heterometallic compounds, 2D [ $\text{Mn}^{\text{II}}\text{Cr}^{\text{III}}$ ] and those containing mononuclear units [ $\text{Co}^{\text{II}}\text{Cr}^{\text{III}}$ ], all with  $(\text{CH}_3)_2(\text{C}_2\text{H}_5)\text{NH}^+$  or  $(\text{CH}_3)(\text{C}_2\text{H}_5)_2\text{NH}^+$  [1, 2]. From the obtained studies, it can be confirmed and concluded that the amount of protonated proton carriers acting as proton donors, the number of non-protonated sites acting as proton acceptors, and the efficient proton transport pathway consisting of an H-bonding network are extremely important to obtain materials with high conductivity, rather than their dimensional arrangement.

[1] A. Lozančić, *et al.*, *J. Alloys Compd.* **986** (2024) 174087

[2] A. Lozančić, *et al.*, *Inorg. Chem.* **62** (2023) 9418

[3] M. Jurić, *et al.*, *CrystEngComm* **26** (2024) 1892.

*Acknowledgement:* This work was funded by the Croatian Science Foundation (IP-2019-04-5742).

## СТРУКТУРА КОМПЛЕКСА ЦИНКА(II) СА НОВОМ ШИФОВОМ БАЗОМ 2,6-ДИАЦЕТИЛПИРИДИНА

**Маријана С. Костић**<sup>a</sup>  <https://orcid.org/0000-0003-4479-8782>,  
**Милица Г. Богдановић**<sup>a</sup>  <https://orcid.org/0000-0001-7122-6929>,  
**Вукадин М. Леовац**<sup>a</sup>  <https://orcid.org/0000-0003-3551-6034>,  
**Мирјана М. Радановић**<sup>a</sup>  <https://orcid.org/0000-0001-6675-9763>

<sup>a</sup> Универзитет у Новом Саду, Природно-математички факултет, Нови Сад, Србија

имејл: marijana.kostic@dh.uns.ac.rs

Кембричка кристалографска база података има преко 2500 структура Шифових база 2,6-диацетилпиридина и њихових комплекса. Међу овим једињењима описане су структуре само две комплексне соли које садрже деривате аминокванидина и код којих Шифова база 2,6-диацетилпиридин-аминогванидин има улогу јона супротног наелектрисања [1]. У овом раду описани су синтеза и структурна карактеризација првог комплекса цинка(II) са асиметричном Шифовом базом 2,6-диацетилпиридин-тиосемикарбазида и аминокванидина.

Жути монокристали комплекса  $[Zn(L-H)]Cl$  (где је L – Шифова база (моно)-2,6-диацетилпиридин-тиосемикарбазида и аминокванидина), чија је молекулска структура приказана на **слици 1**, добијени су темплатном синтезом у реакцији (моно)-2,6-диацетилпиридин-тиосемикарбазида, аминокванидина, и  $Zn(CH_3COO)_2 \cdot 2H_2O$  (молски однос 1:1:1), у етанолском раствору. Координација Шифове базе је  $N_3S$  тетраденатна. Паковање структурних јединица дуж *b*-осе приказано је на **слици 2**.  $[Zn(L-H)]Cl$  је први комплекс код којег један од два азотетинска атома азота 2,6-диацетилпиридина не гради координативну везу са градитељем комплекса [1].

*Кристалографски подаци:* моноклинични систем,  $I2/a$ ,  $a = 16,4930(8)$ ,  $b = 13,2858(4)$ ,  $c = 15,6229(7)$  Å,  $\beta = 15,6229(7)^\circ$ ,  $V = 3037,6(3)$  Å<sup>3</sup>,  $Z = 4$ . Утачњавање са  $F^2$  (219 параметара) дало је  $R_1 = 0,037$ ,  $wR_2 = 0,086$ ,  $S = 1,05$ , за све податке и  $R_1 = 0,033$  за 3665 учених рефлексија са  $I \geq 2\sigma(I)$ .



**Слика 1.** Молекулска структура  $[Zn(L-H)]Cl$ .

[1] C. R. Groom, *et al*, *Acta Crystallogr. B: Struct. Sci. Cryst. Eng. Mater.* **72** (2016) 171.

*Захвалница:* Истраживања је финансирало Министарство науке, технолошког развоја и иновација Републике Србије (Ев. бр. 451-03-66/2024-03/200125 и 451-03-65/2024-03/200125).

## STRUCTURE OF ZINC(II) COMPLEX WITH NOVEL SCHIFF BASE OF 2,6-DIACETILPYRIDINE

**Marijana S. Kostić**<sup>a</sup>  <https://orcid.org/0000-0003-4479-8782>,  
**Milica G. Bogdanović**<sup>a</sup>  <https://orcid.org/0000-0001-7122-6929>,  
**Vukadin M. Leovac**<sup>a</sup>  <https://orcid.org/0000-0003-3551-6034>,  
**Mirjana M. Radanović**<sup>a</sup>  <https://orcid.org/0000-0001-6675-9763>

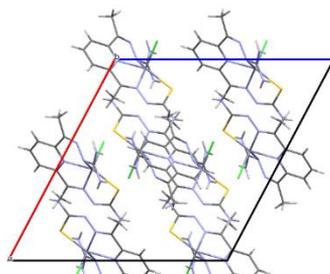
<sup>a</sup> *University of Novi Sad, Faculty of Science, Novi Sad, Serbia*  
e-mail: marijana.kostic@dh.uns.ac.rs

The Cambridge Structural Database encompasses over 2500 structures of Schiff base derivatives of 2,6-diacetylpyridine. It is noteworthy to highlight that among them, the only compounds with aminoguanidine derivatives are two complex salts in which there is no coordination of the Schiff base 2,6-diacetylpyridine-aminoguanidine, which acts as a counterion in these structures [1]. This paper describes the synthesis and structural characterization of the first zinc(II) complex with an asymmetric Schiff base of 2,6-diacetylpyridine-thiosemicarbazide and aminoguanidine.

The template synthesis reaction of (*mono*)-2,6-diacetylpyridine-thiosemicarbazide, the chloride salt of aminoguanidine, and  $Zn(CH_3COO)_2 \cdot 2H_2O$  (molar ratio 1:1:1), in ethanol, gave yellow single crystals of the complex  $[Zn(L-H)]Cl$  (L – Schiff base of (*mono*)-2,6-diacetylpyridine-thiosemicarbazide and aminoguanidine).

In this complex, Schiff base adopts tetradentate  $N_3S$  coordination (**Figure 2**). This is the first example of a zinc(II) complex where one of the two azomethine nitrogen atoms of 2,6-diacetylpyridine is not coordinated to the metal atom [1]. The zinc atom is in a distorted square-pyramidal environment surrounded by azomethine, imine, and pyridine nitrogen atoms, and thiohydrazide sulfur atom in the basal plane, while one chlorido ligand is in the apical position ( $\tau_5 = 0.31$ ).

*Crystallographic data:* monoclinic crystal system,  $I2/a$ ,  $a = 16.4930(8)$ ,  $b = 13.2858(4)$ ,  $c = 15.6229(7)$  Å,  $\beta = 15.6229(7)^\circ$ ,  $V = 3037.6(3)$  Å<sup>3</sup>,  $Z = 4$ . Refinement based on  $F^2$  (219 parameters):  $R_1 = 0.037$ ,  $wR_2 = 0.086$ ,  $S = 1.05$ , for all data, and  $R_1 = 0.033$  for 3665 reflections with  $I \geq 2\sigma(I)$ .



[1] C. R. Groom, *et al*, *Acta Crystallogr. B: Struct. Sci. Cryst. Eng. Mater.* **72** (2016) 171.

*Acknowledgement:* The authors gratefully acknowledge the financial support of the Ministry of Science, Technological Development and Innovation of the Republic of Serbia (Grants No. 451-03-66/2024-03/ 200125 & 451-03-65/2024-03/200125).

## ПОРЕЂЕЊЕ СТРУКТУРА АЛДО-КЕТО РЕДУКТАЗЕ 1ЦЗ (АКР1ЦЗ) У АПОПРОТЕИНСКОЈ ФОРМИ И У КОМПЛЕКСУ СА ТЕТРАЗОЛНИМ ДЕРИВАТОМ ЖУЧНИХ КИСЕЛИНА

**Маја Мариновић**<sup>a</sup>  <https://orcid.org/0000-0001-8696-7148>,

**Душан Шкорић**<sup>a</sup>  <https://orcid.org/0000-0002-3683-0255>,

**Софија Бекић**<sup>a</sup>  <https://orcid.org/0000-0002-9020-698X>,

**Michael Kugler**<sup>b</sup>  <https://orcid.org/0000-0002-0752-9682>,

**Jiří Brynda**<sup>b</sup>  <https://orcid.org/0000-0003-3675-6769>,

**Jana Škerlová**<sup>b</sup>  <https://orcid.org/0000-0002-9579-4047>,

**Pavčina Řezáčová**<sup>b</sup>  <https://orcid.org/0000-0001-9626-346X>,

**Анђелка Ћелић**<sup>a</sup>  <https://orcid.org/0000-0002-1058-6872>,

**Едвард Петри**<sup>a</sup>  <https://orcid.org/0000-0002-3650-1523>

<sup>a</sup> Природно-математички факултет Универзитета у Новом Саду, Нови Сад, Србија; <sup>b</sup> Институт за органску хемију и биохемију Чешке академије наука, Праг, Чешка Република.

имејл: maja@dbe.uns.ac.rs

Познавање структура алдо-кето редуктаза потпородице 1Ц, међу којима је и АКР1ЦЗ, од изузетног је значаја узимајући у обзир улогу овог ензима у физиолошким условима као и у настанку и развоју различитих болести, у првом реду канцера осетљивих на стероидне хормоне и у процесу стицања отпорности различитих врста канцера на хемиотерапију. У овом раду је кристалисана хетерологно експримирана хумана АКР1ЦЗ у апопротеинској форми и са инхибитором који је тетразолни дериват жучних киселина. Оба кристала су дифрактовала испод 2 Å што је омогућило увид у детаље структуре активног места ензима без инхибитора, и са стероидним тетразолним инхибитором. Утврђено је да постоје значајне разлике у позиционирању кључних аминокиселина из каталитичке тетраде и стероидних цепова активног места између ова два модела. Наведени резултати могу служити као полазна основа за молекулско моделовање и дизајнирање специфичнијих једињења са јачим афинитетом везивања за АКР1ЦЗ.

*Захвалница:* Истраживања је финансирао Министарство науке, технолошког развоја и иновација Републике Србије (Ев. Бр. ОИ 172021 и ДС50).

## COMPARISON OF ALDO-KETO REDUCTASE 1C3 (AKR1C3) STRUCTURES IN APOPROTEIN FORM AND BOUND TO BILE-ACID FUSED TETRAZOLE INHIBITOR

**Maja Marinović**<sup>a</sup>  <https://orcid.org/0000-0001-8696-7148>,

**Dušan Škorić**<sup>b</sup>  <https://orcid.org/0000-0002-3683-0255>,

**Sofija Bekić**<sup>b</sup>  <https://orcid.org/0000-0002-9020-698X>,

**Michael Kugler**<sup>b</sup>  <https://orcid.org/0000-0002-0752-9682>,

**Jiří Brynda**<sup>b</sup>  <https://orcid.org/0000-0003-3675-6769>,

**Jana Škerlová**<sup>b</sup>  <https://orcid.org/0000-0002-9579-4047>,

**Pavlna Řezáčová**<sup>b</sup>  <https://orcid.org/0000-0001-9626-346X>,

**Andelka Čelić**<sup>a</sup>  <https://orcid.org/0000-0002-1058-6872>,

**Edward Petri**<sup>a</sup>  <https://orcid.org/0000-0002-3650-1523>

<sup>a</sup> Faculty of Sciences, University of Novi Sad, Novi Sad, Serbia; <sup>b</sup> Institute of Organic Chemistry and Biochemistry, The Czech Academy of Sciences, Prague, Czech Republic  
e-mail: maja@dbe.uns.ac.rs

Understanding the structure of the aldo-keto reductase subfamily 1C members, including AKR1C3, is very important, given the role of this enzyme in physiological conditions as well as in the progression and development of diseases, including steroid hormone-sensitive cancers. These enzymes are also involved in developing resistance to chemotherapy in different types of cancer. In this study, recombinant human AKR1C3 was crystallized in apoprotein form and with a tetrazole-fused bile acid inhibitor. Both crystals diffracted well below 2 Å, allowing us to see the details of the enzyme's active site with and without the steroid tetrazole inhibitor. Significant differences between these two models were found in the positioning of amino acids from the catalytic tetrad and steroid pockets of the enzyme active site. The results of this work can be used as a starting point for molecular modeling and structure-aided design of compounds with stronger binding affinity for AKR1C3.

*Acknowledgement:* The authors gratefully acknowledge the financial support of the Ministry of Science, Technological Development and Innovation of the Republic of Serbia (Grant No. 172021 and DS50).

## СИНТЕЗА И СТРУКТУРНА КАРАКТЕРИЗАЦИЈА НОВИХ СОЛИ КОЈЕ САДРЖЕ ЈЕДИНСТВЕНЕ [M<sup>IV</sup>F<sub>3</sub>(XeF<sub>2</sub>)<sub>3</sub>]<sup>+</sup> (M = Pd, Pt) КАТЈОНЕ

**Klemen Motaln**<sup>a,6</sup>  <https://orcid.org/0000-0003-0051-8611>,

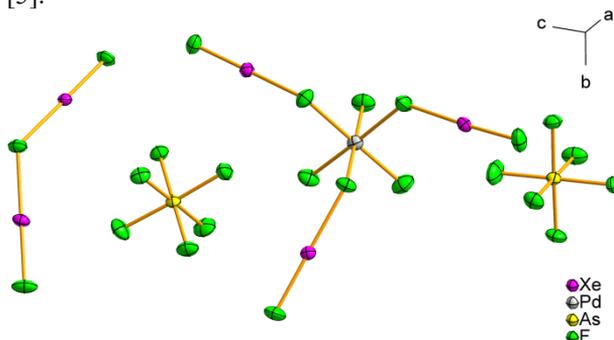
**Matic Lozinšek**<sup>a,6</sup>  <https://orcid.org/0000-0002-1864-4248>

<sup>a</sup> Jožef Stefan Institute, Ljubljana, Slovenia;

<sup>6</sup> Jožef Stefan International Postgraduate School, Ljubljana, Slovenia

имејл: klemen.motaln@ijs.si

Хемија деривата ксенон(II)-флуорида представља највише изучавану област хемије племенитих гасова, захваљујући томе што је овом полазном супстанцом релативно лако руковати у поређењу са једињењима вишег оксидационог стања [1]. Као средње јака Луисова база, XeF<sub>2</sub> реагује са јаким флуодид-акцепторским пентафлуоридима (AF<sub>5</sub>) при чему настају једињења типа [Xe<sub>2</sub>F<sub>3</sub>][AF<sub>6</sub>], [XeF][AF<sub>6</sub>], и [XeF][A<sub>2</sub>F<sub>11</sub>], дискретне структуре [2]. Насупрот томе, у реакцији XeF<sub>2</sub> са тетрафлуоридима метала, као слабијим Луисовим киселинама, долази до формирања олигомерних и полимерних структура [3, 4]. Овде дајемо синтезу [Xe<sub>2</sub>F<sub>3</sub>][MF<sub>3</sub>(XeF<sub>2</sub>)<sub>3</sub>][AsF<sub>6</sub>]<sub>2</sub> (M = Pd, Pt) (Слика 1) и њихову структурну карактеризацију. Монокристали ових једињења добијени су спором кристализацијом из анхидрованих HF раствора који су садржали [M<sup>IV</sup>F<sub>6</sub>]<sup>2-</sup> и [AsF<sub>6</sub>]<sup>-</sup> анјоне. Нови дискретни катјони [MF<sub>3</sub>(XeF<sub>2</sub>)<sub>3</sub>]<sup>+</sup> представљају прве примере једињења у којима је више XeF<sub>2</sub> координовано за један M<sup>IV</sup> центар. [Xe<sub>2</sub>F<sub>3</sub>][PtF<sub>3</sub>(XeF<sub>2</sub>)<sub>3</sub>][AsF<sub>6</sub>]<sub>2</sub> је такође прво структурно окарактерисано Xe<sup>II</sup>-Pt<sup>IV</sup> једињење, што је важно истаћи, јер се сумња да је молекул XeF<sub>2</sub> координован са Pt<sup>IV</sup> и у првом једињењу племенитог гаса, XePtF<sub>6</sub>, које је и даље оскудно окарактерисано [5].



**Слика 1.** Асиметрична јединица [Xe<sub>2</sub>F<sub>3</sub>][PdF<sub>3</sub>(XeF<sub>2</sub>)<sub>3</sub>][AsF<sub>6</sub>]<sub>2</sub> (елипсоиди приказани са 50% вероватноће).

[1] M. Tramšek, B. Žemva, *Acta Chim. Slov.* **53** (2006) 105

[2] F. O. Sladky, *et al.*, *J. Chem. Soc. A* (1969) 2179

[3] K. Lutar, H. Borrmann, B. Žemva, *Inorg. Chem.* **37** (1998) 3002

[4] K. Radan, *et al.*, *Angew. Chem. Int. Ed.* **53** (2014) 13715

[5] L. Graham, *et al.*, *Coord. Chem. Rev.* **197** (2000) 321.

## SYNTHESIS AND STRUCTURAL CHARACTERIZATION OF THE NOVEL SALTS CONTAINING UNIQUE [M<sup>IV</sup>F<sub>3</sub>(XeF<sub>2</sub>)<sub>3</sub>]<sup>+</sup> (M = Pd, Pt) CATIONS

**Klemen Motaln**<sup>a,b</sup>  <https://orcid.org/0000-0003-0051-8611>,

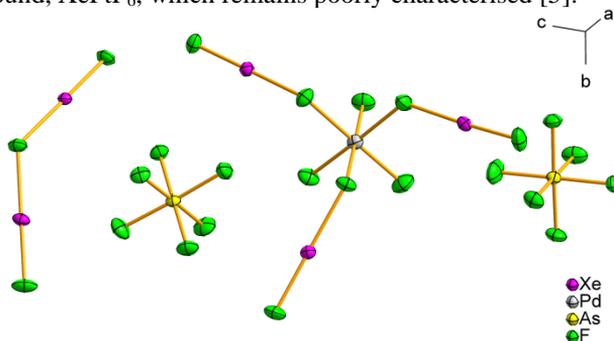
**Matic Lozinšek**<sup>a,b</sup>  <https://orcid.org/0000-0002-1864-4248>,

<sup>a</sup> Jožef Stefan Institute, Ljubljana, Slovenia;

<sup>b</sup> Jožef Stefan International Postgraduate School, Ljubljana, Slovenia

e-mail: klemen.motaln@ijs.si

The chemistry of xenon(II) fluoride derivatives represents the most extensively studied area within the realm of noble-gas compounds, due to the relative ease with which the parent xenon difluoride can be handled in comparison to its higher oxidation state relatives [1]. The reactions of XeF<sub>2</sub>, a moderately strong Lewis base, with strong fluoride ion-accepting pentafluorides (AF<sub>5</sub>) result in the formation of compounds of the type [Xe<sub>2</sub>F<sub>3</sub>][AF<sub>6</sub>], [XeF][AF<sub>6</sub>], and [XeF][A<sub>2</sub>F<sub>11</sub>], which have discrete structures [2]. Conversely, when metal tetrafluorides, which are weaker Lewis acids, are reacted with XeF<sub>2</sub> they form compounds with oligo- or polymeric structures [3, 4]. In this contribution, we report on the synthesis of [Xe<sub>2</sub>F<sub>3</sub>][MF<sub>3</sub>(XeF<sub>2</sub>)<sub>3</sub>][AsF<sub>6</sub>]<sub>2</sub> (M = Pd, Pt) (**Figure 1**), and their structural characterisation. Single crystals of the compounds were prepared by slow crystallisation from anhydrous HF solutions containing [M<sup>IV</sup>F<sub>6</sub>]<sup>2-</sup> and [AsF<sub>6</sub>]<sup>-</sup> anions. The novel discrete [MF<sub>3</sub>(XeF<sub>2</sub>)<sub>3</sub>]<sup>+</sup> cations represent the first examples of multiple XeF<sub>2</sub> molecules coordinating to a single M<sup>IV</sup> centre. [Xe<sub>2</sub>F<sub>3</sub>][PtF<sub>3</sub>(XeF<sub>2</sub>)<sub>3</sub>][AsF<sub>6</sub>]<sub>2</sub> is also the first Xe<sup>II</sup>-Pt<sup>IV</sup> compound to be structurally characterised, which is noteworthy because the coordination of XeF<sub>2</sub> to Pt<sup>IV</sup> is also suspected to occur in the structure of the first noble-gas compound, XePtF<sub>6</sub>, which remains poorly characterised [5].



**Figure 1.** Asymmetric unit of [Xe<sub>2</sub>F<sub>3</sub>][PdF<sub>3</sub>(XeF<sub>2</sub>)<sub>3</sub>][AsF<sub>6</sub>]<sub>2</sub> (50% probability ellipsoids).

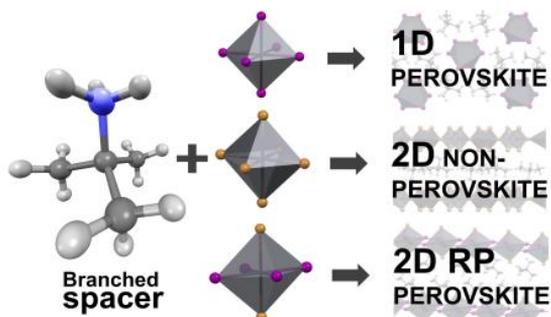
- [1] M. Tramšek, B. Žemva, *Acta Chim. Slov.* **53** (2006) 105
- [2] F. O. Sladky, *et al.*, *J. Chem. Soc. A* (1969) 2179
- [3] K. Lutar, H. Borrmann, B. Žemva, *Inorg. Chem.* **37** (1998) 3002
- [4] K. Radan, *et al.*, *Angew. Chem. Int. Ed.* **53** (2014) 13715
- [5] L. Graham, *et al.*, *Coord. Chem. Rev.* **197** (2000) 321.

## СТАБИЛИЗАЦИЈА 2D ПЕРОВСКИТА ПОСРЕДСТВОМ МЕШОВИТИХ ХАЛОГЕНИДНИХ АНЈОНА

**Jasminka Popović**<sup>a</sup>  <https://orcid.org/0000-0003-0800-2249>,  
**Aleksandra Djurišić**<sup>b</sup>  <https://orcid.org/0000-0002-5183-1467>,  
**Juraj Ovčar**<sup>a</sup>, **Ivor Lončarić**<sup>a</sup>  <https://orcid.org/0000-0002-5554-4641>

<sup>a</sup> *Ruđer Bošković Institute, Zagreb, Hrvatska;* <sup>b</sup> *Hong Kong University, Hong Kong*  
 имејл: jpopovic@irb.hr

Док су ограничења у избору спејсера значајно мања за 2D перовските у поређењу са 3D перовскитима, облик је и даље подложен ограничењима због величине неорганског цепа између четири суседна октаедра који деле темена. Да бисмо истражили утицај гранања катјонских спејсера за формирање Ruddlesden–Popper (RP) структура (Слика 1), спровели смо свеобухватну анализу структура формираних коришћењем терц-бутил амонијум катјона (*t*-BA) [1]. За разлику од чистих бромидних и чистих јодида, који доводе до формирања 1D структура, употреба мешаних халогенида омогућава формирање *t*-BA<sub>2</sub>PbBr<sub>2</sub>I<sub>2</sub> RP перовскитне структуре са специфичним редоследом бромидних и јодидних анјона. *t*-BA спејсер, упркос свом разгранатом и волуминозном облику који спречава њено дубље продирање, може да формира значајне водоничне везе које доводе до стабилизације RP склопа ако је неоргански цеп дизајниран тако да бромидни анјони заузимају терминалне аксијалне позиције, док јодидни анјони заузимају екваторијалне позиције. Постигли смо изузетно слагање између експериментално одређених и теоријски предвиђених структура користећи глобалну оптимизацију путем алгорита *minima hopping* за слојевите перовските [2], илуструјући способност предвиђања структуре RP перовскита и манипулисања перовскитном структуром кроз рационалан дизајн неорганског цепа.



**Слика 1.** RP структура са волуминозним катјоном-спејсером за чисте и мешовите халогениде.

[1] J. Ovčar, *et al.*, *Chem. Mater.* **34**(10) (2022) 4286

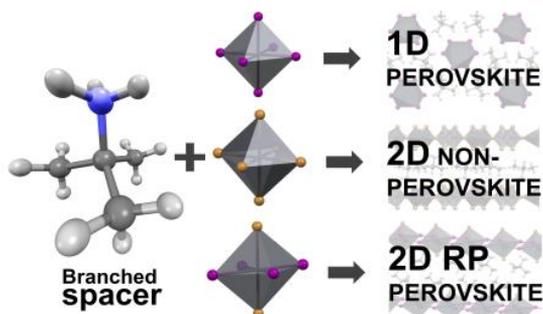
[2] J. Ovčar, *et al.*, *Phys. Rev. B* **107** (2023) 174109.

## STABILIZATION OF 2D PEROVSKITES VIA MIXED HALIDE ANIONS

**Jasminka Popović**<sup>a</sup>  <https://orcid.org/0000-0003-0800-2249>,  
**Aleksandra Djurišić**<sup>b</sup>  <https://orcid.org/0000-0002-5183-1467>,  
**Juraj Ovčar**<sup>a</sup>, **Ivor Lončarić**<sup>a</sup>  <https://orcid.org/0000-0002-5554-4641>

<sup>a</sup> Ruđer Bošković Institute, Zagreb, Hrvatska; <sup>b</sup> Hong Kong University, Hong Kong  
e-mail: jpopovic@irb.hr

While the restrictions on the choice of spacers are greatly relaxed for 2D perovskites compared to 3D perovskites, the shape is still subject to limitations due to the size of the inorganic pocket between four adjacent corner-sharing octahedra. To investigate the effect of the spacer cation branching on the formation of Ruddlesden–Popper (RP) structures (**Figure 1**), we performed a comprehensive investigation of structures formed using tert-butyl ammonium (*t*-BA) [1]. In contrast to pure bromides and pure iodides, that lead to the formation of 1D assemblies, the use of mixed halides enables the formation of the *t*-BA<sub>2</sub>PbBr<sub>2</sub>I<sub>2</sub> RP perovskite structure with the specific ordering of the bromide and iodide anions. The *t*-BA spacer, despite its branched and bulky shape that prevents its deeper penetration, is able to form significant H-bonds that lead to the stabilization of the RP assembly if the inorganic pocket is designed in such a way that the bromide anions occupy terminal axial positions, while the iodides occupy equatorial positions. We obtain excellent agreement between experimentally determined and theoretically predicted structures using global optimization via a minima hopping algorithm for layered perovskites [2], illustrating the ability to predict the structure of RP perovskites and to manipulate the perovskite structure by the rational design of the inorganic pocket.



**Figure 1.** RP structures with bulky spacer cation for pure and mixed halides.

- [1] J. Ovčar, *et al.*, *Chem. Mater.* **34**(10) (2022) 4286  
[2] J. Ovčar, *et al.*, *Phys. Rev. B* **107** (2023) 174109.

КСЕНОН–КИСЕОНИК-ВЕЗАНИ КАТЈОН  $[\text{H}_2\text{NC}(\text{F})\text{OXeF}]^+$ 

**Kristian Radan** <sup>a</sup>  <https://orcid.org/0000-0003-4554-3976>,

**Valentina Milašinović** <sup>a</sup>  <https://orcid.org/0000-0001-6761-876X>,

**Miha Virant** <sup>a</sup>  <https://orcid.org/0000-0002-5919-3631>,

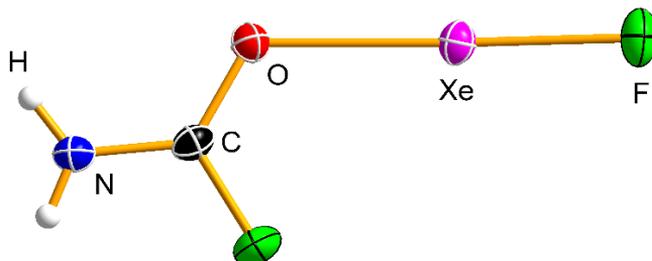
**Matic Lozinšek** <sup>a</sup>  <https://orcid.org/0000-0002-1864-4248>

<sup>a</sup> *Jožef Stefan Institute, Ljubljana, Slovenia*

имејл: kristian.radan@ijs.si

Структурна хемија једињења ксенона(II) углавном је представљена врстама у којима Луисова киселина катјон  $\text{XeF}^+$  интерагује са флуоридним ањоном у чврстом стању преко флуоридног моста. С друге стране, кисеонични донорски лиганди који се понашају као Луисове базе према  $\text{XeF}^+$  катјону, слабо су истражени и ограничени су на само три примера катјонских адуката, и то:  $[\text{FSO}_3-(\text{XeF})_2]^+$  [1],  $[(\text{F}_3\text{C})_2\text{SO}-\text{XeF}]^+$  [2] и  $[\text{F}_3\text{CC}(\text{NH}_2)\text{O}-\text{XeF}]^+$  [3], од којих је само први кристалографски окарактерисан [4].

У овом раду, еквимоларне количине карбамоил-флуорида ( $\text{NH}_2\text{COF}$ ) и  $[\text{XeF}][\text{AsF}_6]$  реаговале су на ниској температури у безводном HF. Формирање адуктног катјона ксенон–кисеоник  $[\text{H}_2\text{NC}(\text{F})\text{OXeF}]^+$  (Слика 1) као  $[\text{AsF}_6]^-$ -соли потврђено је рендгенском структурном анализом монокристала на ниској температури и нискотемпературском Раманском спектроскопијом.



**Слика 1.** Кристална структура катјона  $[\text{H}_2\text{NC}(\text{F})\text{OXeF}]^+$ . Термални елипсоиди су нацртани на нивоу вероватноће од 50%.

[1] R. J. Gillespie, G. J. Schrobilgen, *Inorg. Chem.* **13** (1974) 1694

[2] R. Minkwitz, W. Molsbeck, *Z. Anorg. Allg. Chem.* **612** (1992) 35

[3] G. J. Schrobilgen, J. M. Whalen, *Inorg. Chem.* **33** (1994) 5207

[4] R. J. Gillespie, *et al.*, *J. Chem. Soc., Dalton Trans.* (1977) 1003.

*Захвалница:* Овај рад су подржали Почетни грант Европског истраживачког савета (950625) и постдокторска стипендија *Marie Skłodowska-Curie* (10111119) у оквиру програма Хоризонт 2020 и Хоризонт Европа, програми за истраживање и иновације Европске уније.

## THE XENON–OXYGEN-BONDED CATION $[\text{H}_2\text{NC}(\text{F})\text{OXeF}]^+$

**Kristian Radan** <sup>a</sup>  <https://orcid.org/0000-0003-4554-3976>,

**Valentina Milašinić** <sup>a</sup>  <https://orcid.org/0000-0001-6761-876X>,

**Miha Virant** <sup>a</sup>  <https://orcid.org/0000-0002-5919-3631>,

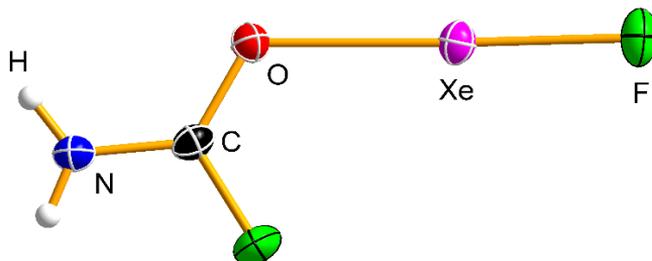
**Matic Lozinšek** <sup>a</sup>  <https://orcid.org/0000-0002-1864-4248>

<sup>a</sup> *Jožef Stefan Institute, Ljubljana, Slovenia*

e-mail: kristian.radan@ijs.si

The structural chemistry of xenon(II) compounds is largely represented by species, in which a Lewis acidic  $\text{XeF}^+$  cation interacts with a fluoroanion in the solid state by means of a fluoride bridge. On the other hand, oxygen donor ligands acting as Lewis bases towards the  $\text{XeF}^+$  cation remain poorly explored and limited to only three examples of adduct cations, namely:  $[\text{FSO}_3^--(\text{XeF})_2]^+$  [1],  $[(\text{F}_3\text{C})_2\text{SO}-\text{XeF}]^+$  [2], and  $[\text{F}_3\text{CC}(\text{NH}_2)\text{O}-\text{XeF}]^+$  [3], of which only the first was crystallographically characterised [4].

In the present work, equimolar amounts of carbamoyl fluoride ( $\text{NH}_2\text{COF}$ ) and  $[\text{XeF}][\text{AsF}_6]$  were reacted at low temperature in anhydrous HF. The formation of the xenon–oxygen-bonded adduct cation  $[\text{H}_2\text{NC}(\text{F})\text{OXeF}]^+$  (**Figure 1**) as the  $[\text{AsF}_6]^-$  salt was confirmed by low-temperature single-crystal X-ray diffraction analysis and low-temperature Raman spectroscopy.



**Figure 1.** Crystal structure of the  $[\text{H}_2\text{NC}(\text{F})\text{OXeF}]^+$  cation. Thermal ellipsoids are drawn at the 50% probability level.

[1] R. J. Gillespie, G. J. Schrobilgen, *Inorg. Chem.* **13** (1974) 1694

[2] R. Minkwitz, W. Molsbeck, *Z. Anorg. Allg. Chem.* **612** (1992) 35

[3] G. J. Schrobilgen, J. M. Whalen, *Inorg. Chem.* **33** (1994) 5207

[4] R. J. Gillespie, *et al.*, *J. Chem. Soc., Dalton Trans.* (1977) 1003.

*Acknowledgement:* This work was supported by the European Research Council Starting Grant (950625) and Marie Skłodowska-Curie Actions Postdoctoral Fellowship (1011119) under the European Union's Horizon 2020 and Horizon Europe, respectively, Research and Innovation Programmes.

## СИНТЕЗА И СТРУКТУРА ЈОНСКОГ КОКРИСТАЛА Ag(I) СА ЛИГАНДОМ ТИПА ПИРАЗОЛА

**Никола Д. Радновић**<sup>a</sup>  <https://orcid.org/0000-0002-5675-9003>,  
**Берта Барта Холо**<sup>a</sup>  <https://orcid.org/0000-0002-5786-442X>,  
**Марко В. Родић**<sup>a</sup>  <https://orcid.org/0000-0002-4471-8001>

<sup>a</sup> Универзитет у Новом Саду, Природно-математички факултет, Нови Сад, Србија

имејл: nikola.radnovic@dh.uns.ac.rs

Реакција топлог метанолног раствора етил-5-амино-1-метил-1*H*-пиразол-4-карбоксилата, L, са AgNO<sub>3</sub> дала је јонски кокристал [AgL<sub>2</sub>H<sub>2</sub>O][AgL<sub>2</sub>(NO<sub>3</sub>)<sub>2</sub>·2[AgL<sub>2</sub>NO<sub>3</sub>]·3H<sub>2</sub>O.

Асиметрична јединица се састоји од неутралног и јонског дела. Неутрални део асиметричне јединице садржи [AgL<sub>2</sub>NO<sub>3</sub>] и три молекула воде, док јонски део садржи два катјона, [AgL<sub>2</sub>H<sub>2</sub>O]<sup>+</sup> и [AgL<sub>2</sub>]<sup>+</sup>, и два нитратна анјона. Молекулска структура неутралног комплекса [AgL<sub>2</sub>NO<sub>3</sub>] састоји се од Ag<sup>+</sup>, два L и нитратног јона. Атом сребра се налази у окружењу T-облика, које се састоји од два лиганда који су монодентатно координовани преко атома азота и једног нитратног јона координованог преко атома кисеоника. Слично томе, катјон [AgL<sub>2</sub>H<sub>2</sub>O]<sup>+</sup> такође поприма молекулску геометрију у облику слова T, али уместо да се координује са нитратним јоном, централни атом се координује са молекулом воде. Други катјон, [AgL<sub>2</sub>]<sup>+</sup>, показује линеарну геометрију. Поред електростатичког привлачења између комплексних катјона и нитратних анјона, присутне су и стабилизујуће интеракције водоничне везе. То укључује N–H···O водоничну везу између амино групе лиганда и молекула воде, као и O–H···O водоничну везу између молекула воде и нитратних анјона.

Одабрани кристалографски подаци и параметри утачњавања: C<sub>56</sub>H<sub>96</sub>Ag<sub>4</sub>N<sub>28</sub>O<sub>32</sub>, P2<sub>1</sub>/c,  $a = 10,5393(3) \text{ \AA}$ ,  $b = 40,7969(9) \text{ \AA}$ ,  $c = 20,1537(3) \text{ \AA}$ ,  $\beta = 103,910(2)^\circ$ ,  $V = 8411,4(3) \text{ \AA}^3$ ,  $Z = 4$ ,  $R = 5,7 \%$ , за 1130 параметара и 21163 рефлексија.

*Захвалница:* Истраживања је подржало Министарство науке, технолошког развоја и иновација Републике Србије (Ев. бр. 451-03-66/2024-03/200125 и 451-03-65/2024-03/200125) и немачко-српски билатерални пројекат: Примена квантно- кристалографских метода у проширеној рутинској рендгенској структурној анализи малих молекула (Ев. бр. 337-00-253/2023-05/12).

## SYNTHESIS AND STRUCTURE OF IONIC CO-CRYSTAL OF Ag(I) WITH PYRAZOLE-TYPE LIGAND

**Nikola D. Radnović**<sup>a</sup>  <https://orcid.org/0000-0002-5675-9003>,  
**Berta Barta Holló**<sup>a</sup>  <https://orcid.org/0000-0002-5786-442X>,  
**Marko V. Rodić**<sup>a</sup>  <https://orcid.org/0000-0002-4471-8001>

<sup>a</sup> *University of Novi Sad, Faculty of Sciences, Novi Sad, Serbia*  
e-mail: nikola.radnovic@dh.uns.ac.rs

The reaction of warm methanolic solution of ethyl 5-amino-1-methyl-1*H*-pyrazole-4-carboxylate, L, with AgNO<sub>3</sub> yielded ionic co-crystal [AgL<sub>2</sub>H<sub>2</sub>O][AgL<sub>2</sub>(NO<sub>3</sub>)<sub>2</sub>·2[AgL<sub>2</sub>NO<sub>3</sub>]·3H<sub>2</sub>O.

An asymmetric unit consists of neutral and ionic parts. The neutral part of the asymmetric unit contains two neutral complexes [AgL<sub>2</sub>NO<sub>3</sub>] and three molecules of water, while the ionic part contains two cations, [AgL<sub>2</sub>H<sub>2</sub>O]<sup>+</sup> and [AgL<sub>2</sub>]<sup>+</sup>, and two nitrate anions. The molecular structure of the neutral complex [AgL<sub>2</sub>NO<sub>3</sub>] consists of an Ag<sup>+</sup>, two L, and a nitrate ion. The silver atom is situated in a T-shape environment, composed of two ligands that are coordinated in a monodentate manner through the nitrogen atom and one nitrate ion coordinated through the oxygen atom. Similarly, cation [AgL<sub>2</sub>H<sub>2</sub>O]<sup>+</sup> also adopts a T-shaped molecular geometry, but instead of coordinating with a nitrate ion, the central atom coordinates with a water molecule. The second cation, [AgL<sub>2</sub>]<sup>+</sup>, exhibits a linear geometry. In addition to the electrostatic attractions between complex cations and nitrate anions, stabilizing hydrogen bonding interactions are present. These include N–H···O hydrogen bonding between the amino group of the ligand and water molecule, as well as O–H···O hydrogen bonding between water molecules and nitrate anions.

Selected crystallographic data and refinement details: C<sub>56</sub>H<sub>96</sub>Ag<sub>4</sub>N<sub>28</sub>O<sub>32</sub>, *P*2<sub>1</sub>/*c*, *a* = 10.5393(3) Å, *b* = 40.7969(9) Å, *c* = 20.1537(3) Å, β = 103.910(2) °, *V* = 8411.4(3) Å<sup>3</sup>, *Z* = 4, *R* = 5.7 %, for 1130 parameters and 21163 independent reflections.

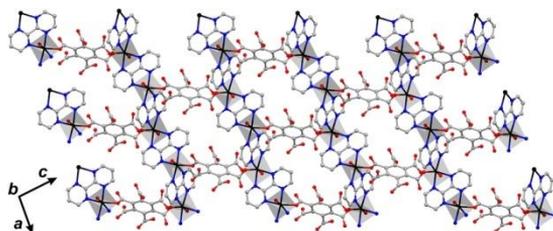
*Acknowledgement:* This research was supported by the Ministry of Science, Technological Development and Innovation of the Republic of Serbia (Grants No. 451-03-66/2024-03/ 200125 & 451-03-65/2024-03/200125) and German–Serbian joint scientific cooperation project: Application of quantum-crystallographic methods in extended routine X-ray structural analysis of small molecules (Grant No. 337-00-253/2023-05/12).

## СЛОЈЕВИТИ ЦИНК–2,2'-БИПИРИМИДИН КОМПЛЕКС СА АНЈОНОМ МЕЛИТНЕ КИСЕЛИНЕ

**Лидија Радовановић**<sup>a</sup>  <https://orcid.org/0000-0002-7505-6290>,  
**Душан Маленов**<sup>b</sup>  <https://orcid.org/0000-0002-3060-3377>,  
**Јелена Роган**<sup>b</sup>  <https://orcid.org/0000-0002-4147-5251>

<sup>a</sup> Иновациони центар Технолошко-металуричког факултета д. о. о. у Београду, Београд, Србија; <sup>b</sup> Универзитет у Београду – Хемијски факултет, Београд, Србија; <sup>c</sup> Технолошко-металурички факултет, Универзитет у Београду, Београд, Србија  
 имејл: lradovanovic@tmf.bg.ac.rs

Безбојни кристали дводимензионалног комплекса цинка  $\{[Zn_2(\text{bipum})_2(\text{H}_2\text{mell})(\text{H}_2\text{O})_2] \cdot 10\text{H}_2\text{O}\}_n$ , **1**, добијени су спорим упаравањем на собној температури (bipum = 2,2'-бипиримидин, mell<sup>6-</sup> = хексаанјон мелитне киселине) и окарактерисани рендгенском структурном и квантно-хемијском анализом. Атоми Zn су у деформисаном октаедарском окружењу и повезани су мостовним bipum- и H<sub>2</sub>mell<sup>4-</sup>-лигандима, тако да формирају таласасте слојеве паралелне *ac*-равни (Слика 1). Слојеви су повезани сложеном мрежом водоничних веза које граде молекули воде, аква-лиганди и некоординирани О-атоми из H<sub>2</sub>mell<sup>4-</sup> и додатно су стабилизовани нековалентним C–H⋯O, O–H⋯π and C–O⋯π интеракцијама. Интеракција између две октаедарске јединице (Слика 2a) је веома јака (–114,56 kcal/mol), што је у сагласности са израженом комплементарношћу електростатичких потенцијала на одговарајућим молекулским површинама (Слика 2b).



Слика 1. Пројекција таласастих слојева комплекса **1** на *ac*-раван.

Одабрани кристалографски подаци: C<sub>36</sub>H<sub>18</sub>N<sub>12</sub>O<sub>12</sub>Zn<sub>2</sub>, моноклинични, *P*2<sub>1</sub>/*c*, *a* = 10,530(2), *b* = 17,920(4), *c* = 21,160(4) Å, β = 96,74(3) °, *V* = 3965,1(14) Å<sup>3</sup>, *Z* = 4, *R*<sub>1</sub> = 0,0449, *wR*<sub>2</sub> = 0,1078, *S* = 1,09 за 633 параметара и 5914 рефлексија.

Захвалница: Овај рад финансира Министарство науке, технолошког развоја и иновација Републике Србије (бројеви уговора 451-03-66/2024-03/200287; 451-03-65/2024-03/200135 и 451-03-66/2024-03/200168).

## LAYERED ZINC–2,2'-BIPYRIMIDINE COMPLEX WITH ANION OF MELLITIC ACID

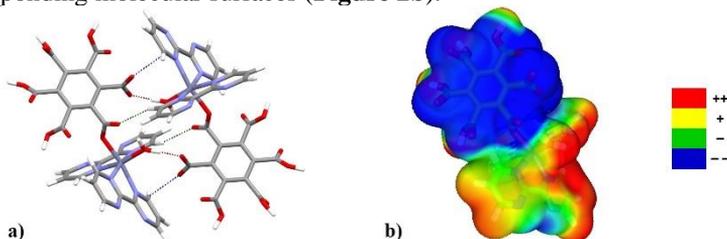
**Lidija Radovanović**<sup>a</sup>  <https://orcid.org/0000-0002-7505-6290>,

**Dušan Malenov**<sup>b</sup>  <https://orcid.org/0000-0002-3060-3377>,

**Jelena Rogan**<sup>c</sup>  <https://orcid.org/0000-0002-4147-5251>

<sup>a</sup> Innovation Center of the Faculty of Technology and Metallurgy in Belgrade Ltd., Belgrade, Serbia; <sup>b</sup> University of Belgrade - Faculty of Chemistry, Belgrade, Serbia; <sup>c</sup> Faculty of Technology and Metallurgy, University of Belgrade, Belgrade, Serbia  
e-mail: lradovanovic@tmf.bg.ac.rs

Colourless single crystals of two-dimensional zinc complex  $\{[\text{Zn}_2(\text{bipym})_2(\text{H}_2\text{mell})(\text{H}_2\text{O})_2] \cdot 10\text{H}_2\text{O}\}_n$ , **1**, were prepared by slow evaporation method at room temperature (bipym = 2,2'-bipyrimidine, mell<sup>6-</sup> = hexaanion of mellitic acid) and characterized by the single-crystal X-ray diffraction and quantum chemical calculations. Zn atoms are in a deformed octahedral environment and connected by bridging bipym and H<sub>2</sub>mell<sup>4-</sup> ligands into wavy-like layers parallel to the *ac* plane (**Figure 1**). The layers are interconnected by a complex hydrogen bond network involving free water molecules, aqua ligands, and noncoordinated O atoms from H<sub>2</sub>mell<sup>4-</sup> and additionally stabilized by C–H⋯O, O–H⋯π and C–O⋯π non-covalent interactions. Interaction between two octahedral units (**Figure 2a**) in this crystal structure is very strong (–114.56 kcal/mol), which is in agreement with the pronounced complementarity of electrostatic potentials on the corresponding molecular surfaces (**Figure 2b**).



**Figure 2.** Interaction between two octahedral units of **1** (a) and electrostatic potentials of a unit plotted at the surface defined by electron density of 0.001 a. u. (b).

*Selected crystallographic data:* C<sub>36</sub>H<sub>18</sub>N<sub>12</sub>O<sub>12</sub>Zn<sub>2</sub>, monoclinic, *P*<sub>2</sub><sub>1</sub>/*c*, *a* = 10.530(2), *b* = 17.920(4), *c* = 21.160(4) Å, β = 96.74(3) °, *V* = 3965.1(14) Å<sup>3</sup>, *Z* = 4, *R*<sub>1</sub> = 0.0449, *wR*<sub>2</sub> = 0.1078, *S* = 1.09 for 633 parameters and 5914 reflections.

*Acknowledgement:* This work was supported financially by the Ministry of Science, Technological Development and Innovation of the Republic of Serbia (Contracts Nos. 451-03-66/2024-03/200287; 451-03-65/2024-03/200135 and 451-03-66/2024-03/200168).

## ПОЛИЈОДИДИ ЗАРОБЉЕНИ У ВОДНИЧНО ВЕЗАНИМ УМРЕЖЕНИМ СТРУКТУРАМА НЕКИХ ЕТИЛКСАНТИНИЈУМ-КАТЈОНА

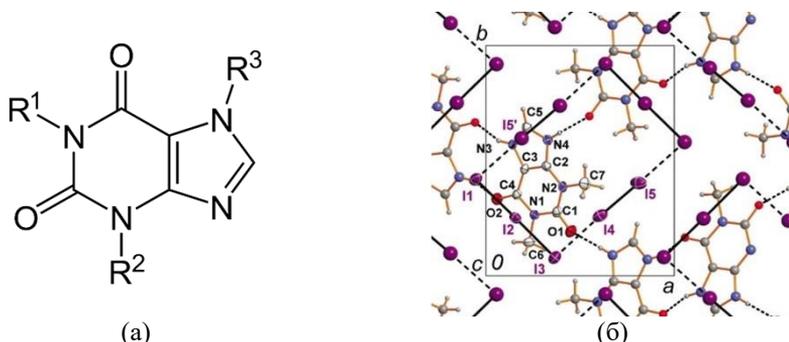
Guido J. Reiss <sup>a</sup>  <https://orcid.org/0000-0002-3004-3955>

<sup>a</sup> *Bioanorganische Chemie, Heinrich-Heine-Universität Düsseldorf, Düsseldorf, Germany*

имејл: reissg@hhu.de

Теофилин и кофеин су природни производи и припадају класи метилксантина. Обе супстанце су изоловане пре више од 130 година. Ове супстанце припадају такозваним наследним лековима. У случају теофилина се такође наводи ограничена клиничка терапеутска употреба.

Реакција ксантина (систематски назив: 3,7-дихидро-1*H*-пурин-2,6-дион; **Слика 1а**) са јаким киселинама доводи до стварања одговарајућих соли. Метилксантини кофеин и теофилин могу се протонovati на петочланом прстену 3,7-дихидро-1*H*-пурин-2,6-дионског фрагмента. Катјони метилксантина повезани су водничним везама NH...О у таквим солима да формирају дводимензионалне и тродимензионалне структуре. У случају дводимензионалне воднично везане умрежене структуре, контраанјони као што је полијодиди умеђу се између суседних катјонских слојева (**Слика 1б**). У случају тродимензионалних умрежених структура могу се добити кратколанчани полијодиди као и полимери. У неколико случајева, слабе и средње јаке интеракције између умрежених структура као домаћина и сложених полијодидних контраанјона показују геометријско прилагођавање названо *dimensional caging* [2].



**Слика 1.** (а) Супституциона шема ксантина.

Кофеин: R<sup>1</sup>, R<sup>2</sup>, R<sup>3</sup> = метил; Теофилин: R<sup>1</sup>, R<sup>2</sup> = метил, R<sup>3</sup> = H.

(б) Слојевита структура воднично везаних теофилинијум катјона са контра полијодидним јонима који се прилагођавају мотивима који су воднично везани.

[1] G. J. Reiss, *Z. Kristallogr. N. Cryst. Struct.* **234** (2019) 737

[2] P. H. Svensson, *et al.*, *Inorg. Chem.* **47** (2008) 11464.

## POLYIODIDES TRAPPED IN HYDROGEN BONDED FRAMEWORKS OF SOME METHYLYXANTHINIUM CATIONS

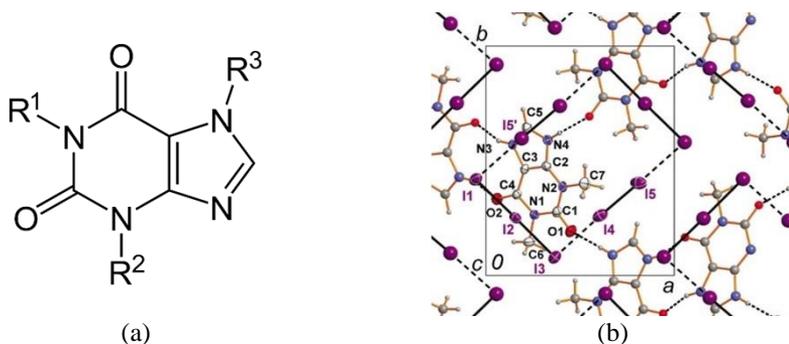
Guido J. Reiss <sup>a</sup>  <https://orcid.org/0000-0002-3004-3955>

<sup>a</sup> *Bioanorganische Chemie, Heinrich-Heine-Universität Düsseldorf, Düsseldorf, Germany*

e-mail: reissg@hhu.de

Theophylline and caffeine are natural products and belong to the class of methylxanthines. Both compounds have been isolated more than 130 years ago. These compounds belong to the so-called legacy drugs. In the case of theophylline also a limited clinical therapeutic use is reported.

The reaction of xanthines (systematic name: 3,7-dihydro-1*H*-purine-2,6-dione; **Figure 1a**) with strong acids yield the corresponding salts. The methylxanthines caffeine and theophylline can be protonated at the 5-membered ring of the 3,7-dihydro-1*H*-purine-2,6-dione moiety. Methylxanthinium cations are connected in such salts by NH $\cdots$ O hydrogen bonds to form two- and three dimensional frameworks. In the case of a two dimensional hydrogen bonded framework the counteranions like polyiodides are intercalated between neighboring cationic layers (**Figure 1b**). In the case of three dimensional frameworks short chain polyiodides as well as polymers can be obtained. In several cases the weak and medium strong interactions between the host framework and the complex polyiodide counteranions show a geometrical fit, which is called dimensional caging [2].



**Figure 1.** (a) Substitution scheme of the xanthines.

Caffeine:  $R^1, R^2, R^3 = \text{methyl}$ ; Theophylline:  $R^1, R^2 = \text{methyl}, R^3 = \text{H}$ .

(b) The layered structure of hydrogen bonded theophyllinium cations with the counter polyiodide anions fitting with the hydrogen-bonding motif.

[1] G. J. Reiss, *Z. Kristallogr. N. Cryst. Struct.* **234** (2019) 737

[2] P. H. Svensson, *et al.*, *Inorg. Chem.* **47** (2008) 11464.

## КОМПРЕСИЈА И ТЕРМИЧКА ЕКСПАНЗИЈА ОРГАНСКИХ МОЛЕКУЛА ИЗУЧАВАНА ДИФРАКЦИЈОМ ПОЛИКРИСТАЛНИХ УЗОРАКА НА СИНХРОТРОНУ

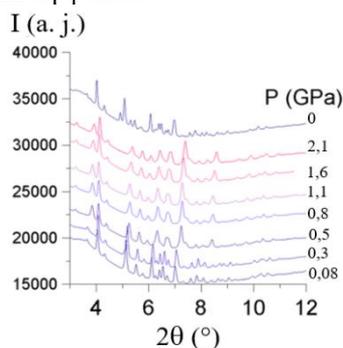
Ivo B. Rietveld <sup>a,b</sup>  <https://orcid.org/0000-0001-5987-3998>,  
Gabin Gbabode <sup>a</sup>, Kangli Li <sup>a</sup>, Béatrice Nicolai <sup>b</sup>

<sup>a</sup> Université Rouen Normandie, Normandie Université, Rouen, France; <sup>b</sup> Faculté de pharmacie, Université Paris Cité, Paris, France  
имејл: ivo.rietveld@univ-rouen.fr

Да би се разумеле фазне трансформације активних фармацеутских састојака, фазни дијаграми притисак–температура конструишу се уз помоћ дифракционих података добијених на различитим притисцима и температурама. Дифракциони подаци не само да указију на фазне промене, уколико до њих дође, већ такође обезбеђују податке за изучавање компресије и термичке експанзије. Ове информације могу да се користе у Клапејроновој једначини за израчунавање положаја фазне равнотеже у  $P$ – $T$  равни, што омогућава процену да ли се очекује да ће фазни прелази бити проблематични за дати полиморф лека.

На **слици 1** су приказани дифрактограми етил естра L-тирозина који показују структурне промене између 300 и 500 МПа. Осим тога, ефекат компресије је јасно видљив кроз промене положаја дифракционих пикова са повећањем притиска.

Поред употребе података компресије и термичке експанзије за праћење фазне равнотеже, такви подаци су такође важни за валидацију симулираних структура. Међутим, за све ове примене потребно је тачно познавати температуру и притисак. Постоје методе као што су, на пример, праћење таласне дужине апсорпционог максимума рубина или мерења дифрактограма NaCl; међутим, ова мерења температуре и притиска развијена су за неорганске материјале који често могу да издрже много веће притиске од органских материјала. Стога, прецизност мерења температуре и притиска није нужно довољно добра и побољшање би било пожељно како би се такви подаци користили за калибрацију приликом рачунарског претпостављања кристалних структура. У овој презентацији биће приказани примери мерења етил-естра L-тирозина [1] и пиразинамида [2].



**Слика 1.** Дифрактограми етил естар L-тирозина: опажена фазна промена на 294 К у функцији притиска. [1]

[1] B. Nicolai, *et al.*, *PCCP* **20** (2018) 24074

[2] K. Li, *et al.*, *CrystEngComm* **24** (2022) 5041.

## COMPRESSION AND THERMAL EXPANSION OF ORGANIC MOLECULES BY SYNCHROTRON POWDER DIFFRACTION

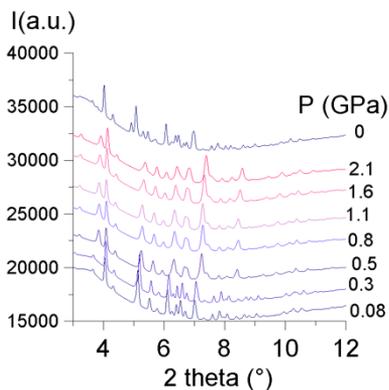
**Ivo B. Rietveld**<sup>a,b</sup>  <https://orcid.org/0000-0001-5987-3998>,  
**Gabin Gbabode**<sup>a</sup>, **Kangli Li**<sup>a</sup>, **Béatrice Nicolai**<sup>b</sup>

<sup>a</sup> *Université Rouen Normandie, Normandie Université, Rouen, France;* <sup>b</sup> *Faculté de pharmacie, Université Paris Cité, Paris France*  
e-mail: ivo.rietveld@univ-rouen.fr

To understand the phase behaviour of active pharmaceutical ingredients (APIs), pressure-temperature phase diagrams are constructed with the help of diffraction data as a function of pressure and temperature. Diffraction data not only demonstrate phase changes if they occur, but also provide the compression and the thermal expansion of the APIs. The latter information can be used in the Clapeyron equation to calculate the position of phase equilibria in the P-T plane, which allows evaluating whether phase transitions are expected to be problematic for a given drug polymorph.

In **Figure 1**, as an example, diffraction patterns of L-tyrosine ethyl ester demonstrate a structural change between 300 and 500 MPa. In addition, the effect of compression is clearly visible in the positions of the peaks going up in pressure.

Besides the use of compression and thermal expansion data for the Clapeyron equation to trace phase equilibria, such data is also important to validate simulated structures. However, for all these applications the temperature and pressure need to be accurately determined. Methods exist such as the wavelength of a ruby and the



diffraction patterns of NaCl for example; however, these temperature and pressure measurements have been developed for inorganic materials that can often withstand much higher pressures than organic materials. The precision in the temperature and pressure measurements is therefore not necessarily finegrained enough and improvement in precision would be welcome in order to use such data for benchmarking in BEST-CSP. Examples of measurements of L-tyrosine ethyl ester [1] and pyrazinamide [2] will be shown in the presentation.

[1] B. Nicolai, *et al.*, *PCCP* **20** (2018) 24074

[2] K. Li, *et al.*, *CrystEngComm* **24** (2022) 5041.

## КОМПЛЕКСНА ЈЕДИЊЕЊА ЦИНКА СА ДЕРИВАТИМА ПИКОЛИНСКЕ КИСЕЛИНЕ

**Mišel Hozjan** <sup>a</sup>  <https://orcid.org/0000-0002-9387-6903>,  
**Franc Perdih** <sup>a</sup>  <https://orcid.org/0000-0002-8416-7291>

<sup>a</sup> Факултет за хемију и хемијску технологију, Универзитет у Љубљани, Љубљана, Словенија

имејл: Misel.Hozjan@fkkt.uni-lj.si

За исправно функционисање људског организма неопходно је око двадесет хемијских елемената, а половина ових елемената су метали. Један од најважнијих је цинк, који има кључну улогу у формирању ДНК, расту ћелија, изградњи протеина, лечењу оштећеног ткива и очувању имуног система [1]. Осим тога, цинк је важан и за складиштење инсулина и лучење транспортера глукозе типа 4 (GLUT 4). Зато се цинк и његова једињења изучавају због добрих антидијабетских својстава. Резултати показују да начин на који је  $Zn^{2+}$  везан у једињењу одређује корисна својства тог једињења. Одличан начин да се унапреди ефикасност у антидијабетским тестовима је формирање комплекса метала са лигандима. Главна предност комплексних једињења је што омогућавају фино подешавање својстава као што су: биолошка активност, стабилност, те боља могућност апсорпције, специфичност и токсичност. Комплекси цинка са пиколинском киселином (пиридин-2-карбоксилном киселином) и њеним дериватима показали су се обећавајућим у погледу инсулин-миметичке активности. Стога смо проширили истраживања на блиске аналоге дипиколинске киселине (пиридин-2,6-дикарбоксилне киселине) и њених деривата [2].

Успешно смо изоловали комплексе  $Zn(II)$  са аминским дериватима пиколинске киселине користећи  $ZnCl_2$ ,  $Zn(OAc)_2$  и  $ZnSO_4$  као полазне соли. У свим добијеним комплексним једињењима атом цинка је смештен у октаедарско окружење два молекула лиганда.

[1] C. I. Chukwuma, *et al.*, *Pharmacol. Res.* **155** (2020) 104744

[2] T. Koleša-Dobravc, *et al.*, *New J. Chem.* **42(5)** (2018) 3619.

*Захвалница:* Захваљујемо се на финансијској подршци из гранта за младе истраживаче за Мишела Хозјана и програмског гранта П1-0175 Словеначке истраживачке агенције (ARRS). Захваљујемо се и на подршци Центра за истраживачку инфраструктуру Универзитета у Љубљани, Факултета за хемију и хемијску технологију, који је дио Мреже истраживачких и инфраструктурних центара UL (MRIC UL) и финансијски подржава Словенска истраживачка агенција (Инфраструктурни програм број И0-0022).

## ZINC COORDINATION COMPOUNDS WITH PICOLINIC ACID DERIVATIVES

**Mišel Hozjan**<sup>a</sup>  <https://orcid.org/0000-0002-9387-6903>,  
**Franc Perdih**<sup>a</sup>  <https://orcid.org/0000-0002-8416-7291>

<sup>a</sup> Faculty of Chemistry and Chemical Technology, University of Ljubljana, Ljubljana, Slovenia

e-mail: Misel.Hozjan@fkkt.uni-lj.si

About twenty elements appear to be essential for the proper functioning of the human body, half of which are metals and the other half non-metals. One of the most important metals confirmed is zinc. It is a major player in the creation of DNA, growth of cells, building proteins, healing damaged tissue, and supporting a healthy immune system [1]. Zinc also plays an important role in insulin storage and promotes the secretion of glucose transporter type 4 (GLUT 4). For this reason, it has been extensively studied for its anti-diabetic properties. The results show that the form in which Zn<sup>2+</sup> is incorporated plays a crucial role in determining its beneficial properties. Complexation of the metal with ligands proves to be a great method to improve its efficacy in antidiabetic tests. The main advantage of coordination compounds compared to their inorganic counterparts is that they offer the possibility of fine-tuning the following properties: biological activity, stability to avoid degradation prior to absorption, specificity and toxicity. Zinc complexes with picolinic acid (pyridine-2-carboxylic acid) and its derivatives have shown promising insulin-mimetic activity. Therefore, we have extended our research to the close analogue dipicolinic acid (pyridine-2,6-dicarboxylic acid) and its derivatives [2].

We have successfully prepared Zn(II) complexes with amine derivatives of picolinic acid using ZnCl<sub>2</sub>, Zn(OAc)<sub>2</sub> and ZnSO<sub>4</sub> as a source of zinc. In each case, the Zn atoms are octahedrally coordinated by two ligand molecules.

- [1] C. I. Chukwuma, *et al.*, *Pharmacol. Res.* **155** (2020) 104744  
[2] T. Koleša-Dobravec, *et al.*, *New J. Chem.* **42(5)** (2018) 3619.

*Acknowledgement:* We are grateful for the financial support from the junior research grant for Mišel Hozjan and the program grant P1-0175 of the Slovenian Research Agency (ARRS). We also acknowledge the support of the Centre for Research Infrastructure at the University of Ljubljana, Faculty of Chemistry and Chemical Technology, which is part of the Network of Research and Infrastructural Centres UL (MRIC UL) and is financially supported by the Slovenian Research Agency (Infrastructure programme No. I0-0022).



**Постерска саопштења**

**Poster Presentations**

## СИНТЕЗА И КРИСТАЛНА СТРУКТУРА КОМПЛЕКСА ЗЛАТА(III) СА АЗАКОНАЗОЛОМ

**Тина П. Андрејевић**<sup>a</sup>  <https://orcid.org/0000-0002-9537-5926>,

**Марта Почкај**<sup>b</sup>  <https://orcid.org/0000-0002-6306-1631>,

**Невена Љ. Стевановић**<sup>a</sup>  <https://orcid.org/0000-0003-3261-478X>,

**Дарко П. Ашанин**<sup>b</sup>  <https://orcid.org/0000-0003-1098-400X>,

**Изток Турел**<sup>b</sup>  <https://orcid.org/0000-0001-6776-4062>,

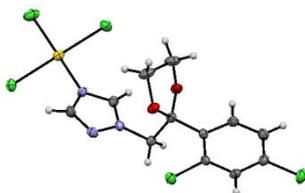
**Милош И. Ђуран**<sup>c</sup>  <https://orcid.org/0000-0003-2763-2852>,

**Биљана Ђ. Глишић**<sup>a</sup>  <https://orcid.org/0000-0002-6343-861>

<sup>a</sup> Универзитет у Крагујевцу, Природно-математички факултет, Крагујевац, Србија; <sup>b</sup> Универзитет у Љубљани, Факултет за хемију и хемијску технологију, Љубљана, Словенија; <sup>c</sup> Институт за информационе технологије, Србија; <sup>e</sup> Српска академија наука и уметности, Београд, Србија  
имејл: tina.andrejević@pmf.kg.ac.rs

Синтетисан је нови мононуклеарни комплекса злата(III) са азаконазолом (acz), [AuCl<sub>3</sub>(acz-N)] (Слика 1). Комплекс је добијен у реакцији еквимоларних количина K[AuCl<sub>4</sub>] и азаконазола у етанолу уз рефлукс. Комплекс [AuCl<sub>3</sub>(acz-N)] окарактерисан је применом спектроскопских и електрохемијских метода, док је његова кристална структура одређена помоћу рендгенске структурне анализе. У овом комплексу, азаконазол је монодентатно координован за Au(III)-јон преко атома азота триазоловог прстена, док су за преостала координациона места квадратно-планарног комплекса координовани хлоридо-лиганди [1].

Кристаллографски подаци: ромбични систем, просторна група *Pbca*,  $a = 7,2057(2)$ ,  $b = 15,6494(5)$ ,  $c = 30,7519(11)$  Å,  $V = 3467,73$  Å<sup>3</sup>,  $Z = 8$ ,  $R_{\text{int}} = 3,3\%$ .



**Слика 1.** Кристална структура комплекса [AuCl<sub>3</sub>(acz-N)]. Термални елипсоиди су дати са 50% вероватноће.

[1] N. Lj. Stevanović, M. Počkaj, S. Matić, D. Baskić, I. Turel, M. I. Djuran, B. Ђ. Glišić, *Manuscript in preparation*.

*Захвалница:* Ово истраживање је подржано од стране Министарства за науку, технолошког развоја и иновација Републике Србије (Уговор бр. 451-03-65/2024-03/200122, 451-03-66/2024-03/200122 и 451-03-66/2024-03/200378) и Словеначке истраживачке агенције (grant P1-0175).

## SYNTHESIS AND CRYSTAL STRUCTURE OF GOLD(III) COMPLEX WITH AZACONAZOLE

**Tina Andrejević**<sup>a</sup>  <https://orcid.org/0000-0002-9537-5926>,

**Marta Počkaj**<sup>b</sup>  <https://orcid.org/0000-0002-6306-1631>,

**Nevena Stevanović**<sup>a</sup>  <https://orcid.org/0000-0003-3261-478X>,

**Darko Ašanin**<sup>c</sup>  <https://orcid.org/0000-0003-1098-400X>,

**Iztok Turel**<sup>b</sup>  <https://orcid.org/0000-0001-6776-4062>,

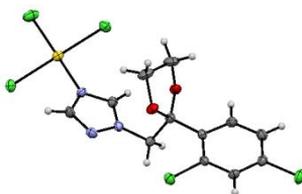
**Miloš Djuran**<sup>d</sup>  <https://orcid.org/0000-0003-2763-2852>,

**Biljana Glišić**<sup>a</sup>  <https://orcid.org/0000-0002-6343-861>

<sup>a</sup> University of Kragujevac, Faculty of Science, Kragujevac, Serbia; <sup>b</sup> University of Ljubljana, Faculty of Chemistry and Chemical Technology, Ljubljana, Slovenia; <sup>c</sup> University of Kragujevac, Institute for Information Technologies, Kragujevac, Serbia; <sup>d</sup> Serbian Academy of Sciences and Arts, Belgrade, Serbia  
e-mail: tina.andrejević@pmf.kg.ac.rs

A new mononuclear gold(III) complex with azaconazole (acz), [AuCl<sub>3</sub>(acz-*N*)] (Figure 1), was synthesized. The complex was obtained from the reaction of K[AuCl<sub>4</sub>] with an equimolar amount of azaconazole in ethanol under reflux. [AuCl<sub>3</sub>(acz-*N*)] complex was characterized by spectroscopic and electrochemical methods, while its crystal structure was determined by single crystal X-ray diffraction analysis. In this complex, azaconazole is a monodentate ligand coordinated to the Au(III) ion *via* the triazole nitrogen atom, while the remaining coordination sites are occupied by chloride anions leading to a square-planar arrangement [1].

Crystal data: orthorhombic crystal system, space group *Pbca*,  $a = 7.2057(2)$ ,  $b = 15.6494(5)$ ,  $c = 30.7519(11)$  Å,  $V = 3467.73$  Å<sup>3</sup>,  $Z = 8$ ,  $R_{\text{int}} = 3.3\%$ .



**Figure 1.** The crystal structure of [AuCl<sub>3</sub>(acz-*N*)] complex. Thermal ellipsoids are drawn at 50% probability level.

[1] N. Lj. Stevanović, M. Počkaj, S. Matić, D. Baskić, I. Turel, M. I. Djuran, B. Đ. Glišić, *Manuscript in preparation*.

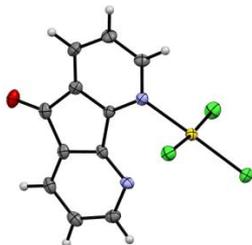
*Acknowledgments:* This research was supported by the Ministry of Science, Technological Development and Innovation of the Republic of Serbia (Agreements No. 451-03-65/2024-03/200122, 451-03-66/2024-03/200122 and 451-03-66/2024-03/200378) and by the Slovenian Research Agency (grant P1-0175).

## КРИСТАЛНА СТРУКТУРА КОМПЛЕКСА ЗЛАТА(III) СА 4,5-ДИАЗАФЛУОРЕН-9-ОНОМ

**Тина П. Андрејевић**<sup>a</sup>  <https://orcid.org/0000-0002-9537-5926>,  
**Бојана В. Пантовић**<sup>a</sup>  <https://orcid.org/0000-0003-1997-625X>,  
**Јакоб Кљун**<sup>b</sup>  <https://orcid.org/0000-0002-1986-4840>,  
**Дарко П. Ашанин**<sup>b</sup>  <https://orcid.org/0000-0003-1098-400X>,  
**Изток Турел**<sup>b</sup>  <https://orcid.org/0000-0001-6776-4062>,  
**Милош И. Ђуран**<sup>c</sup>  <https://orcid.org/0000-0003-2763-2852>,  
**Биљана Ђ. Глишић**<sup>a</sup>  <https://orcid.org/0000-0002-6343-8611>

<sup>a</sup> Универзитет у Крагујевцу, Природно-математички факултет, Крагујевац, Србија; <sup>b</sup> Универзитет у Љубљани, Факултет за хемију и хемијску технологију, Љубљана, Словенија; <sup>c</sup> Институт за информационе технологије, Крагујевац, Србија; <sup>2</sup> Српска академија наука и уметности, Кнез Михаилова, Београд, Србија  
имејл: tina.andrejevic@pmf.kg.ac.rs

У овом раду синтетисан је нови комплекс злата(III) са 4,5-диазафлуорен-9-оном (dafone). Добијени комплекс злата(III),  $[\text{AuCl}_3(\text{dafone-}N)]$  (Слика 1), је окарактерисан помоћу спектроскопских (IR,  $^1\text{H}$  и  $^{13}\text{C}$  NMR) и електрохемијских (CV) метода, док је његова кристална структура одређена применом рендгенске структурне анализе. У овом комплексу, dafone лиганд је монодентатно координован за  $\text{Au(III)}$  јон преко једног атома азота, док остала координациона места заузимају три хлоридо лиганда. Геометрија добијеног комплекса је квадратно-планарна, а комплекс кристалише у просторној групи  $P2_1/c$ ,  $a = 7,1957(3)$  Å,  $b = 14,5267(8)$  Å,  $c = 12,4868(6)$  Å,  $\alpha = 90^\circ$ ,  $\beta = 92,237(5)^\circ$ ,  $\gamma = 90^\circ$ ,  $V = 1304,25$  Å<sup>3</sup>,  $Z = 2$ ,  $R_{\text{int}} = 2,31\%$ .



**Слика 1.** Кристална структура  $[\text{AuCl}_3(\text{dafone-}N)]$  комплекса. Термални елипсоиди су дати са 50% вероватноће).

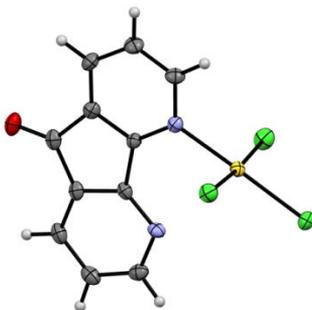
*Захвалница:* Ово истраживање је подржано од стране Министарства за науку, технолошког развоја и иновација Републике Србије (Уговор бр. 451-03-65/2024-03/200122, 451-03-66/2024-03/200122 и 451-03-66/2024-03/200378) и Словеначке истраживачке агенције (grant P1-0175).

## CRYSTAL STRUCTURE OF GOLD(III) COMPLEX WITH 4,5-DIAZAFLUOREN-9-ONE

**Tina P. Andrejević**<sup>a</sup>  <https://orcid.org/0000-0002-9537-5926>,  
**Bojana V. Pantović**<sup>a</sup>  <https://orcid.org/0000-0003-1997-625X>,  
**Jakob Kljun**<sup>b</sup>  <https://orcid.org/0000-0002-1986-4840>,  
**Darko P. Ašanin**<sup>c</sup>  <https://orcid.org/0000-0003-1098-400X>,  
**Iztok Turel**<sup>b</sup>  <https://orcid.org/0000-0001-6776-4062>,  
**Miloš I. Djuran**<sup>d</sup>  <https://orcid.org/0000-0003-2763-2852>,  
**Biljana Đ. Glišić**<sup>a</sup>  <https://orcid.org/0000-0002-6343-8611>

<sup>a</sup> University of Kragujevac, Faculty of Science, Kragujevac, Serbia; <sup>b</sup> University of Ljubljana, Faculty of Chemistry and Chemical Technology, Ljubljana, Slovenia; <sup>c</sup> Institute for Information Technologies, Kragujevac, Serbia; <sup>d</sup> Serbian Academy of Sciences and Arts, Belgrade, Serbia  
e-mail: tina.andrejević@pmf.kg.ac.rs

In this study, we synthesized new gold(III) complex with 4,5-diazafluoren-9-one (dafone). The obtained gold(III) complex,  $[\text{AuCl}_3(\text{dafone-}N)]$  (**Figure 1**), was characterized by spectroscopic (IR,  $^1\text{H}$  and  $^{13}\text{C}$  NMR) and electrochemical (CV) methods, while its crystal structure was determined by single-crystal X-ray diffraction analysis. In this complex, dafone is monodentate ligand coordinated to the Au(III) ion through one nitrogen atom, while the remaining coordination sites are occupied by three chlorido ligands. The geometry of the complex is square-planar, and the complex crystallizes in the  $P2_1/c$  space group,  $a = 7.1957(3)$  Å,  $b = 14.5267(8)$  Å,  $c = 12.4868(6)$  Å,  $\alpha = 90^\circ$ ,  $\beta = 92.237(5)^\circ$ ,  $\gamma = 90^\circ$ ,  $V = 1304.25$  Å<sup>3</sup>,  $Z = 2$ ,  $R_{int} = 2.31\%$ .



**Figure 1.** Crystal structure of  $[\text{AuCl}_3(\text{dafone-}N)]$  complex. Thermal ellipsoids are drawn at 50% probability level).

*Acknowledgement:* This research has been financially supported by the Ministry of Science, Technological Development and Innovation of the Republic of Serbia (Agreements No. 451-03-65/2024-03/200122, 451-03-66/2024-03/200122 and 451-03-66/2024-03/200378) and by the Slovenian Research Agency (grant P1-0175).

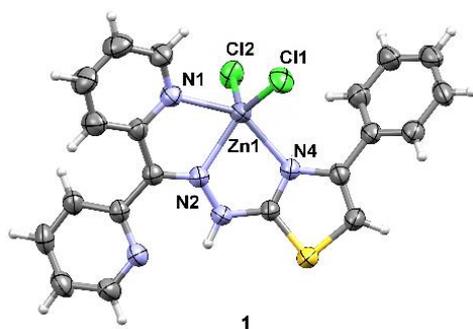
## МОЛЕКУЛСКА И КРИСТАЛНА СТРУКТУРА КОМПЛЕКСА Zn(II) СА ХИДРАЗОНИЛ-ТИАЗОЛСКИМ ЛИГАНДОМ

**Јована Арашков**<sup>a</sup>  <https://orcid.org/0000-0001-5352-7752>,  
**Александар Вишњевац**<sup>b</sup>  <https://orcid.org/0000-0002-4382-6908>,  
**Тамара Тодоровић**<sup>a</sup> <https://orcid.org/0000-0002-7740-3639>,  
**Ненад Филиповић**<sup>a</sup>  <https://orcid.org/0000-0003-2982-5324>

<sup>a</sup> Универзитет у Београду – Хемијски факултет, Београд, Србија; <sup>b</sup> Институт Руђер Бошковић, Загреб, Хрватска; <sup>c</sup> Универзитет у Београду – Пољопривредни факултет, Београд, Србија

имејл: araskovj@chem.bg.ac.rs

У овом раду је представљена синтеза и карактеризација два комплекса Zn(II) са хидразонил-тиазолским лигандом 2-(дипиридин-2-илметил)хидразонил)-4-(4-фенил)-1,3-тиазолом (HL). Комплекси су синтетисани директним реакцијама лиганда HL и одговарајућих соли (ZnCl<sub>2</sub> и Zn(NO<sub>3</sub>)<sub>2</sub>·4H<sub>2</sub>O). Комплекси су добијени у облику монокристала и структура им је решена применом рендгенске структурне анализе. Комплекс [Zn(HL)Cl<sub>2</sub>] (**1**; **Слика 1**) кристалише у орторомбичној *Pna*2<sub>1</sub> просторној групи. Молекулску структуру комплекса **1** чине централни јон метала, један HL лиганд координован *NNN* тридентатно преко пиридинског, иминског и тиазоловог атома азота као и два хлоридна ањона. Геометрија око јона Zn(II) се може описати као веома дисторзирана квадратно-пирамидална са индексом дисторзије  $\tau_5 = 0,29$ . Октаедраски комплекс [Zn(HL)(NO<sub>3</sub>)<sub>2</sub>] (**2**; **Слика 2**) кристалише у моноклиничној *P2*<sub>1</sub> просторној групи. Код комплекса **2** за централни јон метала координован је један лиганд на исти начин као и код комплекса **1**, као и два нитратна ањона који су различито координовани – монодентатно и бидентатно. Урађена је детаљна анализа типова и енергијске дистрибуције интермолекулских интеракција.



**Слика 1.** ORTEP приказ молекулске структуре комплекса **1**. Термални елипсоиди су приказани са 50 % вероватноће.

**Figure 1.** ORTEP drawing of molecular structure of **1**. Thermal ellipsoids are shown at 50 % of probability level.

## MOLECULAR AND CRYSTAL STRUCTURES OF Zn(II) COMPLEXES WITH HYDRAZONYL-THIAZOLE LIGAND

**Jovana Araškov**<sup>a</sup>  <https://orcid.org/0000-0001-5352-7752>,

**Aleksandar Višnjevac**<sup>b</sup>  <https://orcid.org/0000-0002-4382-6908>,

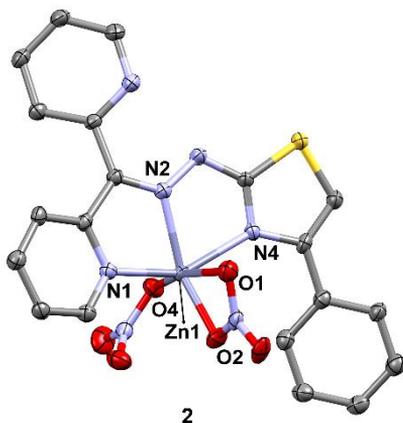
**Tamara Todorović**<sup>a</sup>  <https://orcid.org/0000-0002-7740-3639>,

**Nenad Filipović**<sup>c</sup>  <https://orcid.org/0000-0003-2982-5324>

<sup>a</sup> University of Belgrade – Faculty of Chemistry, Belgrade, Serbia; <sup>b</sup> Institute Ruđer Bošković, Zagreb, Croatia; <sup>c</sup> University of Belgrade – Faculty of Agriculture, Belgrade, Zemun, Serbia.

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

In this study we report synthesis and characterization of two Zn(II) complexes with hydrazonyl-thiazole-based ligand 2-(dipyridine-2-ylmethylene)hydrazonyl)-4-(4-phenyl)-1,3-thiazole (HL). Complexes were synthesized by a direct reaction of the ligand with the corresponding salts (ZnCl<sub>2</sub> and Zn(NO<sub>3</sub>)<sub>2</sub>·4H<sub>2</sub>O). Complex [Zn(HL)Cl<sub>2</sub>] (**1**; **Figure 1**) crystallizes in orthorhombic *Pna*2<sub>1</sub> space group. Molecular structure contains central metal ion, one *NNN* tridentately coordinated ligand *via* pyridine, imine and thiazole nitrogen atoms and two coordinated chloride anions. The geometry around Zn(II) is distorted square pyramidal with the geometric index of distortion  $\tau_5 = 0.29$ . Octahedral complex [Zn(HL)(NO<sub>3</sub>)<sub>2</sub>] (**2**; **Figure 2**) crystallizes in monoclinic *P*2<sub>1</sub> space group. In the complex **2**, the single ligand is coordinated to the central metal ion in the same way as in **1**, along with two differently coordinated nitrate anions – monodentate and bidentate coordination mode. A detailed analysis of the types and energy distribution of intermolecular interactions was performed.



**Слика 2.** ORTEP приказ молекуларске структуре комплекса **2**. Термални елипсоиди су приказани са 50 % вероватноће. Атоми водоника су изостављени због преледности.

**Figure 2.** ORTEP drawing of molecular structure of **2**. Thermal ellipsoids are shown at 50 % of probability level. Hydrogen atoms are omitted for clarity.

## СИНТЕЗА И КРИСТАЛНА СТРУКТУРА ДЕРИВАТА ХИНУКЛИДИНОНА

**Милица Г. Богдановић**<sup>a</sup>  <https://orcid.org/0000-0001-7122-6929>,

**Видак Н. Раичевић**<sup>b</sup>  <https://orcid.org/0000-0002-3858-4350>,

**Maik Wyshusek**<sup>b</sup>  <https://orcid.org/0009-0009-9781-5663>,

**Ема В. Беговић**<sup>a</sup>, **Вања С. Николић**<sup>a</sup>, **Ивана Д. Пештерић**<sup>a</sup>, **Сандра З. Шереш**<sup>a</sup>

**Марко В. Родић**<sup>a</sup>  <https://orcid.org/0000-0002-4471-8001>

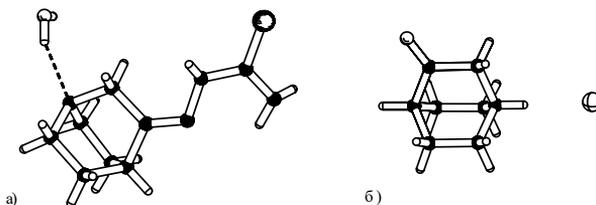
<sup>a</sup> Универзитет у Новом Саду, Природно-математички факултет, Нови Сад, Србија; <sup>b</sup> Универзитет у Новом Саду, Медицински факултет, Нови Сад, Србија, <sup>c</sup> Institut für Bioanorganische Chemie, Heinrich-Heine-Universität Düsseldorf, Düsseldorf, Germany

имејл: milica.bogdanovic@dh.uns.ac.rs

Последњих година, хемија хетероцикличних једињења је добила пажњу због фармаколошког значаја, а посебно једињења која садрже азот у својој структури. Нарочито су истраживани деривати хинуклидинон-тиазола, укључујући тиосемикарбазон хинуклидинона, а испитана је и њихова биолошка активност [1]. Међутим, карактеризација ових једињења остала је непотпуна, па тако тиосемикарбазон хинуклидинона није структурно окарактерисан.

Пратећи процедуру синтезе [1], изолован је хидрат тиосемикарбазон хинуклидинона (**1**). Једињење **1** кристалише у орторомбичној  $P2_12_12_1$  просторној групи, а асиметрична јединица састоји се од једног органског молекула и једног молекула воде (Слика 1а). Молекул воде се понаша и као донор и као акцептор водоничне везе, при чему се успоставља интермолекулска водонична веза са два молекула тиосемикарбазон хинуклидинона преко азотовог атома хинуклидинског прстена и хидразинског атома азота.

Додатно, приликом синтезе добијени су безбојни, плочасти кристали полазног једињења, хинуклидинон-хидрохлорида (**2**), погодни за структурну анализу. Једињење **2** кристалише у орторомбичној  $Pnma$  просторној групи при чему се молекулски катјон и хлоридни анјон налазе на специјалном положају ( $m$ ) (Слика 1б).



Слика 1. Молекулске структуре **1** (а) и **2** (б).

[1] Łączkowski, *et al.*, *Med. Chem. Res.* **26** (2017) 2088.

*Захвалница:* Истраживања је подржало Министарство науке, технолошког развоја и иновација Републике Србије (Ев. бр. 451-03-66/2024-03/200125 и 451-03-65/2024-03/200125) и немачко-српски билатерални пројекат: Примена квантно-кристалографских метода у проширеној рутинској рендгенској структурној анализи малих молекула (Ев. бр. 337-00-253/2023-05/12).

## SYNTHESIS AND CRYSTAL STRUCTURE OF QUINUCLIDINONE DERIVATES

**Milica G. Bogdanović**<sup>a</sup>  <https://orcid.org/0000-0001-7122-6929>,

**Vidak N. Raičević**<sup>b</sup>  <https://orcid.org/0000-0002-3858-4350>,

**Maik Wyshusek**<sup>c</sup>  <https://orcid.org/0009-0009-9781-5663>,

**Ema V. Begović**<sup>a</sup>, **Vanja S. Nikolić**<sup>a</sup>, **Ivana D. Pešterić**<sup>a</sup>, **Szandra Z. Seres**<sup>a</sup>,

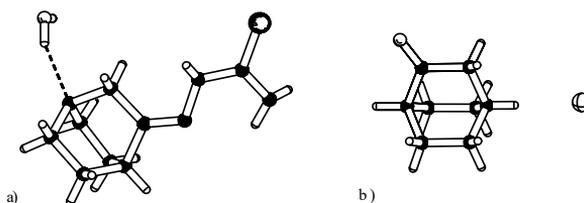
**Marko V. Rodić**<sup>a</sup>  <https://orcid.org/0000-0002-4471-8001>

<sup>a</sup> University of Novi Sad, Faculty of Sciences, Novi Sad, Serbia; <sup>b</sup> University of Novi Sad, Faculty of Medicine, Novi Sad, Serbia; <sup>c</sup> Institut für Bioanorganische Chemie, Heinrich-Heine-Universität Düsseldorf, Düsseldorf, Germany  
e-mail: milica.bogdanovic@dh.uns.ac.rs

In recent years, the chemistry of heterocyclic compounds has received attention due to their pharmacological significance, which is particularly true for nitrogen-containing structures. Derivatives of quinuclidinone thiazole, including quinuclidine thiosemicarbazone, have been investigated, and their biological properties evaluated [1]. However, the characterization of these compounds remains incomplete, especially for quinuclidine thiosemicarbazone, which has not been structurally characterized.

Following the synthesis procedure [1], the hydrate of the quinuclidine thiosemicarbazone (**1**) was isolated. The compound **1** crystallizes in the orthorhombic  $P2_12_12_1$  space group with an asymmetric unit consisting of one organic molecule and one water molecule (**Figure 1a**). The water molecule acts both as a donor and as an acceptor of hydrogen bonds, establishing intermolecular hydrogen bonds with two quinuclidine thiosemicarbazone molecules *via* the nitrogen atom of the quinuclidine ring and the hydrazine nitrogen.

Additionally, during the synthesis, colorless, plate-shaped crystals of the starting compound, quinuclidinone hydrochloride (**2**), suitable for X-ray analysis, were obtained. This compound crystallizes in the orthorhombic  $Pnma$  space group, where the cation and anion are positioned on a mirror plane so that within the asymmetric unit, only half of them are represented (**Figure 1b**).



**Figure 1.** Molecular structures of **1** (a) and **2** (b).

[1] Łączkowski, *et al.*, *Med. Chem. Res.* **26** (2017) 2088.

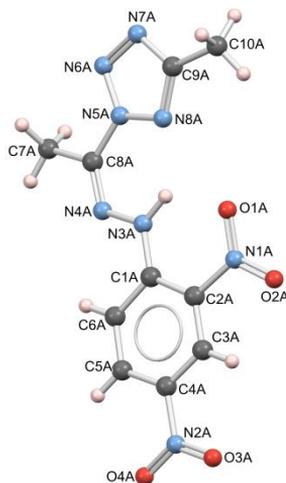
*Acknowledgement:* This research was supported by the Ministry of Science, Technological Development and Innovation of the Republic of Serbia (Grants No. 451-03-66/2024-03/ 200125 & 451-03-65/2024-03/200125) and German–Serbian joint scientific co-operation project: Application of quantum-crystallographic methods in extended routine X-ray structural analysis of small molecules (Grant No. 337-00-253/2023-05/12).

## КРИСТАЛОГРАФСKE И РАЧУНАРСKE СТУДИЈЕ НОВОГ ХИДРАЗОНО-ТЕТРАЗОЛА

**Љубица Брењо** <sup>a</sup>  <https://orcid.org/0000-0002-3217-625X>,  
**Оливера Клисурић** <sup>a</sup>  <https://orcid.org/0000-0003-0524-8139>,  
**Александар Окљеша** <sup>a</sup>  <http://orcid.org/0000-0003-2336-6155>

<sup>a</sup> Природно-математички факултет, Универзитет у Новом Саду, Нови Сад, Србија  
 имејл: ljubica.brenjo@dh.uns.ac.rs

Деривати тетразола испољавају бројне биолошке активности, што тетразолски прстен чини важном фармакофором присутном у активним компонентама савремених лејекова [1]. У нашем претходном раду [2] описали смо синтезу два нова једињења тетразола са идејом да комбинујемо тетразолске структуре са ароматичним језгром које садржи два електрон-акцепторска (ЕА) супституента, јер најпотентнији чисти антиандрогени, као што су флутамид и његови аналози, садрже два ЕА-супституента на ароматичном фрагменту. Понављањем синтезе два позната тетразола [2] на већој скали, уз коришћење другог растварача и продужено реакционо време, поред споменутих једињења, изолован је и нови хидразоно-тетразолски дериват (*Z*)-2-(1-(2-(2,4-динитрофенил)хидразоно)етил)-5-метил-2*H*-тетразол (**1**). Рендгенска структурна анализа је показала да једињење **1** кристалише у ромбичном систему у просторној групи *Fdd2* са два молекула (А и Б) у асиметричној јединици (Слика 1 због јасноће приказује само А молекул), и дала следеће кристалографске податке:  $C_{20}H_{20}N_{16}O_8$ ,  $a = 13,2773(11)$ ,  $b = 38,229(3)$ ,  $c = 21,9357(12)$  Å,  $V = 11133,9(13)$  Å<sup>3</sup>,  $Z = 16$ ,  $\mu = 0,12$  mm<sup>-1</sup>. Коначна вредност *R* фактора је 5,8% за 5771 независних рефлексија и 409 параметара. Анализа Хиршфелдове површине показала је да су најјаче привлачне интеракције између *para*-нитро-групе и ароматичних водоникових атома, те између азота и метил-групе који припадају тетразолском прстену.



Слика 1. Молекулска структура једињења **1**.

- [1] V. A. Ostrovskii, *et al.*, *Russ. Chem. Bull., Int. Ed.* **61** (2012) 768  
 [2] A. M. Oklješa, O. R. Klisurić, *J. Mol. Struc.* **1226** (2021) 129341.

Захвалница: Истраживања је финансирао Министарство науке, технолошког развоја и иновација Републике Србије (Ев. бр. 451-03-66/2024-03/200125 и 451-03-65/2024-03/200125).

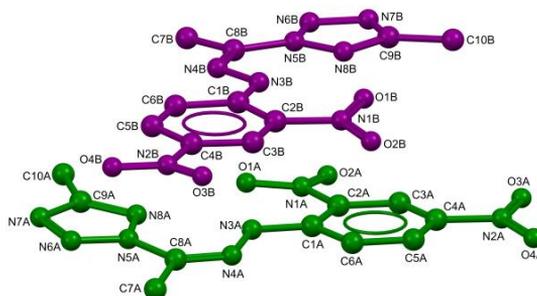
## CRYSTALLOGRAPHIC AND COMPUTATIONAL STUDIES OF A NEW HYDRAZONO TETRAZOLE COMPOUND

**Ljubica Brenjo**<sup>a</sup>  <https://orcid.org/0000-0002-3217-625X>,  
**Olivera Klisurić**<sup>a</sup>  <https://orcid.org/0000-0003-0524-8139>,  
**Aleksandar Oklješa**<sup>a</sup>  <http://orcid.org/0000-0003-2336-6155>

<sup>a</sup> Faculty of Sciences, University of Novi Sad, Novi Sad, Serbia  
 e-mail: ljubica.brenjo@dh.uns.ac.rs

Tetrazole derivatives express diverse biological activities, which makes the tetrazole ring an important scaffold present in various active pharmaceutical ingredients of modern drugs [1]. In our previous work, we reported the synthesis of two new tetrazole compounds [2] with the underlying idea of combining the tetrazole moiety with an aromatic ring containing electron-withdrawing (EW) substituents, as the most potent pure antiandrogens, such as flutamide and its analogues, contain two EW substituents on the aromatic fragment of their structure. By repeating the synthesis of the two reported tetrazoles [2] on a larger scale, and in slightly different conditions, such as using another solvent and prolonging the reaction time, besides the aforementioned compounds [2], the new (*Z*)-2-(1-(2-(2,4-dinitrophenyl)hydrazono)ethyl)-5-methyl-2*H*-tetrazole (**1**) was isolated. X-ray diffraction analysis revealed that compound **1** crystallizes in the orthorhombic crystal system, space group *Fdd2*, with two symmetrically independent

neutral molecules in the asymmetric unit (**Figure 2**). Crystallographic data for compound **1**: C<sub>20</sub>H<sub>20</sub>N<sub>16</sub>O<sub>8</sub>, *a* = 13.2773(11), *b* = 38.229(3), *c* = 21.9357(12) Å, *V* = 11133.9(13) Å<sup>3</sup>, *Z* = 16,  $\mu$  = 0.12 mm<sup>-1</sup>. The final *R* factor is 5.8% for 5771 independent reflections and 409 parameters. Hirshfeld surface analysis showed that the strongest attractive interactions are between the *p*-nitro group and aromatic hydrogen atoms, and between a nitrogen and the methyl group of the tetrazole ring.



- [1] V. A. Ostrovskii, *et al.*, *Russ. Chem. Bull., Int. Ed.* **61** (2012) 768  
 [2] A. M. Oklješa, O. R. Klisurić, *J. Mol. Struc.* **1226** (2021) 129341.

*Acknowledgement:* The authors gratefully acknowledge the financial support of the Ministry of Science, Technological Development and Innovation of the Republic of Serbia (Grants No. 451-03-66/2024-03/ 200125 & 451-03-65/2024-03/200125).

## УТИЦАЈ СУПСТИТУЕНАТА НА ОСЕТЉИВОСТ ВИСОКОЕНЕРГЕТСКИХ НИТРОАРОМАТИЧНИХ МОЛЕКУЛА

**Ивана С. Вељковић**<sup>a</sup>  <https://orcid.org/0000-0003-0584-4053>,

**Данијела С. Кретић**<sup>b</sup>  <https://orcid.org/0000-0002-8695-3958>,

**Душан Ж. Вељковић**<sup>b</sup>  <https://orcid.org/0000-0002-1382-8785>

<sup>a</sup> Универзитет у Београду – Институт за хемију, технологију и металургију – Институт од националног значаја за Републику Србију, Београд, Србија;

<sup>b</sup> Универзитет у Београду – Хемијски факултет, Београд, Србија

имејл: ivana.veljkovic@ihtm.bg.ac.rs

Осетљивост високоенергетских молекула ка детонацији зависи од већег броја молекулских и кристалних фактора као што су слободан простор у кристалној решетци, максимална топлота детонације, позитиван електростатички потенцијал и нековалентно везивање [1]. Ова листа фактора није коначна, с обзиром да детонација представља низ сложених, међузависних процеса. У случају нитроароматичних молекула, детонација почиње дисоцијацијом C–NO<sub>2</sub> везе која је углавном најслабија веза у молекулу. У овом раду смо комбиновали резултате анализе кристалних структура са резултатима квантнохемијских прорачуна у циљу испитивања утицаја природе и величине суседних супституената на јачину C–NO<sub>2</sub> везе и осетљивост нитроароматичних молекула према детонацији.

Кембричка база структурних података (CSD) је претражена и издвојене су све структуре које садрже тринитроароматичне фрагменте. Супституенти у суседству нитро-група су анализирани у погледу природе, величине и образаца нековалентног везивања. Проучавани су углови између равни ароматичних прстенова и нитро-група јер је познато да одступање нитро-група од равни ароматичног прстена доводи до слабења C–NO<sub>2</sub> везе и повећања осетљивости ка детонацији. Резултати анализе геометријских параметара су упоређени са резултатима *ab initio* прорачуна. Резултати анализе геометријских параметара су показали да супституенти могу утицати на јачину C–NO<sub>2</sub> везе на два основна начина: формирањем нековалентних интеракција са нитро-групом и искретањем нитро-групе услед стерних одбијања и величине супституената. Резултати ове анализе могу бити од великог значаја за дизајнирање нових типова високоенергетских молекула са умереном осетљивошћу ка детонацији.

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

*Захвалница:* Овај рад је подржан од стране Фонда за науку Републике Србије, ПРОМИС, #6066886, CD-HEM. Овај рад је подржан од стране Министарства науке, технолошког развоја и иновација Републике Србије (Број уговора: 451-03-66/2024-03/200168 и 451-03-66/2024-03/200026).

## INFLUENCE OF THE SUBSTITUENTS ON THE SENSITIVITY OF HIGH-ENERGY NITROAROMATIC MOLECULES

**Ivana S. Veljković**<sup>a</sup>  <https://orcid.org/0000-0003-0584-4053>,  
**Danijela S. Kretić**<sup>b</sup>  <https://orcid.org/0000-0002-8695-3958>,  
**Dušan Ž. Veljković**<sup>b</sup>  <https://orcid.org/0000-0002-1382-8785>

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

e-mail: ivana.veljkovic@ihm.bg.ac.rs

The sensitivity of high-energy molecules towards detonation is affected by multiple molecular and crystalline factors like free space per molecule in a crystal lattice, maximum detonation heat release, strongly positive values of molecular electrostatic potential, and noncovalent bonding [1]. That is not a conclusive list, since the detonation involves a series of complex, mutually dependent events. In the case of nitroaromatic molecules, the detonation process begins with the dissociation of the C–NO<sub>2</sub> bond, which is usually the weakest bond in the molecule. Here we combined an analysis of geometrical parameters from crystal structures with the results of quantum chemical calculations to investigate the influence of the nature and size of neighboring substituents on the strength of the C–NO<sub>2</sub> bond and the sensitivity of nitroaromatic molecules towards detonation.

Cambridge Structural Database (CSD) was searched and all crystal structures containing trinitroaromatic fragments were extracted. Substituents neighboring the nitro-groups were analyzed in terms of their nature, size, and noncovalent bonding patterns. Angles between aromatic ring planes and nitro-group planes were studied since it is known that tilting of nitro-group with respect to the aromatic plane leads to the weakening of the C–NO<sub>2</sub> bond and increased sensitivity of molecules towards detonation. The results of the analysis of geometrical parameters were compared to the results of *ab initio* calculations. Analysis of geometrical data showed that substituents may affect C–NO<sub>2</sub> bond strength in two main ways: through the formation of noncovalent interaction with nitro-group or by inducing tilting of nitro-group due to the steric repulsion and size of substituents. The results of this analysis may be of great significance for the design of new types of high-energy molecules with moderate sensitivity towards detonation.

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

*Acknowledgement:* This research was supported by the Science Fund of the Republic of Serbia, PROMIS, #6066886, CD-HEM. This work is supported by the Ministry of Science, Technological Development and Innovation of the Republic of Serbia (Contract numbers: 451-03-66/2024-03/200168 and 451-03-66/2024-03/200026).

## ПНИКТОГЕНЕ ИНТЕРАКЦИЈЕ У КРИСТЛНИМ СТРУКТУРАМА НИТРОАРОМАТИЧНИХ ЕКСПЛОЗИВА

Јелена И. Радовановић<sup>a</sup>  <https://orcid.org/0009-0007-1555-796X>,  
Душан Ж. Вељковић<sup>b</sup>  <https://orcid.org/0000-0002-1382-8785>

<sup>a</sup> Универзитет у Београду – Хемијски факултет, Београд, Србија  
имејл: vdusan@chem.bg.ac.rs

Пниктогена веза представља слабу, привлачну нековалентну интеракцију између електрофилног региона молекулске површине пниктогеног атома и нуклеофилног региона другог атома или групе атома [1]. И експериментална и теоријска истраживања показују да пниктогене везе играју значајну улогу у различитим областима хемије, од кристалног инжењерства до дизајнирања материјала и катализе [2]. У овом раду смо комбиновали анализу кристалографских података са квантохемијским прорачунима у циљу разјашњавања улоге пниктогених интеракција у дефинисању детонационих карактеристика нитроароматичних високоенергетских молекула.

Претражили смо Кембричку базу структурних података у циљу идентификовања и издвајања свих кристалних структура које садрже тринитроароматичне фрагменте чије нитро-групе учествују у међумолекулским пниктогеним интеракцијама са кисеоником из нитро-група суседних молекула. Издвојили смо 253 кристалне структуре у којима је идентификовано 538 кратких контаката између атома азота из нитро-групе једног тринитроароматичног фрагмента и атома кисеоника из нитро-група других фрагмената.

Анализа геометријских података из издвојених кристалних структура показала је да пниктогене везе могу да изазову ротацију нитро-групе у односу на раван ароматичног прстена. Ранија истраживања су показала да оваква ротирања нитро-група у структурама нитроароматичних високоенергетских молекула доводе до слабљења C-NO<sub>2</sub> веза, чија дисоцијација обично представља први корак у процесу детонације. Резултати анализе кристалних структура су објашњени у контексту квантохемијских прорачуна урађених на модел системима.

Резултати овог истраживања могу да буду од великог значаја за разумевање детонационих карактеристика чврстих нитроароматичних експлозива.

[1] S. Scheiner, *J. Phys. Chem.* **125** (2021) 10419

[2] B. Lin, *et al.*, *Angew. Chem. Int. Ed.* **62** (2023) e202304960.

*Захвалница:* Овај рад је подржан од стране Фонда за науку Републике Србије, ПРОМИС, #6066886, CD-HEM. Овај рад је подржан од стране Министарства науке, технолошког развоја и иновација Републике Србије (Број уговора: 451-03-66/2024-03/200168)

## PNICTOGEN INTERACTIONS IN CRYSTAL STRUCTURES OF NITROAROMATIC EXPLOSIVES

**Jelena I. Radovanović** <sup>a</sup>  <https://orcid.org/0009-0007-1555-796X>,  
**Dušan Ž. Veljković** <sup>a</sup>  <https://orcid.org/0000-0002-1382-8785>

<sup>a</sup> *University of Belgrade – Faculty of Chemistry, Belgrade, Serbia*  
e-mail: vdusan@chem.bg.ac.rs

The pnictogen bond represents a weak, attractive non-covalent contact between the electrophilic region of the molecular surface above the pnictogen atom, and a nucleophilic region of another atom or atomic group [1]. Both experimental and theoretical studies showed that pnictogen bonds play important roles in different areas of chemistry, from crystal engineering to material design and catalysis [2]. Here we combined analysis of crystallographic data and quantum chemical calculations to elucidate the role of the pnictogen bond in defining detonation properties of solid nitroaromatic high-energy molecules.

Here we searched the Cambridge Structural Database to identify and extract all crystal structures containing trinitroaromatic fragments in which nitro-group was involved in intermolecular pnictogen interactions with the oxygen atoms from nitro groups of neighbouring molecules. We extracted 253 crystal structures with 538 short contacts between nitrogen atoms from a nitro group of one trinitroaromatic fragment, and an oxygen atom from a nitro groups of the other fragment.

Analysis of geometrical data from extracted crystal structures showed that pnictogen bonds may induce tilting of nitro-group with respect to the aromatic plane. Earlier, it was shown that tilting of nitro-group in structures of nitroaromatic high-energy molecules leads to the weakening of C-NO<sub>2</sub> bonds, whose dissociation is usually the first step in the detonation process. The results of the analysis of crystal structures were explained in the context of quantum chemical calculations performed on model systems.

The results of this study could be of great importance for the understanding of detonation characteristics of solid nitroaromatic high-energy materials.

- [1] S. Scheiner, *J. Phys. Chem.* **125** (2021) 10419  
[2] B. Lin, *et al.*, *Angew. Chem. Int. Ed.* **62** (2023) e202304960.

*Acknowledgement:* This research was supported by the Science Fund of the Republic of Serbia, PROMIS, #6066886, CD-HEM. This work is supported by the Ministry of Science, Technological Development and Innovation of the Republic of Serbia (Contract number: 451-03-66/2024-03/200168).

## СУСРЕТ КРИСТАЛОГРАФИЈЕ И НАУКЕ О МАТЕРИЈАЛИМА

**Martina Vrankić**<sup>a</sup>  <https://orcid.org/0000-0002-8461-221X>,  
**Takeshi Nakagawa**<sup>b</sup>  <https://orcid.org/0000-0001-6283-8755>,  
**Yang Ding**<sup>b</sup>, **Jasminka Popović**<sup>a</sup>  <https://orcid.org/0000-0003-0800-2249>,  
**Anna Moliterni**<sup>b</sup>  <https://orcid.org/0000-0001-6786-6982>,  
**Damir Pajić**<sup>c</sup>  <https://orcid.org/0000-0002-4907-7290>

<sup>a</sup> Division of Materials Physics, Ruder Bošković Institute, Zagreb, Croatia; <sup>b</sup> Center for High-Pressure Science & Technology Advanced Research, Beijing, P. R. China; <sup>c</sup> Institute of Crystallography (IC)-CNR, Bari, Italy; <sup>2</sup> Faculty of Science, University of Zagreb, Zagreb, Croatia  
имејл: mvrankic@irb.hr

Разумевање понашања материјала у нестандартним условима веома је важно, како за израду уређаја, тако и за њихово одржавање. Овде су представљена проучавања из две различите области науке о материјалима која у испитивањима користе фундаменталну кристалографију. Познато је, на пример, да су вештачки материјали који могу складиштити и ослобађати молекулски кисеоник, добар избор за почетак истраживања нових материјала који би могли помоћи у смањењу потрошње енергије и штетног утицаја на околину. У том контексту, истраживали смо реверзибилно примање/отпуштање кисеоника унутар  $\text{BaAl}_2\text{O}_4$  које је праћено појавом специфичног магнетног уређења [1]. Магнетна мерења су показала да је кисеоник складиштен у облику кондензоване материје и да гради неку врсту нискодимнезионалног ланчаног склопа унутар структуре  $\text{BaAl}_2\text{O}_4$ . Кисеоник из ваздуха се адсорбује у структуру при амбијенталним условима, а отпушта се релативно брзо у атмосфери хелијума или неког другог гаса са са притиском од неколико милибара, чак и на 300 К.

Код проучавања органско-неорганских хибридних материјала постоји неопходност коришћења рендгенске дифракције на прашкастим узорцима и праћења промене структурних параметара под високим притисцима, без које не би било могуће испитивати осетљива физичка и фотофизичка својства материјала [2]. Скуп различитих неамбијенталних података измерених за хибридни органско-неоргански молекулски фероелектрик  $(\text{N}(\text{C}_2\text{H}_5)_3\text{CH}_3)\text{FeVt}_4$  појаснио је флексибилно физичко и фотофизичко понашање хибрида изложеног притисцима већим од 30 GPa. При релативно умереним притисцима дошло је до реверзибилног сужавања енергијског расцепа и реверзибилне пиезохромне промене. Проналажење распореда и начина везивања атома у кристалним структурама, као и геометријске структуре кристалних решетки битно је за описивање зависности одређених својстава материјала од њихове структуре.

[1] M. Vrankić, *et al.*, *Sci. Rep.* **9** (2019) 15158

[2] T. Nakagawa, *et al.*, *Inorg. Chem.* **62** (2023) 19527.

## WHERE CRYSTALLOGRAPHY MEETS MATERIALS SCIENCE

**Martina Vrankić**<sup>a</sup>  <https://orcid.org/0000-0002-8461-221X>,  
**Takeshi Nakagawa**<sup>b</sup>  <https://orcid.org/0000-0001-6283-8755>,  
**Yang Ding**<sup>b</sup>, **Jasminka Popović**<sup>a</sup>  <https://orcid.org/0000-0003-0800-2249>,  
**Anna Moliterni**<sup>c</sup>  <https://orcid.org/0000-0001-6786-6982>,  
**Damir Pajić**<sup>d</sup>  <https://orcid.org/0000-0002-4907-7290>

<sup>a</sup> Division of Materials Physics, Ruđer Bošković Institute, Zagreb, Croatia; <sup>b</sup> Center for High-Pressure Science & Technology Advanced Research, Beijing, P. R. China; <sup>c</sup> Institute of Crystallography (IC)-CNR, Bari, Italy; <sup>d</sup> Faculty of Science, University of Zagreb, Zagreb, Croatia  
e-mail: mvrancic@irb.hr

Understanding how materials behave under non-ambient conditions is very important for both making devices and keeping them in good shape. Two different areas of materials science study that use different methods, but both have fundamental crystallography in the background, will be presented. It is known, for example, that artificial materials that can store and release molecular oxygen are a good place to start looking for new uses that could help reduce on energy consumption and the associated environmental damage. In this context, the reversible uptake/release of oxygen within the BaAl<sub>2</sub>O<sub>4</sub> material is investigated, as evidenced by unexpected magnetic ordering [1]. The magnetic measurements show that the oxygen is stored in the form of condensed matter and forms a kind of low dimensional, chain-like assembly within the tunnels of the BaAl<sub>2</sub>O<sub>4</sub> structure. Oxygen is adsorbed simply by being in air at ambient conditions and released relatively quickly by being in He or another gas atmosphere with a pressure of several millibars even at 300 K.

For the selected organic-inorganic hybrid material, however, the collected powder X-ray diffraction and structural evolution data under high pressure underlines the necessity of this characterization method, without which it would be impossible to correlate structural and sensitive physical and photophysical behaviour [2]. A collection of various non-ambient data measured for the hybrid organic-inorganic molecular ferroelectric (N(C<sub>2</sub>H<sub>5</sub>)<sub>3</sub>CH<sub>3</sub>)FeBr<sub>4</sub> has deciphered the flexible physical and photophysical behavior at pressures above 30 GPa, leading to a reversible band narrowing at relatively moderate pressure points and reversible piezochromic changes in the electronic landscape. Deciphering the arrangement and bonding of atoms in crystalline solids and the geometric structure of crystal lattices is essential for linking the structure and properties of materials.

- [1] M. Vrankić, *et al.*, *Sci. Rep.* **9** (2019) 15158  
[2] T. Nakagawa, *et al.*, *Inorg. Chem.* **62** (2023) 19527.

## СИНТЕЗА МОНОКРИСТАЛА ТЕСЕРАЛНЕ $K_{1-x}Al_{1-x}Si_xO_2$ ФАЗЕ

**Предраг Дабих**<sup>a</sup>  <https://orcid.org/0000-0002-1865-4788>,  
**Александар Кременовић**<sup>a</sup>  <https://orcid.org/0000-0001-8845-2332>,  
**Љиљана Карановић**<sup>a</sup>  <https://orcid.org/0000-0001-9534-1315>

<sup>a</sup> Универзитет у Београду – Рударско-геолошки факултет, Београд, Србија  
имејл: predrag.dabic@rgf.bg.ac.rs

Тернарни систем  $K_2O-Al_2O_3-SiO_2$  опсежно се истражује већ више од једног века због његовог значаја у минералогiji и науци о материјалима. Објављени подаци о симетрији и параметрима јединичне ћелије досад познатих кристалних фаза приближног хемијског састава  $KAlSiO_4$  откривају велику разноликост резултата. Одређено је и описано неколико кристалних фаза у испитиваном систему  $K_2O-Al_2O_3-SiO_2$ , али кристална структура тесералне фазе, познате као чврст раствор  $K_{1-x}Al_{1-x}Si_xO_2$  [1], до сад није објављена.

Вејберг [2] и Боуен [3] су известили о синтези октаедарских кристала идентификованих као  $K_2Al_2SiO_6$ . Јамагучи [4] је одредио јединичну ћелију  $a = 7,650(5)$  Å једињења тесералне симетрије описаног као  $K_2Al_2SiO_6$ . Кук и коаутори [1] су дали рендгенске дифракционе податке на поликристалном материјалу за тесералну  $K_{1-x}Al_{1-x}Si_xO_2$  фазу и утачили параметар јединичне ћелије  $a = 7,644(1)$  Å. Прецесионе фотографије и дифракциони подаци указали су да је кристална структура ове фазе пљосно центрирана тесерална и да припада Лауеовој класи  $m\bar{3}m$ . Хашир и коаутори [5] су одредили јединичну ћелију  $a = 7,6799(7)$  Å и просторну групу  $Fd\bar{3}m$  (бр. 227) за једињење  $K_{0,85}Al_{0,85}S_{0,15}O_2$ . Они сматрају да тесерална фаза  $K_{1-x}Al_{1-x}Si_xO_2$  представља чврст раствор  $\beta$ -кристобалитског типа структуре где  $x$  достиже вредност и до приближно  $x \approx 0,235$  на температури од 1500 °C.

Анализа рендгенских дифракционих података синтетисаног поликристалног материјала потврдила је присуство тесералне  $K_{1,25}Al_{1,25}Si_{0,75}O_4$  фазе (ICDD # 00-032-0731) у узорку са још две кристалне фазе:  $KAlSiO_4-OI$  (ICDD # 01-077-8523; ICSD 162489) и  $\beta$ - $KAl_5O_8$  (ICDD # 00-021-0618). Избор висококвалитетног тесералног монокристала и детаљно испитивање његових структурних карактеристика биће следећи корак у нашем будућем раду.

- [1] L.P. Cook, *et al.*, *Am. Mineral.* **62** (1977) 1180
- [2] Z. Weyberg, *Centralbl. Mineral. Geol. Paleont.* **11** (1908) 326
- [3] N. L. Bowen, *Am. J. Sci.* **43** (1917) 115.
- [4] A. Yamaguchi, *Nippon Seram. Kyo. Gak.* **78** (1970) 74
- [5] S. L. G. Husheer, *et al.*, *J. Solid State Chem.* **147** (1999) 624.

*Захвалница:* Средства су обезбеђена од стране Министарства науке, технолошког развоја и иновација по основу Уговора бр. 451-03-65/2024-03/200126 и 451-03-66/2024-03/200126.

## SYNTHESIS OF $K_{1-x}Al_{1-x}Si_xO_2$ CUBIC SINGLE CRYSTAL

**Predrag Dabić**<sup>a</sup>  <https://orcid.org/0000-0002-1865-4788>,  
**Aleksandar Kremenović**<sup>a</sup>  <https://orcid.org/0000-0001-8845-2332>,  
**Ljiljana Karanović**<sup>a</sup>  <https://orcid.org/0000-0001-9534-1315>

<sup>a</sup> *University of Belgrade, Faculty of Mining and Geology, Belgrade, Serbia*  
e-mail: predrag.dabic@rgf.bg.ac.rs

The ternary system  $K_2O-Al_2O_3-SiO_2$  has been extensively investigated for more than a century because of its importance in mineralogy and materials science. Published data on the symmetry and unit cell parameters of previously known crystal phases having chemical composition close to  $KAlSiO_4$ , reveal a great spread of results. Among several phases that are known to exist in the studied system, the crystal structure of the cubic phase denoted as solid solution  $K_{1-x}Al_{1-x}Si_xO_2$  [1] has not been reported until now.

Weyberg [2] and Bowen [3] reported the synthesis of octahedral crystals, which were identified as  $K_2Al_2SiO_6$ . Yamaguchi [4] observed a unit cell parameter of 7.650(5) Å for a cubic compound described as  $K_2Al_2SiO_6$ . Cook and coauthors [1] reported X-ray powder diffraction data for a cubic  $K_{1-x}Al_{1-x}Si_xO_2$  phase and refined unit cell parameter  $a = 7.644(1)$  Å. The precession photographs and X-ray powder diffraction data indicate that the solid solution  $K_{1-x}Al_{1-x}Si_xO_2$  is face-centered cubic and belongs to the Laue group  $m\bar{3}m$ . Husheer *et al.* [5] determined the unit cell  $a = 7.6799(7)$  Å and space group  $Fd\bar{3}m$  (No. 227) for a compound  $K_{0.85}Al_{0.85}Si_{0.15}O_2$ . According to them, the cubic phase  $K_{1-x}Al_{1-x}Si_xO_2$  is a solid solution of  $\beta$ -cristobalite type structure that extends to  $x \approx 0.235$  at 1500 °C.

Powder XRD analysis of the synthesized material confirmed the presence of the cubic phase  $K_{1.25}Al_{1.25}Si_{0.75}O_4$  (ICDD # 00-032-0731) along with two other phases in the sample:  $KAlSiO_4-OI$  (ICDD # 01-077-8523; ICSD 162489) and  $\beta$ - $KAl_5O_8$  (ICDD # 00-021-0618). The selection of the high-quality cubic single crystal and detailed characterisation of its structural properties will be the next step in our future work.

- [1] L.P. Cook, *et al.*, *Am. Mineral.* **62** (1977) 1180
- [2] Z. Weyberg, *Centralbl. Mineral. Geol. Paleont.* **11** (1908) 326
- [3] N. L. Bowen, *Am. J. Sci.* **43** (1917) 115.
- [4] A. Yamaguchi, *Nippon Seram. Kyo. Gak.* **78** (1970) 74
- [5] S. L. G. Husheer, *et al.*, *J. Solid State Chem.* **147** (1999) 624.

*Acknowledgement:* Funds provided by the Ministry of Science, Technological Development and Innovation based on Contract no. 451-03-65/2024-03/200126 and 451-03-66/2024-03/200126.

## МОЛЕКУЛСКЕ И КРИСТАЛНЕ СТРУКТУРЕ (+)-АСПЕРИЛАКТОНА Ц И 7-epi-(+)-АСПЕРИЛАКТОНА Ц

**Сања Ђокић**<sup>a</sup>  <https://orcid.org/0000-0003-0448-6282>,

**Марко В. Родић**<sup>a</sup>  <https://orcid.org/0000-0002-4471-8001>,

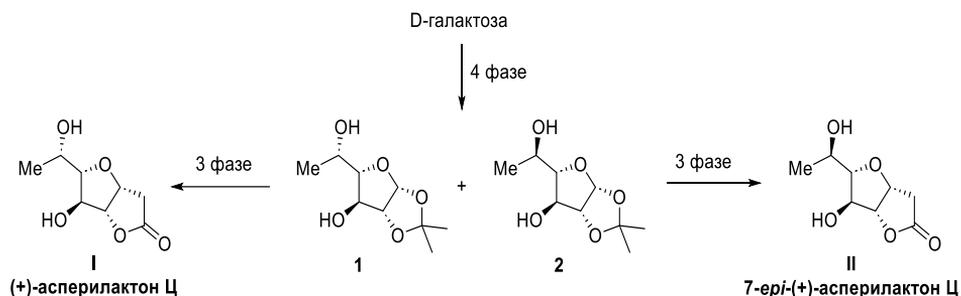
**Мирјана Попсавин**<sup>a</sup>  <https://orcid.org/0000-0002-0924-1041>,

**Велимир Попсавин**<sup>a,б</sup>  <https://orcid.org/0000-0001-9910-2987>,

**Јована Француз**<sup>a</sup>  <https://orcid.org/0000-0002-4330-8561>

<sup>a</sup> Универзитет у Новом Саду, Природно-математички факултет, Нови Сад, Србија; <sup>б</sup> Српска академија наука и уметности, Београд, Србија  
имејл: sanjadj@dh.uns.ac.rs

(+)-Асперилактон Ц (**I**) је природни производ изолован из *Aspergillus nidulans*, а његова структура је предложена на основу спектроскопских анализа и прорачуна електронског циркуларног дихроизма [1]. Синтеза (+)-асперилактона Ц (**I**) и његовог C-7 епимера (**II**) је остварена у седам синтетских фаза, полазећи из D-галактозе (**Схема 1**) [2]. Рендгенска структурна анализа је пружила увид у апсолутну стереохемију производа **I** и **II**.



**Схема 1.** Синтетски приступ епимерним молекулима **I** и **II**.

Епимерни молекули **I** и **II** су кристалисали из раствора EtOAc/*n*-хексан и оба припадају орторомбичном систему, просторна група  $P2_12_12_1$ . Апсолутне конфигурације синтетисаних молекула су одређене на два начина: на основу стереоцентра чија конфигурација се не мења у току реакција и кроз ефекат резонантног расејања.

[1] Q. Li, *et al.*, *Fitoterapia* **173** (2024) 105790

[2] J. Francuz, *et al.*, *Synlett* **34**(14) (2023) 1699.

*Захвалница:* Аутори се захваљују Министарству образовања, науке и технолошког развоја (Програм: 451-03-65/2024-03/200125 & 451-03-66/2024-03/200125) и истраживачким пројектом Српске академије наука и уметности (F-130).

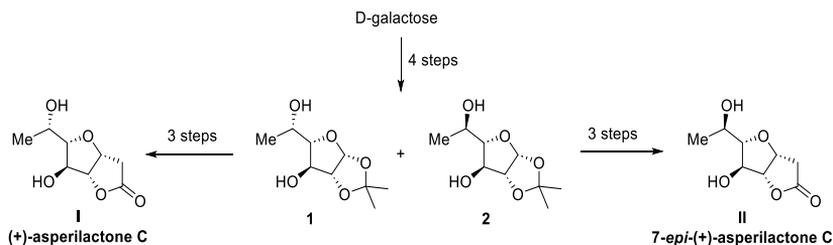
## MOLECULAR AND CRYSTAL STRUCTURES OF (+)-ASPERILACTONE C AND 7-*epi*-(+)-ASPERILACTONE C

**Sanja Đokić**<sup>a</sup>  <https://orcid.org/0000-0003-0448-6282>,  
**Marko V. Rodić**<sup>a</sup>  <https://orcid.org/0000-0002-4471-8001>,  
**Mirjana Popsavin**<sup>a</sup>  <https://orcid.org/0000-0002-0924-1041>,  
**Velimir Popsavin**<sup>a,b</sup>  <https://orcid.org/0000-0001-9910-2987>,  
**Jovana Francuz**<sup>c</sup>  <https://orcid.org/0000-0002-4330-8561>

<sup>a</sup> *University of Novi Sad, Faculty of Sciences, Novi Sad, Serbia;* <sup>b</sup> *Serbian Academy of Sciences and Arts, Belgrade, Serbia*

e-mail: sanjadj@dh.uns.ac.rs

(+)-Asperilactone C (**I**) is a natural product isolated from *Aspergillus nidulans*, and its structure was proposed based on spectroscopic analyzes and electronic circular dichroism calculations [1]. The synthesis of (+)-asperilactone C (**I**) and its C-7 epimer (**II**) was accomplished in seven synthetic steps, starting from D-galactose (**Scheme 1**) [2]. X-ray structural analysis provided insight into the absolute stereochemistry of products **I** and **II**. Epimeric molecules **I** and **II** were crystallized from EtOAc/*n*-hexane solution and both belong to the orthorhombic crystal system, space group  $P2_12_12_1$ . The absolute configurations of the synthesized molecules were determined in two ways: based on stereocenters whose configuration does not change during the reaction and through the effect of resonance scattering.



**Scheme 1.** Synthetic approach to epimeric compounds **I** and **II**.

- [1] Q. Li, *et al.*, *Fitoterapia* **173** (2024) 105790  
 [2] J. Francuz, *et al.*, *Synlett* **34**(14) (2023) 1699.

*Acknowledgement:* The work was supported by a grant from Ministry of Education, Science and Technological Development (Grant No. 451-03-65/2024-03/200125 & 451-03-66/2024-03/200125), and by a research project from the Serbian Academy of Sciences and Arts (Grant No. F-130).

## МОЛЕКУЛСКЕ И КРИСТАЛНЕ СТРУКТУРЕ (+)- И (-)-АСПЕРИЛАКТОНА Б

**Сања Ђокић**<sup>a</sup>  <https://orcid.org/0000-0003-0448-6282>,

**Марко В. Родић**<sup>a</sup>  <https://orcid.org/0000-0002-4471-8001>,

**Мирјана Попсавин**<sup>a</sup>  <https://orcid.org/0000-0002-0924-1041>,

**Велимир Попсавин**<sup>a,б</sup>  <https://orcid.org/0000-0001-9910-2987>,

**Јована Француз**<sup>a</sup>  <https://orcid.org/0000-0002-4330-8561>

<sup>a</sup> Универитет у Новом Саду, Природно-математички факултет, Нови Сад, Србија; <sup>б</sup> Српска академија наука и уметности, Београд, Србија  
имејл: sanjadj@dh.uns.ac.rs

(+)-Асперилактон Б (**1**) је природни производ изолован из *Aspergillus nidulans*, а његова структура је предложена на основу спектроскопских анализа и прорачуна електронског циркуларног дихроизма [1]. Синтеза (+)-асперилактона Б (**1**) је остварена у седам синтетских фаза, полазећи из D-глукозе (Схема 1). Паралелно је остварена синтеза (-)-асперилактона Б (*ent*-**1**) у само једном синтетском кораку из L-рамнозе (Схема 1). Рендгенска структурна анализа је пружиала увид у апсолутну стереохемију производа **1**, *ent*-**1**, као и структурног аналога **2** (Схема 1).

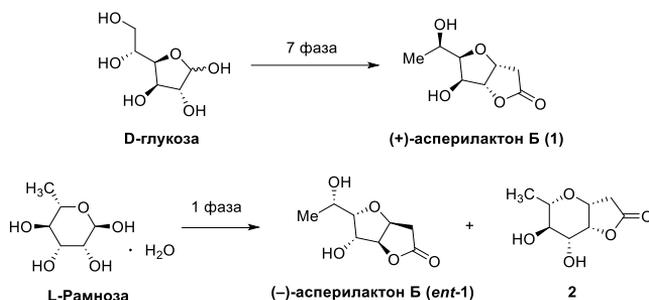


Схема 1. Синтетски приступ.

Једињења **1**, *ent*-**1** и **2** су кристалисала из раствора ЕтОAc/*n*-хексан и сва три припадају моноклиничном кристалном систему (просторна група *C2* за **1** и *ent*-**1**, а *P2*<sub>1</sub> за **2**). Апсолутне конфигурације синтетисаних молекула су одређене на два начина: на основу стереоцентра чија конфигурација се не мења у току реакција и кроз ефекат резонантног расејања.

[1] Q. Li, *et al.*, *Fitoterapia* **173** (2024) 105790.

*Захвалница:* Аутори се захваљују Министарству образовања, науке и технолошког развоја (Програм: 451-03-65/2024-03/200125 & 451-03-66/2024-03/200125) и истраживачким пројектом Српске академије наука и уметности (F-130).

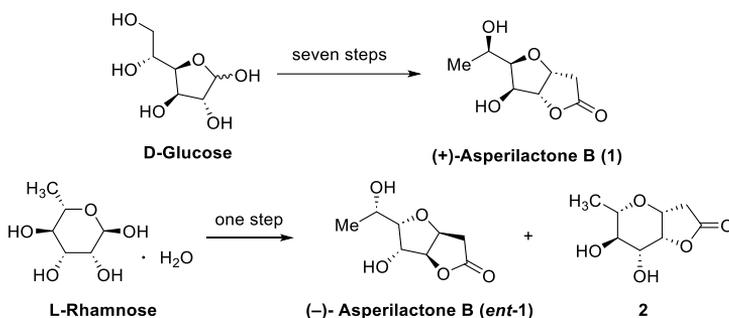
## MOLECULAR AND CRYSTAL STRUCTURES OF (+)- AND (-)-ASPERILACTONES B

**Sanja Đokić**<sup>a</sup>  <https://orcid.org/0000-0003-0448-6282>,  
**Marko V. Rodić**<sup>a</sup>  <https://orcid.org/0000-0002-4471-8001>,  
**Mirjana Popsavin**<sup>a</sup>  <https://orcid.org/0000-0002-0924-1041>,  
**Velimir Popsavin**<sup>a,b</sup>  <https://orcid.org/0000-0001-9910-2987>,  
**Jovana Francuz**<sup>a</sup>  <https://orcid.org/0000-0002-4330-8561>

<sup>a</sup> *University of Novi Sad, Faculty of Sciences, Novi Sad, Serbia;* <sup>b</sup> *Serbian Academy of Sciences and Arts, Belgrade, Serbia*

e-mail: sanjadj@dh.uns.ac.rs

(+)-Asperilactone B (**1**) is a natural product isolated from *Aspergillus nidulans*, and its structure was proposed based on spectroscopic analyzes and electronic circular dichroism calculations [1]. The synthesis of (+)-asperilactone B (**1**) was accomplished in seven synthetic steps, starting from D-glucose (Scheme 1). In parallel, the synthesis of (-)-asperilactone B (*ent-1*) was realized in only one synthetic step from L-rhamnose (**Scheme 1**). X-ray structural analysis provided insight into the absolute stereochemistry of product **1**, *ent-1*, as well as structural analogue **2** (Scheme 1).



**Scheme 1.** Synthetic approach.

Compounds **1**, *ent-1* and **2** were crystallized from EtOAc/n-hexane solution and all three belong to the monoclinic crystal system (space group  $C2$  for **1** and *ent-1*, and  $P2_1$  for **2**). The absolute configurations of the synthesized molecules were determined by two means: based on stereocenters whose configuration does not change during the reaction and through the effect of resonance scattering.

[1] Q. Li, *et al.*, *Fitoterapia* **173** (2024) 105790.

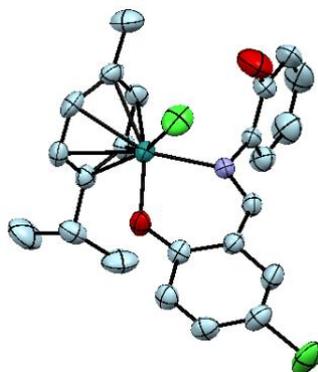
*Acknowledgement:* The work was supported by a grant from Ministry of Education, Science and Technological Development (Grant No. 451-03-65/2024-03/200125 & 451-03-66/2024-03/200125), and by a research project from the Serbian Academy of Sciences and Arts (Grant No. F-130).

## СИНТЕЗА И КРИСТАЛНА СТРУКТУРА [Ru-*p*-супене-L] КОМПЛЕКСА

**Маја Б. Ђукић**<sup>a</sup>  <https://orcid.org/0000-0001-9382-0443>,  
**Јелена М. Петронијевић**<sup>a</sup>  <https://orcid.org/0000-0003-3427-5427>,  
**Марија С. Ристић**<sup>a</sup>  <https://orcid.org/0000-0002-7066-9928>,  
**Слађана Б. Новаковић**<sup>b</sup>  <https://orcid.org/0000-0002-8737-5870>

<sup>a</sup> Универзитет у Крагујевцу, Природно-математички факултет, Крагујевац, Србија; <sup>b</sup> Институт за нуклеарне науке „Винча” - Институт од националног значаја за Републику Србију, Универзитет у Београду, Београд, Србија  
имејл: маја.djukic@pmf.kg.ac.rs

Комплекс [Ru-*p*-супене-L], где је L = 4-хлоро-2-[[2-хидроксифенил)имино]ме-тил]фенол, је синтетисан по раније објављеној процедури примењеној за синтезу сличних комплекса [1]. Комплекс [(*p*-супене)RuCl<sub>2</sub>]<sub>2</sub> (0,3062 g; 0,5 mmol) је растворен у метанолу (6 mL) и у овај раствор је додат чврст лиганд (0,2465 g; 1 mmol). Добијена смеша је рефлугована 3 сата на 60 °C. Раствор је остављен преко ноћи у фрижидеру, затим процеђен на вакууму и талог осушен. Талог је прекристалисан из ДМФ и добијени су наранџасти кристали комплекса [Ru-*p*-супене-L] (Слика 1). Кристалографски подаци: орторомбични кристални систем, просторна група *Pbca*, *a* = 11,2308(3), *b* = 16,4020(4), *c* = 23,7868(5) Å, *V* = 4381,71(18) Å<sup>3</sup>, *Z* = 8,  $\rho$  = 1,569 g cm<sup>-3</sup>,  $\mu$  = 0,979 mm<sup>-1</sup>, *R*<sub>1</sub> = 0,0412, *wR* = 0,1054.



Слика 1. Молекулска структура [Ru-*p*-супене-L] комплекса.

[1] R. Takjoo, *et al.*, *Inorganica Chim. Acta* **455** (2017) 173.

Захвалница: Овај рад је подржан од стране Министарства науке, технолошког развоја и иновација Републике Србије (број: 451-03-66/2024-03/ 200122).

## SYNTHESIS AND CRYSTAL STRUCTURE OF [Ru-*p*-cymene-L] COMPLEX

**Maja B. Đukić**<sup>a</sup>  <https://orcid.org/0000-0001-9382-0443>,

**Jelena M. Ptronijević**<sup>a</sup>  <https://orcid.org/0000-0003-3427-5427>,

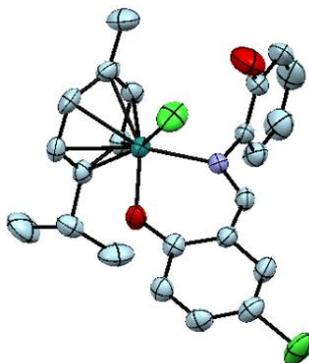
**Marija S. Jeremić**<sup>a</sup>  <https://orcid.org/0000-0002-7066-9928>,

**Slađana B. Novaković**<sup>b</sup>  <https://orcid.org/0000-0002-8737-5870>

<sup>a</sup> University of Kragujevac, Faculty of Science, Kragujevac, Serbia; <sup>b</sup> Vinča Institute of Nuclear Sciences - National Institute of the Republic of Serbia, University of Belgrade, Belgrade, Serbia

e-mail: maja.djukic@pmf.kg.ac.rs

The complex [Ru-*p*-cymene-L], where L = 4-chloro-2-[(2-hydroxyphenyl)imino]methyl]phenol, was synthesized according to a previously published procedure used for the synthesis of similar complexes [1]. The starting complex [(*p*-cymene)RuCl<sub>2</sub>]<sub>2</sub> (0.3062 g; 0.5 mmol) was dissolved in methanol (6 mL) and the solid ligand (0.2465 g; 1 mmol) was added to this solution. The resulting mixture was refluxed at 60 °C for 3 hours. The solution was left in the refrigerator overnight, then vacuum filtered and the precipitate dried. The precipitate was recrystallized from DMF and orange crystals of the complex [Ru-*p*-cymene-L] were obtained (**Figure 1**). Crystal data: orthorhombic, space group *Pbca*, *a* = 11.2308(3), *b* = 16.4020(4), *c* = 23.7868(5) Å, *V* = 4381.71(18) Å<sup>3</sup>, *Z* = 8,  $\rho = 1.569 \text{ g cm}^{-3}$ ,  $\mu = 0.979 \text{ mm}^{-1}$ , *R*<sub>i</sub> = 0.0412, *wR* = 0.1054.



**Figure 1.** Molecular structure of [Ru-*p*-cymene-L] complex.

[1] R. Takjoo, *et al.*, *Inorganica Chim. Acta* **455** (2017) 173.

*Acknowledgement:* This work was supported by the Ministry of Science, Technological Development and Innovation of the Republic of Serbia (Grants No. 451-03-66/2024-03/200122).

## ТЕОРИЈСКА СТРАТЕГИЈА ЗА ПРОИЗВОДЊУ ПОЛИМОРФА V КАРБАМАЗЕПИНА

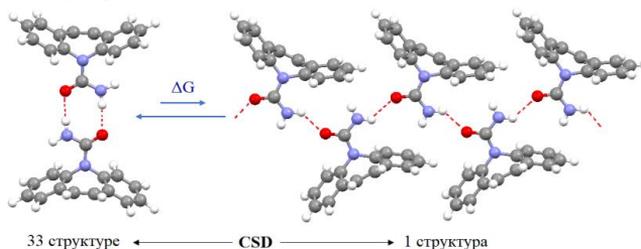
**Горан В. Јањић**<sup>a</sup>  <https://orcid.org/0000-0002-4138-2637>,  
**Љиљана Т. Суручић**<sup>b</sup>  <https://orcid.org/0000-0003-4332-8690>,  
**Александра А. Ракић**<sup>b</sup>  <https://orcid.org/0000-0003-1489-6373>,  
**Немања П. Тришовић**<sup>c</sup>  <https://orcid.org/0000-0002-9231-4810>

<sup>a</sup> Универзитет у Београду – Институт за Хемију, Технологију и Металургију, Институт од националног значаја за Републику Србију, Београд, Србија;

<sup>b</sup> Универзитет у Бањој Луци, Медицински факултет, Бања Лука, Босна и Херцеговина; <sup>c</sup> Универзитет у Београду – Факултет за физичку хемију, Београд, Србија; <sup>2</sup> Универзитет у Београду – Технолошко-металуршки факултет, Београд, Србија

имејл: goran.janjic@ihtn.bg.ac.rs

Антиконвулзивни лек карбамазепин има преко 50 познатих форми, укључујући 5 полиморфа, при чему сваки од њих има различиту кристалну структуру и физичка својства, што може имати значајан утицај на фармацеутску формулацију, апсорпцију, биолошку расположивост и ефикасност лека. Кристалне структуре полиморфа I, II, III и IV задржавају мотив у коме су два инверзано оријентисана молекула повезана паром N–H/O водоничних веза образујући R<sub>2</sub><sup>2</sup>(8) прстен (Слика 1, леви димерни мотив), док кристалну структуру полиморфа V карактеришу ланци са једноструким N–H/O водоничним везама, ојачаним N–H/π интеракцијом (Слика 1, десни мотив). У Кембричкој структурној бази података (CSD) налазе се архивираних 33 кристалне структуре полиморфа I, II, III и IV, а само једна кристална структура полиморфа V, добијена из парне фазе 10,11-дихидрокарбамазепина. Полиморф V занимљив је и због тога што се не може добити директном синтезом или фазном трансформацијом поменути четири полиморфа. Могући разлог за то лежи у чињеници да је енергија интеракције у оваквом систему нижа у односу на преостала четири полиморфа који садрже двоструку водоничну везу. Ово потврђују и позитивне вредности стандардне промене Гибсове слободне енергије ( $\Delta G$ ) израчунате за три различите температуре (298, 373 и 463 K). Екстраполацијом израчунатих  $\Delta G$  вредности, показало се да се полиморф V може добити од полиморфа I, II, III или IV искључиво загревањем до тачке топљења (463 K), а затим хлађењем до температуре ниже од 260 K.



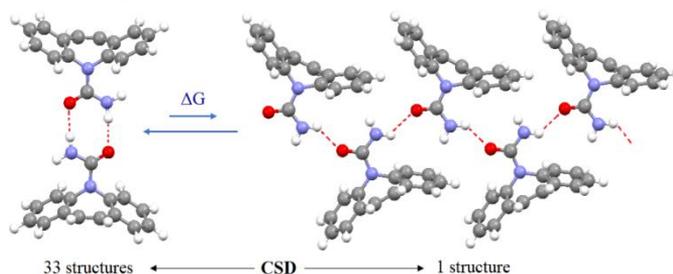
Слика 1. Паковања карбамазепина у различитим полиморфима.

## THEORETICAL STRATEGY FOR THE PRODUCTION OF THE CARBAMAZEPINE POLYMORPH V

**Goran V. Janjić**<sup>a</sup>  <https://orcid.org/0000-0002-4138-2637>,  
**Ljiljana T. Suručić**<sup>b</sup>  <https://orcid.org/0000-0003-4332-8690>,  
**Aleksandra A. Rakić**<sup>c</sup>  <https://orcid.org/0000-0003-1489-6373>,  
**Nemanja P. Trišović**<sup>d</sup>  <https://orcid.org/0000-0002-9231-4810>

<sup>a</sup> University of Belgrade – Institute of Chemistry, Technology and Metallurgy, National Institute of the Republic of Serbia, Belgrade, Serbia; <sup>b</sup> University of Banja Luka, Faculty of Medicine, Banja Luka, Bosnia and Herzegovina; <sup>c</sup> University of Belgrade – Faculty of Physical Chemistry, Belgrade, Serbia; <sup>d</sup> University of Belgrade – Faculty of Technology and Metallurgy, Belgrade, Serbia;  
e-mail: goran.janjić@ihtm.bg.ac.rs

The anticonvulsant drug carbamazepine has over 50 known forms, including 5 polymorphs, each with a different crystal structure and physical properties, which can significantly impact pharmaceutical formulation, absorption, bioavailability, and drug efficacy. The crystal structures of polymorphs I, II, III, and IV retain the motif where two molecules related by inversion are linked by a pair of N–H/O hydrogen bonds forming an  $R_2^2(8)$  ring (**Figure 1**, left dimer motif), while the crystal structure of polymorph V is characterized by chains with a single N–H/O hydrogen bond, strengthened by N–H/ $\pi$  interaction (**Figure 1**, right motif). The Cambridge Structural Database (CSD) archives 33 crystal structures of polymorphs I, II, III, and IV, with only one crystal structure of polymorph V obtained from the vapor phase of 10,11-dihydrocarbamazepine. Polymorph V is interesting because it cannot be obtained by direct synthesis or phase transformation of the aforementioned four polymorphs. A possible reason for this lies in the fact that the interaction energy in such a system is lower compared to the other four polymorphs containing a bifurcated hydrogen bond, as evidenced by the positive values of the standard Gibbs free energy change ( $\Delta G$ ) at the three considered temperatures (298, 373, and 463 K). Extrapolation of the calculated  $\Delta G$  values has shown that polymorph V can be obtained from polymorphs I, II, III, or IV exclusively by heating to the melting point (463 K) and then cooling to a temperature below 260 K.



**Figure 1.** The packaging of carbamazepine in different polymorphs.

## ОПТИЧКЕ, МАГНЕТНЕ И СТРУКТУРНЕ ОСОБИНЕ НАНОКОМПОЗИТА ЦИНК-ФЕРИТ/ТИТАН(IV)-ОКСИД

**Наташа Јовић Орсини**<sup>a</sup>  <https://orcid.org/0000-0003-1613-3361>,  
**Мирјана М. Милић**<sup>a</sup>  <https://orcid.org/0000-0002-0285-2819>,  
**Душан К. Божанић**<sup>a</sup>  <https://orcid.org/0000-0001-8246-9635>

<sup>a</sup> *Институт за нуклеарне науке Винча - Институт од националног значаја за Републику Србију, Универзитет у Београду, Београд, Србија*  
имејл: [natasaj@vin.bg.ac.rs](mailto:natasaj@vin.bg.ac.rs)

Композитни материјали на бази полупроводничког фотокатализатора и оксида прелазних метала могу наћи примену у области конверзије енергије и третмана отпадних вода. Чист  $\text{TiO}_2$  (са великим енергетским процепом  $> 3 \text{ eV}$ ) поседује добре фотокаталитичке особине, али се оне испољавају само у УВ области електромагнетног спектра ( $\lambda < 400 \text{ nm}$ ). Да би се спектрални одговор  $\text{TiO}_2$  фазе проширио у област видљиве светлости,  $\text{TiO}_2$  се спреже са погодним неорганским полупроводником (уског енергетског процепа), који је способан да апсорбује фотоне у видљивом опсегу.

У овом раду је проучаван магнетни композит добијен спрезањем титан(IV)-оксида и колоидних наночестица цинк-ферита. За добијање композита са различитим уделом  $\text{TiO}_2$  фазе коришћена је сол-гел техника која је подразумевала хидролизу титан(IV)-бутоксида у присуству цинк-феритних наночестица. Након прања, сушења и одгревања на  $430 \text{ }^\circ\text{C}$  у ваздуху, аморфна  $\text{TiO}_2$  фаза ( $\text{amTiO}_2$ ) прешла је у кристални анатас ( $\text{crysTiO}_2$ ). У циљу праћења процеса функционализације наночестица цинк-ферита са  $\text{TiO}_2$ , коришћена је инфрацрвена спектроскопија Фуријеове трансформације (ATR-FTIR). Интеракција између магнетних наночестица цинк-ферита и матрице титан-диоксида пре и после одгревања је испитивана Мезбауеровом спектроскопијом. Оптичка својства чистог  $\text{TiO}_2$  и добијених композита проучавана су мерењем фотолуминисценције (PL) након озрачивања узорак ласером таласне дужине  $\lambda_{\text{ex}} = 300$  и  $280 \text{ nm}$ .

## OPTICAL, MAGNETIC AND STRUCTURAL PROPERTIES OF ZINC FERRITE COUPLED TITANIA NANOCOMPOSITE

**Nataša Jović Orsini**<sup>a</sup>  <https://orcid.org/0000-0003-1613-3361>,  
**Mirjana M. Milić**<sup>a</sup>  <https://orcid.org/0000-0002-0285-2819>,  
**Dušan K. Božanić**<sup>a</sup>  <https://orcid.org/0000-0001-8246-9635>

<sup>a</sup> *VINČA Institute of Nuclear Sciences - National Institute of the Republic of Serbia, University of Belgrade, Belgrade, Serbia*  
e-mail: natasaj@vin.bg.ac.rs

Composites made by coupling semiconductor photocatalysts with transition metal oxides are promising materials in the field of energy conversion and waste-water treatment. Pure TiO<sub>2</sub> (with a wide bandgap > 3 eV) can be used as a photocatalyst, but its photocatalytic performance can be triggered only by UV radiation ( $\lambda < 400$  nm). The spectral response of TiO<sub>2</sub> into the visible light region can be extended by combining it with an inorganic semiconductor (of narrow bandgap), capable of harvesting the photons in the visible range.

In this work, a magnetic composite prepared by coupling titanium dioxide with colloidal zinc ferrite (ZFO) nanoparticles (NPs), has been studied. A sol-gel technique, which involved the hydrolysis of titanium butoxide in the presence of nanosized zinc ferrite seeds, was used to prepare composites with different amounts of TiO<sub>2</sub> phase. After washing, drying, and heating at 430 °C in an air atmosphere, the amorphous TiO<sub>2</sub> (*am*TiO<sub>2</sub>) phase in the as-prepared composites transformed into the crystalline anatase TiO<sub>2</sub> (*crys*TiO<sub>2</sub>). To follow a process of functionalization of magnetic zinc ferrite nanoparticles with TiO<sub>2</sub>, the Fourier transform infrared (ATR-FTIR) spectroscopy was used. The interaction between the zinc ferrite NPs and the titanium dioxide matrix upon heating was studied using the Mössbauer spectroscopy. The optical properties of pure TiO<sub>2</sub> and the obtained composites were studied by measuring the photoluminescence (PL) spectra of irradiated samples with  $\lambda_{\text{ex}} = 300$  and 280 nm.

## XRD И XPS АНАЛИЗА КЕРАМИКЕ БИЗМУТ-ФЕРИТА ДОПИРАНЕ ЛАНТАНОМ И ЕУРОПИЈУМОМ

Данијела Луковић Голић <sup>a</sup>  <https://orcid.org/0000-0003-0860-3925>,

Наташа Јовић Орсини <sup>b</sup>  <https://orcid.org/0000-0003-1613-3361>,

Александар Радојковић <sup>a</sup>  <https://orcid.org/0000-0003-3319-1280>,

Ненад Николић <sup>a</sup>  <https://orcid.org/0000-0002-5730-7391>,

Милутин Ивановић <sup>b</sup>  <https://orcid.org/0000-0001-8733-9258>

<sup>a</sup> *Институт за мултидисциплинарна истраживања, Београд, Универзитет у Београду, Србија;* <sup>b</sup> *Институт за нуклеарне науке Винча - Институт од националног значаја за Републику Србију, Универзитет у Београду, Винча, Београд, Србија*

имејл: [natasaj@vin.bg.ac.rs](mailto:natasaj@vin.bg.ac.rs)

У овом раду представљени су резултати анализе рендгенске дифракције (XRD) и рендгенске фотоелектронске спектроскопије (XPS) керамике бизмут-ферита ( $\text{BiFeO}_3$ ) допирани лантаном и еуропијумом. Серија узорака очекиване стехиометрије  $\text{Bi}_{1-z}\text{La}_x\text{Eu}_y\text{FeO}_3$  ( $z = x + y$ ) добијена је различитим допирањем  $\text{BiFeO}_3$ : лантаном ( $x = 0,05; 0,10; 0,15$ ), еуропијумом ( $y = 0,05; 0,10; 0,15$ ) и лантаном и еуропијумом ( $x = y = 0,025; 0,05; 0,075$ ).

Кристална структура узорака је утачњена у просторној групи  $R3c$  коришћењем XRD података и софтвера *Fullprof* и *SmartLab Studio* (Rigaku Co.). Фазни прелаз из ромбодарске (П.Г.  $R3c$ ) у ромбичну  $\beta\text{-BiFeO}_3$  фазу (П.Г.  $Pnma$ ) примећен је у узорцима допираним са 15 mol.%. Праћена је промена параметара решетке,  $a_h$  и  $c_h$ , и релативна промена запремине јединичне ћелије,  $(V-V_0)/V_0$ , са допирањем. Јединична ћелија се скраћује дуж  $[001]$  правца ( $c_h$  се смањује) на скоро исти начин за исти степен супституције,  $z$ , без обзира на врсту катјона ( $\text{La}^{3+}$  и/или  $\text{Eu}^{3+}$ ). Приметно је и линеарно смањење параметра решетке  $a_h$ , али је оно одређено типом катјона. Највеће смањење запремине јединичне ћелије испољено је у керамици бизмут-ферита допираној са 15 mol% еуропијума. Допирање јонима лантана мање утиче на смањење средње величине кристалита керамике бизмут ферита, него допирање јонима еуропијума. Снимљени XPS спектри су доказали присуство јона  $\text{Bi}^{3+}$ ,  $\text{Fe}^{3+}/\text{Fe}^{2+}$ , као и ваканција кисеоника у кристалној решетки узорака. Допирање лантаном и еуропијумом у концентрацијама  $x = 0,10$  и  $y = 0,10$  довело је до смањења концентрације ваканција кисеоника.

## XRD AND XPS ANALYSIS OF BISMUTH FERRITE CERAMICS DOPED WITH LANTHANUM AND EUROPIUM

**Danijela Luković Golić**<sup>a</sup>  <https://orcid.org/0000-0003-0860-3925>,

**Nataša Jović Orsini**<sup>b</sup>  <https://orcid.org/0000-0003-1613-3361>,

**Aleksandar Radojković**<sup>a</sup>  <https://orcid.org/0000-0003-3319-1280>,

**Nenad Nikolić**<sup>a</sup>  <https://orcid.org/0000-0002-5730-7391>,

**Milutin Ivanović**<sup>b</sup>  <https://orcid.org/0000-0001-8733-9258>

<sup>a</sup> *Institute for Multidisciplinary Research, Belgrade, University of Belgrade, Serbia;*

<sup>b</sup> *VINČA Institute of Nuclear Sciences - National Institute of the Republic of Serbia, University of Belgrade, Belgrade, Serbia*

e-mail: [natasaj@vin.bg.ac.rs](mailto:natasaj@vin.bg.ac.rs)

Here, we presented the results of X-ray diffraction (XRD) and X-ray photoelectron spectroscopy (XPS) analysis of bismuth ferrite ( $\text{BiFeO}_3$ ) ceramics doped with lanthanum and europium. A series of samples with the expected stoichiometry  $\text{Bi}_{1-z}\text{La}_x\text{Eu}_y\text{FeO}_3$  ( $z = x + y$ ) were obtained after doping with different concentrations of lanthanum ( $x = 0.05, 0.10$  or  $0.15$ ), europium ( $y = 0.05, 0.10$  or  $0.15$ ) and both, La and Eu, ( $x = y = 0.025, 0.05$  or  $0.075$ ).

The crystal structure of the samples has been refined in  $R3c$  space group, using XRD data and the *Fullprof* and *SmartLab Studio* (Rigaku Co.) tools. The phase transition from the rhombohedral (S.G.  $R3c$ ) to the orthorhombic  $\beta$ - $\text{BiFeO}_3$  phase (S.G.  $Pnma$ ) has been observed in the samples doped with 15 mol%. Evolution of the unit cell parameters,  $a_h$  and  $c_h$ , and relative unit cell volume changes  $(V-V_0)/V_0$  were followed upon doping relative to the unsubstituted  $\text{BiFeO}_3$ . The unit cell is shortened along  $[001]$  direction ( $c_h$  was decreased) in almost the same way, for the same degree of substitution ( $z = x + y$ ), regardless of the type of substitutional cations ( $\text{La}^{3+}$  and/or  $\text{Eu}^{3+}$ ). The linear decrease of the unit cell parameter  $a_h$  is also found, but its decreasing rate is determined by the cation type. The highest decrease in the unit cell volume was observed in the bismuth ferrite doped with 15 mol%  $\text{Eu}^{3+}$ . In addition, the lanthanum doping had a little less effect on the reduction of the average crystallite size of bismuth ferrite ceramics than doping with europium ions. XPS spectra showed the presence of  $\text{Bi}^{3+}$ ,  $\text{Fe}^{3+}/\text{Fe}^{2+}$ , as well as oxygen vacancies in the crystal lattice of the samples. Doping with 10 mol% lanthanum ions or 10 mol% europium ions led to a decrease in the concentration of oxygen vacancies in their crystal lattices.

## СИНТЕЗА И КАРАКТЕРИЗАЦИЈА КОМПЛЕКСА Cd(II) СА ХИДРАЗОНИЛ-1,3-ХАЛКОГЕНАЗОЛИМА

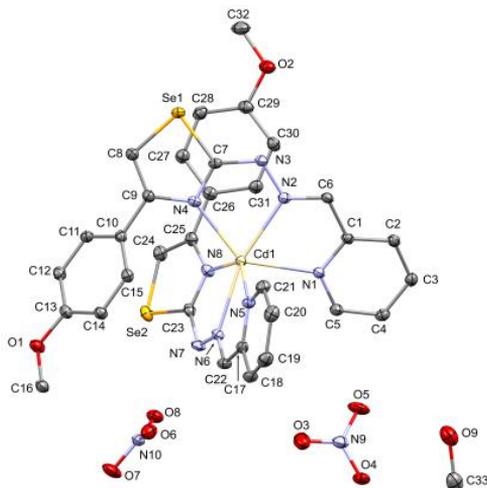
**Сања Б. Коканов**<sup>a</sup>  <https://orcid.org/0000-0001-6817-7409>,  
**Александар Вишњевац**<sup>b</sup>  <https://orcid.org/0000-0002-4382-6908>,  
**Тамара Тодоровић**<sup>a</sup>  <https://orcid.org/0000-0002-7740-3639>,  
**Ненад Филиповић**<sup>b</sup>  <https://orcid.org/0000-0003-2982-5324>

<sup>a</sup> Универзитет у Београду – Хемијски факултет, Београд, Србија; <sup>b</sup> Завод за физичку хемију, Институт Руђер Бошковић, Загреб, Хрватска; <sup>c</sup> Универзитет у Београду – Пољопривредни факултет, Београд, Србија.

имејл: markovics@chem.bg.ac.rs

Синтетисани су и окарактерисани нови комплекси кадмијума(II), [Cd(HLSe<sup>2</sup>)<sub>2</sub>](NO<sub>3</sub>)<sub>2</sub>·MeOH (**2–Se**, **Слика 1**) и [Cd(HLS<sup>2</sup>)<sub>2</sub>](NO<sub>3</sub>)<sub>2</sub>·H<sub>2</sub>O (**2–S**, **Слика 2**), са (1,3-селеназол-2-ил)хидразоном и његовим сумпорним аналогом.

Оба комплекса кристалишу у моноклиничној *P*2<sub>1</sub>/*n* просторној групи. Координациона сфера око централног јона метала код оба комплекса веома је слична. Лиганди су координовани за јон метала тридентатно преко атома азота из пиридинског, иминског и селеназоловог (**2–Se**) односно тиазоловог прстена (**2–S**). Одступање од правилне октаедарске геометрије може се приписати ограничењима услед координације лиганата. Како би се детаљно објаснила кристална паковања израчунате су Хиршфелдове површине и 2Д псеудосиметрични графички прикази отиска прста. Кристално паковање оба комплекса формира се помоћу различитих водоничних веза које се успостављају између комплексног катјона и нитрат-јона као и између комплексног катјона и молекула растварача (метанола или воде).



**Слика 1.** ORTEP приказ молекулске структуре комплекса **2–Se**. Термални елипсоиди су приказани са 30% вероватноће. Атоми водоника су изостављени због прегледности.

**Figure 1.** ORTEP drawing of the molecular structure of **2–Se**. Displacement ellipsoids are shown at 30% probability level. Hydrogen atoms are omitted for clarity.

## SYNTHESIS AND CHARACTERIZATION OF COMPLEXES Cd(II) WITH HYDRAZONYL-1,3-CHALCOGENAZOLES

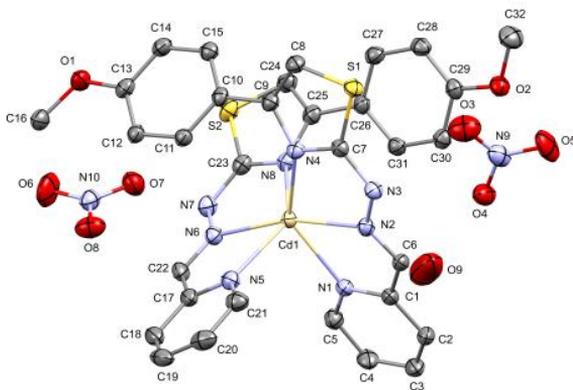
**Sanja B. Kokanov**<sup>a</sup>  <https://orcid.org/0000-0001-6817-7409>,  
**Aleksandar Višnjevac**<sup>b</sup>  <https://orcid.org/0000-0002-4382-6908>,  
**Tamara Todorović**<sup>a</sup>  <https://orcid.org/0000-0002-7740-3639>,  
**Nenad Filipović**<sup>c</sup>  <https://orcid.org/0000-0003-2982-5324>

<sup>a</sup>University of Belgrade – Faculty of Chemistry, Belgrade, Serbia; <sup>b</sup>Division of Physical Chemistry, Institute Ruđer Bošković, Zagreb, Croatia; <sup>c</sup>University of Belgrade – Faculty of Agriculture, Belgrade, Serbia.

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

New cadmium(II) complexes with (1,3-selenazol-2-yl)hydrazone and its sulfur analogue, [Cd(HLSe<sub>2</sub>)<sub>2</sub>](NO<sub>3</sub>)<sub>2</sub>·MeOH (**2–Se**, **Figure 1**) and [Cd(HLS<sub>2</sub>)<sub>2</sub>](NO<sub>3</sub>)<sub>2</sub>·H<sub>2</sub>O (**2–S**, **Figure 2**), were synthesized and characterized.

Both complexes crystallize in the monoclinic  $P2_1/n$  space group. The coordination sphere around central metal ion in both complexes is very similar. The ligands are *NNN* tridentately coordinated to the metal ion *via* nitrogen atoms from pyridine, imine and selenazole (**2–Se**) or thiazole (**2–S**) ring. The angular distortion from the regular octahedral geometry can be attributed to the constraints imposed by the ligands coordination. For analysis of crystal packing Hirshfield surfaces and 2D pseudosymmetric fingerprint plots were calculated. The crystal packing of both complexes is formed by different hydrogen bonds between the complex cation and nitrate anion as well as between the complex cation and solvent molecule (methanol or water).



**Figure 2.** ORTEP drawing of the molecular structure of **2–S**. Displacement ellipsoids are shown at 30% probability level. Hydrogen atoms are omitted for clarity.

**Слика 2.** ORTEP приказ молекулске структуре комплекса **2–S**. Термални елипсоиди су приказани са 30% вероватноће. Атоми водоника су изостављени због прегледности.

## ПОРЕЂЕЊЕ ЕЛЕКТРОСТАТИЧКИХ ПОТЕНЦИЈАЛА У КРИТИЧНИМ ТАЧКАМА ЗА РАЗЛИЧИТЕ КРИСТАЛНЕ СТРУКТУРЕ ВИСОКОЕНЕРГЕТСКИХ МАТЕРИЈАЛА

Данијела С. Кретић<sup>a</sup>  <https://orcid.org/0000-0002-8695-3958>,

Весна Б. Медаковић<sup>a</sup>  <https://orcid.org/0000-0001-9022-3168>,

Душан Ж. Вељковић<sup>a</sup>  <https://orcid.org/0000-0002-1382-8785>

<sup>a</sup> *Универзитет у Београду - Хемијски факултет, Београд, Србија*  
имејл: danijela@chem.bg.ac.rs

Претходна истраживања су открила да позитивни електростатички потенцијал у централном делу молекуларне површине представља поуздан показатељ осетљивости високоенергетских материјала ка детонацији [1]. Међутим, мале варијације у синтези кристала могу да доведу до настајања различитих кристалних структура и мањих геометријских разлика које могу утицати на вредности електростатичког потенцијала на молекуларној површини [2]. У овом истраживању, израчунавали смо и поредили вредности позитивног електростатичког потенцијала на критичним тачкама у центру пет класичних високоенергетских молекула користећи геометрије извучене из различитих кристалних структура и теоријски оптимизованих геометрија [2]. Резултати су показали одлично слагање електростатичког потенцијала у критичној тачки у центру теоријски оптимизоване геометрије 1,3,5-тринитробензена и геометрије за кристалну структуру истог једињења која у Кембричкој структурној бази података има рефкод TNBENZ10 (израчуната девијација износи 0,35%). Додатно, уочили смо слично слагање између резултата за теоријски оптимизовану геометрију 2,4,6-тринитротолуена и за геометрију кристалне структуре чији је рефкод у овој бази података ZZZMUC06 (израчуната девијација је мања од 0,01%). Додатно, резултати проказују значајну девијацију у електростатичком потенцијалу за кристалне структуре истог једињења чији су рефкодови ZZZMUC01 и ZZZMUC05. Ово истраживање истиче значај пажљивог одабира података како би се избегле могуће грешке у даљим предвиђањима и изучавањима детонационих својстава високоенергетских молекула.

[1] P. Politzer *et al.*, *Cent. Eur. J. Energetic Mater.* **10** (2013) 305

[2] D. S. Kretić *et al.*, *Crystals* **12** (2022) 1455.

*Захвалница:* Овај рад је подржан од стране Фонда за науку Републике Србије, PROMIS, #6066886, CD-HEM. Овај рад је подржан од стране Министарства науке, технолошког развоја и иновација Републике Србије (Број уговора: 451-03-66/2024-03/200168).

## COMPARING ELECTROSTATIC POTENTIAL VARIATIONS IN CRITICAL POINTS FOR DIFFERENT CRYSTAL STRUCTURES OF HIGH-ENERGY MATERIALS

**Danijela S. Kretić**<sup>a</sup>  <https://orcid.org/0000-0002-8695-3958>,  
**Vesna B. Medaković**<sup>a</sup>  <https://orcid.org/0000-0001-9022-3168>,  
**Dušan Ž. Veljković**<sup>a</sup>  <https://orcid.org/0000-0002-1382-8785>

<sup>a</sup> *University of Belgrade – Faculty of Chemistry, Belgrade, Serbia*  
e-mail: danijela@chem.bg.ac.rs

Previous studies revealed that positive electrostatic potential in the central region of the molecular surface is a reliable indicator of the sensitivity of high-energy materials [1]. Nevertheless, subtle variations in crystal synthesis led to different crystal structures and minor geometric differences that may impact electrostatic potential values on the molecular surface [2]. In this study, we computed and compared positive electrostatic potential values at the critical points in the centers of five classical high-energy molecules using geometries extracted from various crystal structures and theoretically optimized geometries [2]. The results showed excellent agreement between the electrostatic potential at the critical point in the center of the computationally optimized geometry of 1,3,5-trinitrobenzene and the crystal structure fragment with refcode entry TNBENZ10 in the Cambridge Structural Database (calculated deviation was 0.35%). Furthermore, we observed similar agreement between these results for the computationally optimized geometry and the crystal structure fragment of 2,4,6-trinitrotoluene with the refcode entry ZZZMUC06 in the same database (calculated deviation was less than 0.01%). Additionally, the results showed significant deviations in electrostatic potential values for the crystal structures of the same compound with the refcode entries ZZZMUC01 and ZZZMUC05. This study presents the significance of careful data selection in order to avoid potential calculation errors in further predictions and studies of the detonation properties of high-energy molecules.

- [1] P. Politzer *et al.*, *Cent. Eur. J. Energetic Mater.* **10** (2013) 305  
[2] D. S. Kretić *et al.*, *Crystals* **12** (2022) 1455.

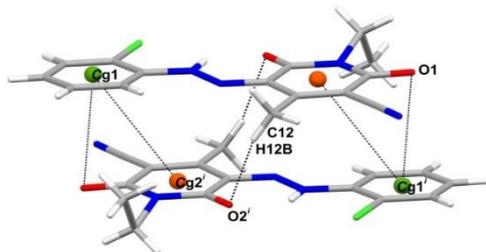
*Acknowledgement:* This research was supported by the Science Fund of the Republic of Serbia, PROMIS, #6066886, CD-HEM. This work is supported by the Ministry of Science, Technological Development and Innovation of the Republic of Serbia (Contract numbers: 451-03-66/2024-03/200168).

## АНАЛИЗА КРИСТАЛНОГ ПАКОВАЊА ХЛОРО-ДЕРИВАТА АЗО ПИРИДОНСКЕ БОЈЕ

**Јелена Лађаревић**<sup>a</sup>  <https://orcid.org/0000-0002-5554-7295>,  
**Лидија Радовановић**<sup>b</sup>  <https://orcid.org/0000-0002-7505-6290>,  
**Александра Машуловић**<sup>b</sup>  <https://orcid.org/0000-0002-5279-7694>,  
**Немања Тришовић**<sup>a</sup>  <https://orcid.org/0000-0002-9231-4810>,  
**Жељко Витник**<sup>c</sup>  <https://orcid.org/0000-0003-0276-9238>,  
**Јелена Роган**<sup>a</sup>  <https://orcid.org/0000-0002-4147-5251>,  
**Душан Мијин**<sup>a</sup>  <https://orcid.org/0000-0001-5691-2971>

<sup>a</sup> Универзитет у Београду, Технолошко-металурички факултет, Београд;  
<sup>b</sup> Универзитет у Београду, Иновациони центар Технолошко-металуришког факултета, Београд, <sup>c</sup> Универзитет у Београду, Институт за хемију, технологију и металургију - Институт од националног значаја за Републику Србију, Београд  
 имејл: jmirkovic@tmf.bg.ac.rs

Рендгенска структурна анализа испитиване азо боје је показала да боја кристалише у триклиничној просторној групи  $P\bar{1}$  ( $Z = 2$ ) у облику хидразон таутомера. Енергија кристалне решетке је израчуната и разматрана кроз доприносе различитих енергија укупној енергији. Кристално паковање боје одређено је формирањем супротно оријентисаних паралелних ланаца. Највећи допринос укупној енергији кристалне решетке потиче од две различите  $\pi$ - $\pi$  стекинг интеракције између структурних сегмената који граде слојеве. Једна од њих је стабилизована  $C-H\cdots O$  и  $lp\cdots\pi$  интеракцијама са укупном енергијом од  $-68,1 \text{ kJ mol}^{-1}$  (Слика 1), док је друга ојачана  $C-H\cdots Cl$  интеракцијама ( $-57,1 \text{ kJ mol}^{-1}$ ). Између слојева постоје  $C-H\cdots N$  и  $C-H\cdots O$  интеракције укупне енергије  $-28,9 \text{ kJ mol}^{-1}$ . Ланци се формирају посредством  $C-H\cdots N$  интеракција ( $-19,7 \text{ kJ mol}^{-1}$ ) дуж  $c$ -осе и повезују се у траке (Слика 2) помоћу халогених веза ( $Cl\cdots O$ ) са енергијом од  $-20,2 \text{ kJ mol}^{-1}$  и  $C-H\cdots O$  интеракцијама ( $-16,1 \text{ kJ mol}^{-1}$ ). Траке даље граде слојеве помоћу  $C-H\cdots N$  интеракција ( $-26,2 \text{ kJ mol}^{-1}$ ).



Слика 2 Структурни сегмент са највећим енергетским доприносом;  
**Figure 1.** The structural segment with the largest energy contribution  
 ( $i$ ):  $-x+1, -y+1, -z+1$ .

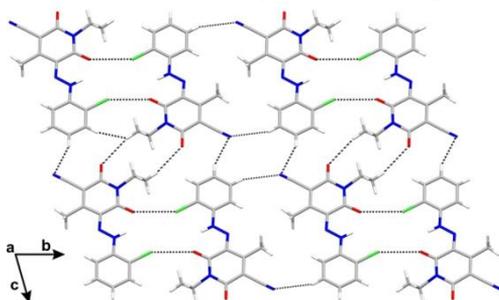
**Захвалница:** Рад је финансирао Министарство науке, технолошког развоја и иновација Републике Србије (бројеви уговора: 451-03-65/2024-03/200135, 451-03-66/2024-03/200287 и 451-03-66/2024-03/200026).

## ANALYSIS OF THE CRYSTAL PACKING OF AZO PYRIDONE DYE BEARING CHLORINE ATOM

Jelena Ladarević <sup>a</sup>  <https://orcid.org/0000-0002-5554-7295>,  
 Lidija Radovanović <sup>b</sup>  <https://orcid.org/0000-0002-7505-6290>,  
 Aleksandra Mašulović <sup>b</sup>  <https://orcid.org/0000-0002-5279-7694>,  
 Nemanja Trišović <sup>a</sup>  <https://orcid.org/0000-0002-9231-4810>,  
 Željko Vitnik <sup>c</sup>  <https://orcid.org/0000-0003-0276-9238>,  
 Jelena Rogan <sup>a</sup>  <https://orcid.org/0000-0002-4147-5251>,  
 Dušan Mijin <sup>a</sup>  <https://orcid.org/0000-0001-5691-2971>

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

X-ray diffraction measurements of the investigated dye revealed that the dye crystallizes in the triclinic space group  $P\bar{1}$  with  $Z = 2$  adopting hydrazone tautomeric form. The lattice energy of the compound is calculated and partitioned into Coulombic, polarisation, dispersion, and repulsion contributions. The packing of the dye is controlled by formation of the parallel layers oriented in opposite directions. The highest energy contributions are observed for structural segments involving two diverse  $\pi$ - $\pi$  stacking interactions between



**Figure 2** Supramolecular layer of the azo dye.

Слика 2. Супрамолекуларски слој азо боје.

layers. One  $\pi$ - $\pi$  interaction is strengthened by C-H...O and  $lp$ ... $\pi$  interactions with total energy of  $-68.1 \text{ kJ mol}^{-1}$  (**Figure 1**), while the other one is supported by C-H...Cl interaction ( $-57.1 \text{ kJ mol}^{-1}$ ). Interactions between layers are also established via C-H...N and C-H...O interactions ( $-28.9 \text{ kJ mol}^{-1}$ ). The layers themselves are consisted of the chains formed by C-H...N interactions along  $c$ -axis ( $-19.7 \text{ kJ mol}^{-1}$ ). The chains are assembled into the ribbons consisting of inversion

related dimers by halogen bonds (Cl...O) and C-H...O interactions (**Figure 2**) with energies of  $-20.2 \text{ kJ mol}^{-1}$  and  $-16.1 \text{ kJ mol}^{-1}$ , respectively. The ribbons in the layers are held together by C-H...N interactions ( $-26.2 \text{ kJ mol}^{-1}$ ).

*Acknowledgement:* This work was supported by the Ministry of Science, Technological Development and Innovation of the Republic of Serbia (Contract No. 451-03-65/2024-03/200135, 451-03-66/2024-03/200287 and 451-03-66/2024-03/200026).

## СТРУКТУРНА АНАЛИЗА СПИРОХИДАНТОИНА СА УВРНУТОМ АМИДНОМ ВЕЗОМ КАО АНТИКАНЦЕРСКИХ АГЕНАСА

**Анита Јлазић**<sup>а</sup>  <https://orcid.org/0000-0003-4855-3782>,

**Нађа Грозданић Станисављевић**<sup>б</sup>  <https://orcid.org/0000-0002-2543-0838>,

**Лидија Радовановић**<sup>а</sup>  <https://orcid.org/0000-0002-7505-6290>,

**Јелена Роган**<sup>в</sup>  <https://orcid.org/0000-0002-4147-5251>,

**Горан Јањић**<sup>г</sup>  <https://orcid.org/0000-0002-4138-2637>,

**Ивана Ђорђевић**<sup>г</sup>  <https://orcid.org/0000-0003-0336-4806>,

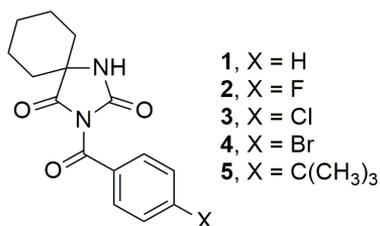
**Немања Тришовић**<sup>в</sup>  <https://orcid.org/0000-0002-9231-4810>

<sup>а</sup> Иновациони центар Технолошко-металуричког факултета, Београд, Србија;

<sup>б</sup> Институт за онкологију и радиологију Србије, Београд, Србија; <sup>в</sup> Универзитет у Београду, Технолошко-металурички факултет, Београд, Србија; <sup>г</sup> Универзитет у Београду, Институт за хемију, технологију и металургију – Институт од националног значаја за Републику Србију, Београд, Србија.

имејл: alazic@tmf.bg.ac.rs

Пет деривата спирохидантоина је синтетисано (Слика 1) и проучавано рендгенском структурном анализом и квантно-хемијским прорачунима. Једињења 1–3 и 5 кристалишу као *sin*-конформери у односу на уреични део (N1–C2(=O)–N3) хидантоинског прстена, док једињење 4 кристалише као *anti*-конформер. Сва једињења поседују егзоцикличну амидну везу која није планарна услед њеног увртања и пирамидализације атома N3 (Слика 2). Једињење 2 са  $\tau = 86,9^\circ$  (97% од теоријског максимума) садржи једну од највише увртнутих амидних веза које су до сада описане у литератури. Цитотоксичност синтетисаних једињења проучавана је према одабраним ћелијским линијама канцера, као и према ћелијској линији нормалног хуманог фибробласта пореклом из плућа (MRC5). Показано је да су једињења са умерено увртном амидном везом и липофилним супституентима најактивнија у оквиру проучаване серије.



Слика 1. Молекулске структуре проучаваних једињења

*Захвалница:* Аутори се захваљују Министарству науке, технолошког развоја и иновација Републике Србије на пруженој финансијској помоћи (бројеви уговора 451-03-66/2024-03/200287, 451-03-66/2024-03/200043, 451-03-65/2024-03/200135 и 451-03-66/2024-03/200026).

## STRUCTURAL ANALYSIS OF TWISTED AMIDES BASED ON THE SPIROHYDANTOIN SCAFFOLD WITH THE ANTICANCER ACTIVITY

**Anita Lazić**<sup>a</sup>  <https://orcid.org/0000-0003-4855-3782>,

**Nada Grozdanić Stanisavljević**<sup>b</sup>  <https://orcid.org/0000-0002-2543-0838>,

**Lidija Radovanović**<sup>a</sup>  <https://orcid.org/0000-0002-7505-6290>,

**Jelena Rogan**<sup>c</sup>  <https://orcid.org/0000-0002-4147-5251>,

**Goran Janjić**<sup>d</sup>  <https://orcid.org/0000-0002-4138-2637>,

**Ivana Đorđević**<sup>d</sup>  <https://orcid.org/0000-0003-0336-4806>,

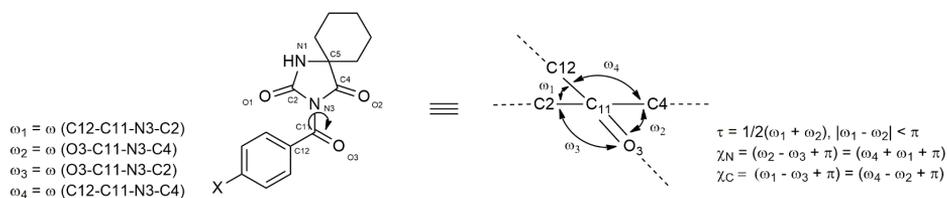
**Nemanja Trišović**<sup>c</sup>  <https://orcid.org/0000-0002-9231-4810>

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

<sup>b</sup> Institute for Oncology and Radiology of Serbia, Belgrade, Serbia; <sup>c</sup> University of Belgrade, Faculty of Technology and Metallurgy, Belgrade, Serbia; <sup>d</sup> University of Belgrade, Institute of Chemistry, Technology and Metallurgy – National Institute of the Republic of Serbia, Belgrade, Serbia;

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

Five spirohydantoin derivatives were synthesized and analyzed by single crystal X-ray diffraction and DFT calculations (**Figure 1**). Compounds **1–3** and **5** crystallize as a syn conformation with respect to the ureic part (N1–C2(=O)–N3) of the hydantoin moiety, while compound **4** crystallize as an anti conformation. All compounds feature a distorted exocyclic amide bond that results from the twisting and pyramidalization of the N3 atom (**Figure 2**). Compound **2** with  $\tau = 86.9^\circ$  (97% of theoretical maximum) contains one of the most twisted amide bonds reported so far. The anticancer effects of the investigated compounds were evaluated against selected human cancer cell lines, as well as human normal lung fibroblasts (MRC5) cell lines. It appears that moderately distorted twisted amides with highly lipophilic substituents are the most potent within the series.



**Figure 2.** Winkler–Dunitz distortion parameters of the N3–C11(=O3) amide bond.

**Acknowledgement:** This work was supported by the Ministry of Science, Technological Development and Innovation of the Republic of Serbia (Contract Nos 451-03-66/2024-03/200287, 451-03-66/2024-03/200043, 451-03-65/2024-03/200135 and 451-03-66/2024-03/200026).

## ПРОУЧАВАЊЕ УТИЦАЈА ИСТОРИЈЕ РАСТА НА ПАРАМЕТРЕ РАСТА КРИСТАЛА КАЛИЈУМ-ДИХИДРОГЕНФОСФАТА

**Биљана Максимовић**<sup>a</sup>  <https://orcid.org/0000-0001-6998-9425>,

**Бранислава Вучетић**<sup>a</sup>  <https://orcid.org/0000-0001-9621-0376>,

**Андријана Жекић**<sup>a</sup>  <https://orcid.org/0000-0001-7720-5846>,

**Милица Милојевић**<sup>a</sup>  <https://orcid.org/0000-0001-8535-4788>

<sup>a</sup> Физички факултет, Универзитет у Београду, Београд, Србија  
имејл: biljana.radisa@ff.bg.ac.rs

Кристали калијум-дихидрогенфосфата (KDP) користе се као оптички модулатори и конвертори фреквенција у ласерским системима велике снаге. За добијање кристала високог квалитета и постизање оптичке хомогености брзина раста има значајну улогу. У овом раду су представљени резултати проучавања раста {100} пљосни KDP кристала из водених раствора припремљених од супстанце чистоће 99% растворене у дејонизованој води. Кристали су расли у опсегу пресићења (6.2–14.7)% из раствора засићених на  $T_0 = (31.0 \pm 0.1)^\circ\text{C}$ . Урађена су два типа експеримената: 1.) са снижавањем ( $\sigma_D$ ) и 2.) са повећавањем пресићења раствора ( $\sigma_I$ ). Зависност брзина раста {100} пљосни од пресићења фитована је једначином која описује модел површинске дифузије раста кристала [1]. У **табели 1** дате су процењене вредности односа средњег слободног пута изграђивачке јединице на пљосни кристала и константе решетке  $\lambda_s/a$ , коефицијента померања степеника  $\beta_1$  и активационе енергије потребне за улазак изграђивачке јединице на пљосан кристала  $\Delta G_{\text{deh}}$ .

**Табела 1.** Процењене вредности параметара раста.

	$\sigma_D$	$\sigma_I$
$\lambda_s/a$	$(2,0 \pm 0,1)$	$(1,84 \pm 0,09)$
$\beta_1$	$(3,56 \pm 0,17) \cdot 10^{-5} \text{ m/s}$	$(3,19 \pm 0,15) \cdot 10^{-5} \text{ m/s}$
$\Delta G_{\text{deh}}$	$(47,91 \pm 0,16) \text{ kJ/mol}$	$(50,67 \pm 0,17) \text{ kJ/mol}$

Поређећи добијене параметре раста може се закључити да начин промене пресићења раствора утиче на коефицијент померања степеника  $\beta_1$ , док се остали параметри могу сматрати истим у границама грешке. Према моделу површинске дифузије [1], већа вредност  $\beta_1$  има за последицу већу брзину раста кристала нуклеисаних на већем пресићењу.

- [1] W. K. Burton, *et al.*, *Philos. Trans. Royal Soc. A, Math. Phys. Eng. Sci.* **243(866)** (1951) 299.

## STUDY OF THE INFLUENCE OF THE GROWTH HISTORY ON THE GROWTH PARAMETERS OF POTASSIUM DIHYDROGEN PHOSPHATE (KDP) CRYSTALS

**Biljana Maksimović**<sup>a</sup>  <https://orcid.org/0000-0001-6998-9425>,

**Branislava Vučetić**<sup>a</sup>  <https://orcid.org/0000-0001-9621-0376>,

**Andrijana Žekić**<sup>a</sup>  <https://orcid.org/0000-0001-7720-5846>,

**Milica Milojević**<sup>a</sup>  <https://orcid.org/0000-0001-8535-4788>

<sup>a</sup> Faculty of Physics, University of Belgrade, Belgrade, Serbia

e-mail: biljana.radisa@ff.bg.ac.rs

Potassium dihydrogen phosphate (KDP) crystals are used as optical modulators and frequency converters in high-power laser systems. For obtaining high-quality crystals and achieving optical homogeneity, the growth rate plays a significant role. In this paper, results of the study of the influence of the growth history on the growth parameters of the {100} faces of KDP crystals from aqueous solutions prepared from 99% of purity substance dissolved in deionized water are presented. The observed crystals were grown in the supersaturation range of (6.2–14.7)% from solutions saturated at  $T_0 = (31.0 \pm 0.1)^\circ\text{C}$ . Two types of experiments were performed: 1.) when the supersaturation of the solution decreases ( $\sigma_D$ ) and 2.) when it increases ( $\sigma_I$ ). The supersaturation dependence of the {100} face growth rate was fitted to the surface diffusion model [1]. **Table 1** shows the values of the ratio of the surface diffusion distance for the growth unit and the lattice constant  $\lambda_s/a$ , the step displacement coefficient  $\beta_1$ , and the activation energy required by the growth unit to enter the surface layer  $\Delta G_{\text{deh}}$ .

**Table 1.** Calculated growth parameter values.

	$\sigma_D$	$\sigma_I$
$\lambda_s/a$	$(2.0 \pm 0.1)$	$(1.84 \pm 0.09)$
$\beta_1$	$(3.56 \pm 0.17) \cdot 10^{-5}$ m/s	$(3.19 \pm 0.15) \cdot 10^{-5}$ m/s
$\Delta G_{\text{deh}}$	$(47.91 \pm 0.16)$ kJ/mol	$(50.67 \pm 0.17)$ kJ/mol

It can be seen from Table 1 that the way of supersaturation changes affects the step displacement coefficient  $\beta_1$ , while the other parameters are the same within the error limits. According to the surface diffusion model [1], higher value of  $\beta_1$  as a consequence gives faces that grow at higher rates, nucleated on higher supersaturation.

- [1] W. K. Burton, *et al.*, *Philos. Trans. Royal Soc. A, Math. Phys. Eng. Sci.* **243(866)** (1951) 299.

## КРИСТАЛНА СТРУКТУРА ТРИНУКЛЕАРНОГ ЦИНК(II)– АЦЕТАТО КОМПЛЕКСА СА ЛИГАНДОМ НА БАЗИ АЗОПИРИДИНА

**Александра Машуловић**<sup>a</sup>  <https://orcid.org/0000-0002-5279-7694>,

**Кристина Гак Симић**<sup>a</sup>  <https://orcid.org/0000-0003-3928-9967>,

**Ивана Ђорђевић**<sup>b</sup>  <https://orcid.org/0000-0001-5981-9385>,

**Лидија Радовановић**<sup>a</sup>  <https://orcid.org/0000-0002-7505-6290>,

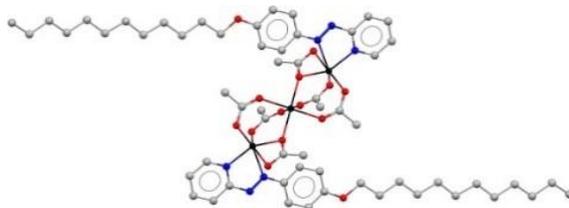
**Franck Camerel**<sup>b</sup>  <https://orcid.org/0000-0003-3380-709X>,

**Olivier Jeannin**<sup>b</sup>  <https://orcid.org/0000-0002-1411-5656>,

**Немања Тришовић**<sup>c</sup>  <https://orcid.org/0000-0002-9231-4810>

<sup>a</sup> Иновациони Центар Технолошко-метлуришког факултета у Београду, Београд, Србија; <sup>b</sup> Универзитет у Београду, Институт за хемију технологију и металургију, Институт од националног значаја Републике Србије, Београд, Србија; <sup>c</sup> Универзитет у Рену, Рен, Француска; <sup>2</sup> Универзитет у Београду, Технолошко-металуришки факултет, Београд, Србија  
имејл: amasulovic@tmf.bg.ac.rs

Реакцијом 2-(4-додецилоксифенилазо)пиридина (L) са  $Zn(OAc)_2 \cdot 2H_2O$  (OAc = ацетат-јон) добијен је дискретни, центросиметрични, тринуклеарни комплекс, чија је формула  $[Zn_3(OAc)_6(L)_2]$ . Рендгенска структурна анализа показала је да комплекс кристалише у триклиничној просторној групи  $P\bar{1}$  са  $Z = 1$ . Комплекс се састоји из три атома Zn који су повезани преко шест мостовних ацетато-јона и са два хелатна L-лиганда (Слика 1). Атоми Zn, од којих атом Zn2 заузима специјални положај  $\bar{1}$ , јесу у деформисаном октаедарском окружењу. Структурни фрагменти повезани су C–H...O и  $\pi$ - $\pi$  интеракцијама у траке паралелне равни (6 6 16), док је супрамолекулско умрежавање постигнуто C–H...N и C–H... $\pi$  интеракцијама, као и хидрофобним интеракцијама између дугачких репова L-лиганда. Интермолекулске интеракције испитане су Хиршфелдовом анализом и анализом одговарајућих 2D отисака. C–H...O, C–H...N и C–H... $\pi$  интеракције и, нарочито, хидрофобне интеракције доминантно учествују у формирању и стабилизацији кристалне структуре.



**Слика 1.** Кристална структура комплекса  $[Zn_3(OAc)_6(L)_2]$ .

*Захвалница:* Рад је подржан од стране Министарства науке, технолошког развоја и иновација Републике Србије (Бр. 451-03-65/2024-03/200135; 451-03-66/2024-03/200287 и 451-03-66/2024-03/200026).

## CRYSTAL STRUCTURE OF A TRINUCLEAR ZINC(II)–ACETATO COMPLEX WITH AN AZOPYRIDINE-BASED LIGAND

**Aleksandra Mašulović**<sup>a</sup>  <https://orcid.org/0000-0002-5279-7694>,

**Kristina Gak Simić**<sup>a</sup>  <https://orcid.org/0000-0003-3928-9967>,

**Ivana Đorđević**<sup>b</sup>  <https://orcid.org/0000-0001-5981-9385>,

**Lidija Radovanović**<sup>a</sup>  <https://orcid.org/0000-0002-7505-6290>,

**Franck Camerel**<sup>c</sup>  <https://orcid.org/0000-0003-3380-709X>,

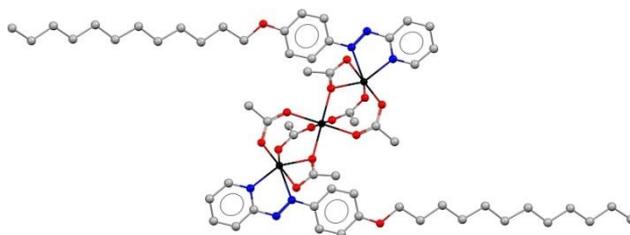
**Olivier Jeannin**<sup>c</sup>  <https://orcid.org/0000-0002-1411-5656>,

**Nemanja Trišović**<sup>d</sup>  <https://orcid.org/0000-0002-9231-4810>

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

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

Reaction of 2-(4-dodecyloxyphenylazo)pyridine (L) with  $\text{Zn}(\text{OAc})_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$  (OAc = acetate ion) yielded a discrete, centrosymmetric, trinuclear complex which formulae is  $[\text{Zn}_3(\text{OAc})_6(\text{L})_2]$ . X-ray analysis revealed that the complex crystallizes in triclinic  $P\bar{1}$  space group with  $Z = 1$ . The complex consists of three Zn atoms coordinated with six bridging acetato ions and two chelate L ligands (**Figure 1**). The Zn atoms, of which Zn2 occupies special position  $\bar{1}$ , are in a deformed octahedral environment. The structural fragments are connected *via* C–H $\cdots$ O and  $\pi$ – $\pi$  interactions into ribbons parallel to the plane (6 6 16), while supramolecular networking of the ribbons is achieved through C–H $\cdots$ N and C–H $\cdots$  $\pi$  interactions as well as hydrophobic interactions between long tails of the L ligand. Intermolecular interactions were investigated using the Hirshfeld surface analysis and 2D fingerprint analysis. C–H $\cdots$ O, C–H $\cdots$ N and C–H $\cdots$  $\pi$  interactions and, especially, hydrophobic interactions were confirmed as the source of an attraction within this crystal structure.



**Figure 1.** Crystal structure of complex  $[\text{Zn}_3(\text{OAc})_6(\text{L})_2]$ .

*Acknowledgement:* This work was supported by the Ministry of Science, Technological Development and Innovation of the Republic of Serbia (Contract No. 451-03-65/2024-03/200135; 451-03-66/2024-03/200287 and 451-03-66/2024-03/200026).

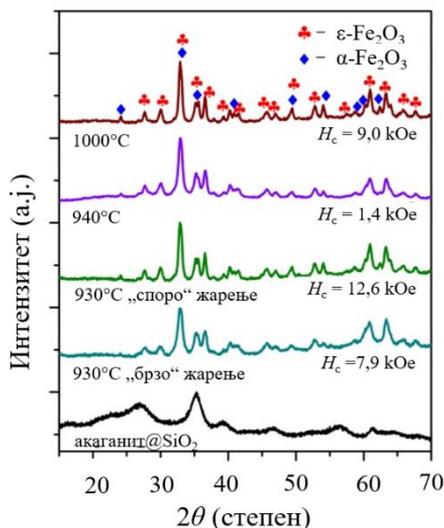
## ТОПЛОТНО ИНДУКОВАНО ФОРМИРАЊЕ $\epsilon$ - $\text{Fe}_2\text{O}_3$ ФАЗЕ ИЗ НАНОЧЕСТИЦА АКАГАНИТА

Мирјана М. Милић<sup>а</sup>  <https://orcid.org/0000-0002-0285-2819>,

Наташа Јовић Орсини<sup>а</sup>  <https://orcid.org/0000-0003-1613-3361>

<sup>а</sup> Институт за нуклеарне науке Винча - Институт од националног значаја за Републику Србију, Универзитет у Београду, Винча, Београд, Србија  
имејл: mikac@vin.bg.ac.rs

Епсилон фаза ( $\epsilon$ - $\text{Fe}_2\text{O}_3$ ), редак полиморф оксида гвожђа познат по својој великој магнетној коерцитивности на собној температури, представља погодан материјал за складиштење података високе густине и за заштиту од милиметарских електромагнетних таласа високе фреквенције. Постоји само у микро- и нано-форми, а његова припрема укључује термичку обраду током које је неопходно ограничити раст кристала. Ово се обично постиже инкапсулацијом полазног материјала у силиконску облогу или матрицу.



У овом раду припремили смо четири узорка који садрже  $\epsilon$ - $\text{Fe}_2\text{O}_3$  полиморф. Узорци су добијени применом различитих протокола жарења наночестица акаганиџа ( $\beta$ - $\text{FeOOH}$ ) обложених силиком. Морфолошка, структурна и магнетна својства добијених узорака испитивана су применом различитих експерименталних техника. Трансмисионом електронском микроскопијом (ТЕМ) утврђено је да су честице приближно сферног облика и средње величине,  $D_{\text{ТЕМ}}$ , од 13 nm до 23 nm. Рендгенска дифрактометрија (XRD) и Мезбауерова спектроскопија показали су да главну фазу испитиваних узорака чини  $\epsilon$ - $\text{Fe}_2\text{O}_3$  фаза (П. Г.  $Pna2_1$ ) док је  $\alpha$ - $\text{Fe}_2\text{O}_3$  фаза (П. Г.  $R-3c$ ) присутна у количини од 4–12 запреминских процената.

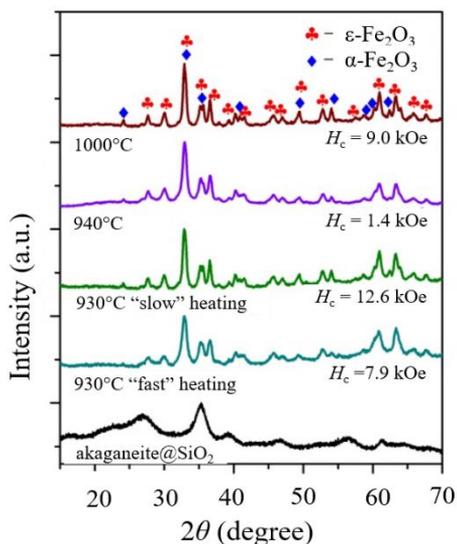
Вредности магнетизације измерене SQUID-ом (за максимално примењено спољашње магнетно поље  $H_{\text{ext}} = 50$  kOe) биле су у опсегу од 6,7 до 8,9 emu/g, док су се вредности коерцитивног поља,  $H_c$ , кретале од 1,4 kOe до 12,6 kOe. Највећа вредност  $H_c$  забележена је у узорку чије је жарење до 930 °C укључило већи број међукорака на различитим температурама.

## HEAT-INDUCED FORMATION OF $\epsilon$ -Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub> PHASE FROM SILICA COATED AKAGANEITE NANOPARTICLES

**Mirjana M. Milić**<sup>a</sup>  <https://orcid.org/0000-0002-0285-2819>,  
**Nataša Jović Orsini**<sup>a</sup>  <https://orcid.org/0000-0003-1613-3361>

<sup>a</sup> VINČA Institute of Nuclear Sciences – National Institute of the Republic of Serbia, University of Belgrade, Belgrade, Serbia  
 e-mail: mikac@vin.bg.ac.rs

Epsilon phase ( $\epsilon$ -Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub>), a rare iron oxide polymorph known for its large room-temperature magnetic coercivity, is seen as a promising material for high-density data storage and high-frequency millimeter electromagnetic wave shielding. It exists only in micro- and nano-sized forms, and its production requires limitation of the crystal growth during the thermal treatment. This is usually achieved by the encapsulation of starting material in silica shell or matrix.



In this work, we have prepared four samples containing  $\epsilon$ -Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub> polymorph starting from akaganeite ( $\beta$ -FeOOH) nanoparticles, which were coated by the silica and were subjected to the various heating protocols. Morphological, structural, and magnetic properties of these samples were characterized using different experimental techniques. Transmission electron microscopy (TEM) showed that the obtained particles were roughly spherical with average particle sizes,  $D_{TEM}$ , varying from 13 nm to 23 nm. X-ray diffractometry (XRD) and Mössbauer spectroscopy evidenced that all studied samples consisted mainly of the  $\epsilon$ -Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub> phase (orthorhombic, S. G.  $Pna2_1$ ) accompanied by 4–12 vol.% of the  $\alpha$ -Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub> phase (rhombohedral, S. G.  $R-3c$ ).

SQUID magnetometry showed that magnetizations achieved for the maximum external magnetic field applied of  $H_{ext} = 50$  kOe were in the range 6.7–8.9 emu/g, while the coercivity fields,  $H_c$ , ranged from 1.4 kOe to 12.6 kOe, with the highest one being achieved in the sample whose heating up to 930 °C involved several dwelling steps at different temperatures.

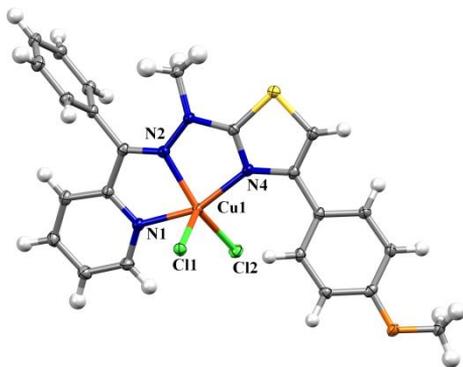
## КОМПЛЕКСИ Cu(II) СА ДИПИРИДИЛ И БЕНЗОИЛ-ПИРИДИН ХИДРАЗОНИЛ-ТИАЗОЛИМА

**Андреј Миливојац**<sup>a</sup>  <https://orcid.org/0009-0009-7123-6153>,  
**Александар Вишњевац**<sup>b</sup>  <https://orcid.org/0000-0002-4382-6908>,  
**Ненад Филиповић**<sup>a</sup>  <https://orcid.org/0000-0003-2982-5324>,  
**Тамара Годоровић**<sup>c</sup>  <https://orcid.org/0000-0002-7740-3639>

<sup>a</sup> Иновациони центар Хемијског факултета, Београд, Србија; <sup>b</sup> Институт Руђер Бошковић, Загреб, Хрватска; <sup>c</sup> Универзитет у Београду – Пољопривредни факултет, Београд, Србија; <sup>2</sup> Универзитет у Београду – Хемијски факултет, Београд, Србија

имејл: andrejm@chem.bg.ac.rs

У овом раду је представљена синтеза и карактеризација два комплекса Cu(II) са хидразонил-тиазолским лигандима, дериватима бензоилпиридина ( $L^{bp}$ ) и дипиридил кетона ( $HL^{dp}$ ). Комплекси су синтетисани директним реакцијама лиганата и  $CuCl_2 \cdot 2H_2O$ , а добијени су у облику монокристала те им је структура решена применом рендгенске структурне анализе. Комплекс  $[Cu(L^{bp})Cl_2]$  (**1**; **Слика 1**) кристалише у моноклиничној  $P2_1/c$  просторној групи, док комплекс  $[Cu(HL^{dp})Cl_2]$  (**2**; **Слика 2**) кристалише у ромбичној  $Pbca$  просторној групи. Молекулску структуру оба комплекса чине централни јон метала, један молекул лиганда координован  $NNN$  тридентатно преко пиридинског, иминског и тиазоловог атома азота, као и два хлоридна анијона. Геометрија око јона Cu(II) се може описати као веома дисторгована квадратно-пирамидална. Урађена је детаљна анализа кристалног паковања, као и типова и енергетске дистрибуције интермолекулских интеракција.



**Слика 1.** ORTEP приказ молекулске структуре комплекса **1**. Термални елипсоиди су приказани са 50 % вероватноће.

**Figure 1.** ORTEP drawing of molecular structure of **1**. Thermal ellipsoids are shown at 50 % probability level.

## Cu(II) COMPLEXES WITH DIPYRIDYL AND BENZOYL-PYRIDINE HYDRAZONYL-THIAZOLES

**Andrej Milivojac**<sup>a</sup>  <https://orcid.org/0009-0009-7123-6153>,

**Aleksandar Višnjevac**<sup>b</sup>  <https://orcid.org/0000-0002-4382-6908>,

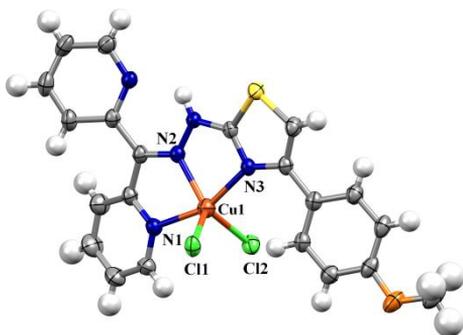
**Nenad Filipović**<sup>c</sup>  <https://orcid.org/0000-0003-2982-5324>,

**Tamara Todorović**<sup>d</sup>  <https://orcid.org/0000-0002-7740-3639>

<sup>a</sup> Innovative Centre of the Faculty of Chemistry, Belgrade, Serbia; <sup>b</sup> Institute Ruđer Bošković, Zagreb, Croatia; <sup>c</sup> University of Belgrade - Faculty of Agriculture, Belgrade, Serbia; <sup>d</sup> University of Belgrade - Faculty of Chemistry, Belgrade, Serbia.

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

This paper presents the synthesis and characterization of two Cu(II) complexes with hydrazonyl-thiazole ligands, derivatives of benzoylpyridine ( $L^{bp}$ ) and dipyridyl ketone ( $HL^{dp}$ ). The complexes were synthesized by direct reactions of the ligands and  $CuCl_2 \cdot 2H_2O$ . The complexes were obtained in the form of single crystals, and their structures were solved using X-ray structural analysis. The complex  $[Cu(L^{bp})Cl_2]$  (**1**, **Figure 1**) crystallizes in the monoclinic  $P2_1/c$  space group, while the complex  $[Cu(HL^{dp})Cl_2]$  (**2**, **Figure 2**) crystallizes in the orthorhombic  $Pbca$  space group. The molecular structure of both complexes consists of a central metal ion, one ligand molecule coordinated *NNN* tridentately *via* pyridine, imine and thiazole nitrogen atoms, as well as two chloride anions. The geometry around the Cu(II) ion can be described as a highly distorted square-pyramidal. A detailed analysis of the crystal packing, as well as the types and energy distribution of intermolecular interactions, was performed.



**Слика 2.** ORTEP приказ молекуларне структуре комплекса **2**. Термални елипсоиди су приказани са 50 % вероватноће.

**Figure 2.** ORTEP drawing of molecular structure of **2**. Thermal ellipsoids are shown at 50 % probability level.

## НАНОАНАТАС ДОПИРАН ЈОНИМА ПРЕЛАЗНИХ МЕТАЛА ЗА ПРИМЕНУ У ФОТОКАТАЛИЗИ И АДСОРПЦИЈИ

**Наталија Милојковић**<sup>a</sup>  <https://orcid.org/0000-0002-6112-6219>,  
**Бојана Симовић**<sup>b</sup>  <https://orcid.org/0000-0002-9407-155X>,  
**Александра Дапчевић**<sup>a</sup>  <https://orcid.org/0000-0001-7650-7156>

<sup>a</sup> Универзитет у Београду, Технолошко-металуришки факултет, Београд, Србија; <sup>b</sup> Универзитет у Београду, Институт за мултидисциплинарна истраживања, Београд, Србија  
имејл: nmilojkovic@tmf.bg.ac.rs

Титан(IV)-оксид се јавља у три кристалне модификације: тертрагоналном анатасу ( $I4_1/amd$ ) и рутилу ( $P4_2/mnm$ ) и ромбичном брукиту ( $Pbca$ ).  $TiO_2$  је добро познат материјал изузетних својстава која се могу побољшати допирањем. Циљ овог истраживања било је добијање  $TiO_2$  допираног јонима прелазних метала са бољим адсорпционим и фотокаталитичким својствима у односу на недопирано  $TiO_2$ . Недопирани  $TiO_2$  синтетисан је хидротермалним третманом на 120 °C током 12 h суспензије добијене хидролизом титан(IV)-изопророксида. Узорци  $TiO_2$  са 5 at.% допанта ( $TiO_2$ -Mn,  $TiO_2$ -Cu,  $TiO_2$ -V) добијени су под истим условима, уз додатак одговарајућег прекурсора титан(IV)-изопророксида: манган(II)-нитрата, бакар(II)-нитрата и ванадијум(V)-окситриизопророксида. Хидротермално добијени прахови су калцинисани на 400 °C током 1 h (400- $TiO_2$ , 400- $TiO_2$ -Mn, 400- $TiO_2$ -V, 400- $TiO_2$ -Cu). Фазни састав, величина кристалита и параметри јединичне ћелије узорака су одређени на основу података прикупљених рендгенском дифракцијом. Фотокаталитичка и адсорпциона својства испитана су кроз уклањање азо боје реактивно наранџасте 16.

Наноанатас изразито малих кристалита (7–12 nm) добијен је у свим узорцима, док је код узорака допираних манганом и бавром брукит био присутан у траговима. С обзиром на уочену промену параметара јединичне ћелије анатаса код некалцинисаних узорака ( $a = (3,7799(2)–3,7934(2)) \text{ \AA}$ ,  $c = (9,4936(7)–9,5157(6)) \text{ \AA}$ ) у поређењу са недопираним  $TiO_2$ , закључили смо да су се допанти уградили у структуру. Промена параметара јединичне ћелије је још уочљивија код узорака калцинисаних на 400 °C ( $a = (3,7772(2)–3,8092(3)) \text{ \AA}$ ,  $c = (9,4623(7)–9,5420(8)) \text{ \AA}$ ). Очекивано је да запремина јединичне ћелије анатаса зависи од величине допанта. Међутим, у нашем случају изузеци су  $TiO_2$ -Mn, 400- $TiO_2$ -Mn и 400- $TiO_2$ -V што указује да се Mn(II) ( $r = 0,670 \text{ \AA}$ ) вероватно оксидовао до Mn(IV) ( $r = 0,530 \text{ \AA}$ ) током хидротермалног третмана, док се V(V) ( $r = 0,540 \text{ \AA}$ ) редуковао до V(III) ( $r = 0,640 \text{ \AA}$ ) током калцинације.

Најбољу фотокаталитичку активност показао је узорак 400- $TiO_2$ , разградивши 98 % боје након 120 min у присуству симулиране сунчеве светлости, док је  $TiO_2$ -Cu демонстрирао најбољу адсорпциону моћ уклонивши чак 71 % боје.

## TRANSITION METAL ION DOPED NANOANATASE FOR PHOTOCATALYTIC AND ADSORPTION APPLICATION

**Natalija Milojković**<sup>a</sup>  <https://orcid.org/0000-0002-6112-6219>,

**Bojana Simović**<sup>b</sup>  <https://orcid.org/0000-0002-9407-155X>,

**Aleksandra Dapčević**<sup>a</sup>  <https://orcid.org/0000-0001-7650-7156>

<sup>a</sup> University of Belgrade, Faculty of Technology and Metallurgy, Belgrade, Serbia;

<sup>b</sup> University of Belgrade, Institute for Multidisciplinary Research, Belgrade, Serbia

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

Titanium(IV) oxide exists in three crystalline modifications: tetragonal anatase ( $I4_1/amd$ ) and rutile ( $P4_2/mnm$ ), and orthorhombic brookite ( $Pbca$ ).  $TiO_2$  is a well-known material with extraordinary properties, which can be improved by doping. This work aimed to obtain transition metal ion doped  $TiO_2$  with better adsorption and photocatalytic properties compared to the undoped one. The hydrothermal treatment at 120 °C for 12 h was used to synthesize the undoped  $TiO_2$  from titanium(IV) isopropoxide. To obtain doped  $TiO_2$  samples with 5 at.% of the dopant ( $TiO_2$ -Mn,  $TiO_2$ -Cu,  $TiO_2$ -V) the suitable precursor was added to the titanium(IV) isopropoxide: manganese(II) nitrate, copper(II) nitrate, and vanadium(V) oxytriisopropoxide. Hydrothermally obtained powders were calcined at 400 °C for 1 h (400- $TiO_2$ , 400- $TiO_2$ -Mn, 400- $TiO_2$ -V, 400- $TiO_2$ -Cu). The final phase composition, crystallite sizes, and unit cell parameters were determined using the XRD data. Photocatalytic and adsorption properties were estimated toward removing azo dye Reactive Orange 16.

Nanoanatase, having distinctly small crystallites (7–12 nm), was formed in all samples, while in the case of Mn- and Cu-doped  $TiO_2$ , the traces of brookite were present. The unit cell parameters of anatase are changed upon doping ( $a=(3.7799(2)-3.7934(2))$  Å,  $c=(9.4936(7)-9.5157(6))$  Å), pointing out that the dopants were incorporated in the structure. This is even more pronounced in the case of calcined samples ( $a=(3.7772(2)-3.8092(3))$  Å,  $c=(9.4623(7)-9.5420(8))$  Å). Regarding the ionic radius of dopants and the analysis of the lattice parameters, we assume that in the samples  $TiO_2$ -Mn, 400- $TiO_2$ -Mn, and 400- $TiO_2$ -V, the Mn(II) ( $r=0.670$  Å) probably was oxidized to Mn(IV) ( $r=0.530$  Å) during the hydrothermal treatment, while the V(V) ( $r=0.540$  Å) was reduced to V(III) ( $r=0.640$  Å) during the calcination.

The 400- $TiO_2$  sample demonstrated the best photocatalytic activity by degrading 98 % of the dye after 120 min under simulated solar light, while the  $TiO_2$ -Cu sample showed the best adsorption capacity, adsorbing even 71 % of the dye.

## НОВИ ДЕРИВАТИ ТЕТРАХИДРОПИРАЗОЛОПИРАЗОЛОНА

Јована Бугариновић <sup>a</sup>  <https://orcid.org/0000-0002-3561-6732>,

Слађана Новаковић <sup>b</sup>  <https://orcid.org/0000-0002-8737-5870>,

Горан Богдановић <sup>b</sup>  <https://orcid.org/0000-0002-4721-794X>,

Драгана Стевановић <sup>a</sup>  <https://orcid.org/0000-0003-3199-0775>,

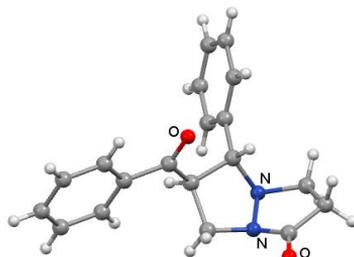
Марко Пешић <sup>a</sup>  <https://orcid.org/0000-0002-3871-5795>,

Анка Годосијевић <sup>b</sup>  <https://orcid.org/0000-0002-6030-1468>,

Иван Дамљановић <sup>a</sup>  <https://orcid.org/0000-0001-5687-2885>,

<sup>a</sup> Природно-математички факултет, Универзитет у Крагујевцу, Крагујевац, Србија; <sup>b</sup> Институт за нуклеарне науке „Винча” - Институт од националног значаја за Републику Србију, Универзитет у Београду, Београд, Србија; <sup>c</sup> Пољопривредни факултет, Универзитет у Нишу, Крушевац, Србија  
имејл: snovak@vin.bg.ac.rs

Кристалне структуре три нова деривата тетрахидоропиразолопиразолонa испитане су рендгенском дифракцијом на монокристалу (Слика 1). Ова једињења се разликују у комбинацији супституената присутних на прстену тетрахидоропиразола, док се с обзиром на међусобну орјентацију супституената могу разликовати *trans* и *cis* изомери. Без обзира на различиту орјентацију супституената централни тетрахидоропиразолопиразолони систем ових молекула има сличну конформацију. Анализа сличних кристалних структура архивираних у Кембричкој банци структурних података [1] указује на значајну флексибилност бицикличног система. Испитане су специфичности конформационих промена нових и претходно публикованих молекулских структура.



Слика 1. Молекулска структура деривата тетрахидоропиразолопиразолонa

[1] С. R. Groom, *et al.*, *Acta Cryst.* **V72** (2016) 171.

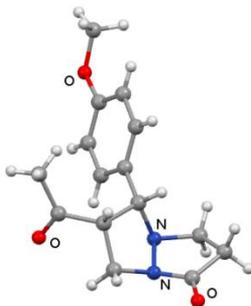
Захвалница: Аутори захваљују Министарству науке, технолошког развоја и иновација на финансијској подршци.

## NEW TETRAHYDROPIRAZOLOPIRAZOLONE DERIVATIVES

Jovana Bugarinović<sup>a</sup>  <https://orcid.org/0000-0002-3561-6732>,  
Sladana Novaković<sup>b</sup>  <https://orcid.org/0000-0002-8737-5870>,  
Goran Bogdanović<sup>b</sup>  <https://orcid.org/0000-0002-4721-794X>,  
Dragana Stevanović<sup>a</sup>  <https://orcid.org/0000-0003-3199-0775>,  
Marko Pešić<sup>a</sup>  <https://orcid.org/0000-0002-3871-5795>,  
Anka Todosijević<sup>c</sup>  <https://orcid.org/0000-0002-6030-1468>,  
Ivan Damljanović<sup>a</sup>  <https://orcid.org/0000-0001-5687-2885>,

<sup>a</sup> University of Kragujevac, Faculty of Science, Kragujevac, Serbia; <sup>b</sup> “VINČA” Institute of Nuclear Sciences - National Institute of the Republic of Serbia, University of Belgrade, Belgrade, Serbia; <sup>c</sup> University of Niš, Faculty of Agriculture, Kruševac, Serbia  
e-mail: snovak@vin.bg.ac.rs

Crystal structures of three novel tetrahydropyrazolopyrazolone derivatives have been determined by single crystal X-ray diffraction analysis (**Figure 1**). In general, these compounds differ in combination of substituents present on the tetrahydropyrazole ring, while considering their mutual orientation one can distinguish *trans* and *cis* isomers. Regardless of the different orientation of substituents, the central tetrahydropyrazolopyrazolone system in these molecules shows similar conformation. The examination of similar crystal structures archived in the Cambridge Structural Database indicates considerable flexibility of the bicyclic system. The particularities of conformational changes in the present and previously reported molecular structures have been examined.



**Figure 1.** Molecular structure of the tetrahydropyrazolopyrazolone derivative

[1] C. R. Groom, *et al.*, *Acta Cryst.* **B72** (2016) 171.

*Acknowledgement:* Authors gratefully acknowledges the support of the Ministry of Education, Science and Technological Development of the Republic of Serbia.

## ИСПИТИВАЊЕ УТИЦАЈА ГЕОМЕТРИЈСКИХ ПАРАМЕТАРА НА ИНТЕРАКЦИЈЕ ИЗМЕЂУ АТОМА ФЛУОРА И АТОМА КИСЕОНИКА (F...O)

**Марија М. Петковић Benazzouz**<sup>a</sup>  <https://orcid.org/0000-0003-3526-2054>,

**Мирјана Ж. Сарван**<sup>a</sup>  <https://orcid.org/0000-0002-2679-3200>,

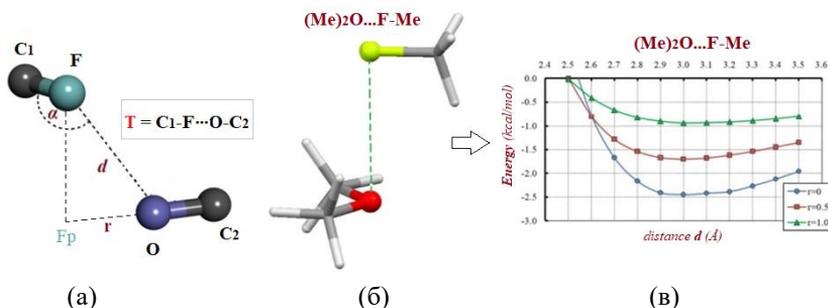
**Ивана Ђорђевић**<sup>b</sup>  <https://orcid.org/0000-0001-5981-9385>,

**Катарина М. Милетић**<sup>a</sup>  <https://orcid.org/0000-0001-9477-6640>,

**Горан В. Јањић**<sup>b</sup>  <https://orcid.org/0000-0002-4138-2637>

<sup>a</sup> Физички факултет, Универзитет у Београду, Београд, Србија; <sup>b</sup> Институт за хемију, технологију и металургију, Универзитет у Београду, Београд, Србија  
имејл: marijapetkovic@ff.bg.ac.rs

У наставку истраживања интеракција атома флуора, а са циљем да се испита природа и јачина F...O интеракција, урађени су кристалографска студија и квантно-механички прорачуни на моделу илусторваном на **слици 1а и 1б**. Статистичка анализа параметара добијених из CSD-а је показала да интеракције типа C(sp<sup>3</sup>)-F...O-C(sp<sup>3</sup>) и C(sp<sup>2</sup>)-F...O-C(sp<sup>2</sup>) имају афинитет према тетрагоналној геометрији (дистрибуција угла  $\alpha$ ) и увијеној оријетацији (дистрибуција торзионог угла  $T$ ) са дужинама везе већим од 2.9 Å. Квантно-механички прорачуни су показали да се најјаче F...O интеракције јављају у моделу (Me)<sub>2</sub>O...F-Me са енергијом интеракције од -2.45 kcal/mol (прорачун рађен на APFD/aug-cc-pVD нивоу, **слика 1в**).



**Слика 1.** Геометријски параметри код F...O интеракција: (а) и (б) модел системи и (в) резултати квантно-механичког прорачуна F...O интеракција.

[1] M. Petković Benazzouz, *et al.*, *Crys. Growth Des.* **21(11)** (2021) 6129.

## EXPLORING THE INFLUENCE OF GEOMETRIC PARAMETERS ON FLUORINE-OXYGEN (F $\cdots$ O) INTERACTIONS

**Marija M. Petković Benazzouz**<sup>a</sup>  <https://orcid.org/0000-0003-3526-2054>,

**Mirjana Ž. Sarvan**<sup>a</sup>  <https://orcid.org/0000-0002-2679-3200>,

**Ivana Djordjević**<sup>b</sup>  <https://orcid.org/0000-0001-5981-9385>,

**Katarina M. Miletić**<sup>a</sup>  <https://orcid.org/0000-0001-9477-6640>,

**Goran V. Janjić**<sup>b</sup>  <https://orcid.org/0000-0002-4138-2637>

<sup>a</sup> Faculty of Physics, University of Belgrade, Belgrade, Serbia; <sup>b</sup> Institute of Chemistry, Technology and Metallurgy, University of Belgrade, Belgrade, Serbia  
e-mail: marijapetkovic@ff.bg.ac.rs

As a continuation of our investigation into fluorine interactions [1], initially focusing on F-F interactions, crystallographic analysis, and quantum mechanical calculations were employed to systematically investigate the nature and strength of fluorine-oxygen (F $\cdots$ O) interactions using a model system illustrated in **Figure 1a**. The statistical analysis of parameters from crystal structures archived in CSD has shown that C(sp<sup>3</sup>)–F $\cdots$ O–C(sp<sup>3</sup>) and C(sp<sup>2</sup>)–F $\cdots$ O–C(sp<sup>2</sup>) interactions have a tendency toward a tetrahedral geometry (from angles  $\alpha$  distribution) and a twisted orientation (from torsional angle  $T$  distribution) of the interacting groups, with bond lengths greater than 2.9 Å. For quantum mechanical calculations, the most robust F $\cdots$ O interaction was observed in the (Me)<sub>2</sub>O $\cdots$ F–Me model system (**Figure 1b**), characterized by an interatomic distance ( $d$ ) of 3.0 Å, an offset value ( $r$ ) of 0 Å (with  $\alpha$  of 90°), and an antiparallel orientation of interacting groups ( $T=180^\circ$ ), resulting in an interaction energy of –2.45 kcal/mol (computed at the APFD/aug-cc-pVDZ level, **Figure 1c**).



**Figure 1.** The geometric parameters for F $\cdots$ O interactions: (a and b) model systems and (c) results of calculations of F $\cdots$ O interactions.

[1] M. Petković Benazzouz, *et al.*, *Crys. Growth Des.* **21(11)** (2021) 6129.

## КРИСТАЛОГРАФИЈА ПРУЖА НОВИ УВИД У КОНДЕНЗАЦИЈУ 17 $\alpha$ -МЕТИЛТЕСТОСТЕРОНА И ФЕРОЦЕНКАРБАЛДЕХИДА

**Видак Раичевић**<sup>a</sup>  <https://orcid.org/0000-0002-3858-4350>,

**Милица Г. Богдановић**<sup>b</sup>  <https://orcid.org/0000-0001-7122-6929>,

**Нико Радловић**<sup>b</sup>  <https://orcid.org/0000-0003-1342-7567>,

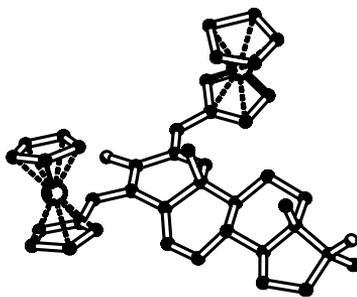
**Марко В. Родић**<sup>b</sup>  <https://orcid.org/0000-0002-4471-8001>

<sup>a</sup> Медицински факултет, Универзитет у Новом Саду, Нови Сад, Србија;

<sup>b</sup> Универзитет у Новом Саду Природно-математички факултет, Нови Сад, Србија; <sup>c</sup> Природно-математички факултет, Универзитет у Нишу, Ниш, Србија.  
имејл: vidak.raicevic@mf.uns.ac.rs

Претходно је изнето да 17 $\alpha$ -метилтестостерон у реакцији кондензације са фeroценкарбалдехидом даје пентацикличан производ с два фeroценска језгра у молекулу [1], али никад није понуђено објашњење за овакав исход. Овде дајемо кристалну структуру 2,4-бис(фeroценилметилен)-17 $\beta$ -хидрокси-17 $\alpha$ -метиландрост-5-ен-3-она (**1**, **Слика 1**) добијеног извођењем ове реакције у тетраhydroфурану и предлажемо нову интерпретацију ове хемијске трансформације.

Одабрани кристалографски подаци и параметри утачњавања за **1**: C<sub>42</sub>H<sub>46</sub>Fe<sub>2</sub>O<sub>2</sub>, моноклинични кристални систем, P2<sub>1</sub>,  $a = 7,3680(4)$  Å,  $b = 19,7772(11)$  Å,  $c = 23,1459(13)$  Å,  $\beta = 99,088(6)^\circ$ ,  $V = 3330,5(3)$  Å<sup>3</sup>,  $Z = 4$  ( $Z' = 2$ ),  $R = 16,4$  % за 837 параметара и 11412 независних рефлексија.



**Слика 1.** Молекулска структура једињења **1**.

[1] J. Manosroi, *et al.*, *J. Med. Chem.* **53** (2010) 3937.

## CRYSTALLOGRAPHY PROVIDES NEW INSIGHTS INTO THE CONDENSATION OF 17 $\alpha$ -METHYLTESTOSTERONE AND FERROCENECARBOXALDEHYDE

**Vidak Raičević**<sup>a</sup>  <https://orcid.org/0000-0002-3858-4350>,

**Milica G. Bogdanović**<sup>b</sup>  <https://orcid.org/0000-0001-7122-6929>,

**Niko Radulović**<sup>c</sup>  <https://orcid.org/0000-0003-1342-7567>,

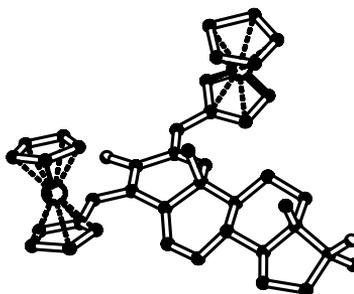
**Marko V. Rodić**<sup>b</sup>  <https://orcid.org/0000-0002-4471-8001>

<sup>a</sup> Faculty of Medicine, University of Novi Sad, Novi Sad, Serbia; <sup>b</sup> University of Novi Sad Faculty of Sciences, Novi Sad, Serbia; <sup>c</sup> Faculty of Sciences and Mathematics, University of Niš, Niš, Serbia.

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

17 $\alpha$ -Methyltestosterone was reported to yield a pentacyclic product with two ferrocene cores per molecule upon a condensation reaction with ferrocenecarboxaldehyde [1], but no explanation was given to support such an outcome to date. Herein we provide the crystal structure of 2,4-bis(ferrocenylmethylidene)-17 $\beta$ -hydroxy-17 $\alpha$ -methylandroster-5-en-3-one (**1**, **Figure 1**) obtained by performing this reaction in tetrahydrofuran and suggest a new interpretation of this chemical transformation.

Selected crystallographic data and refinement details for **1**: C<sub>42</sub>H<sub>46</sub>Fe<sub>2</sub>O<sub>2</sub>, monoclinic crystal system, C<sub>42</sub>H<sub>46</sub>Fe<sub>2</sub>O<sub>2</sub>, P2<sub>1</sub>,  $a = 7.3680(4)$  Å,  $b = 19.7772(11)$  Å,  $c = 23.1459(13)$  Å,  $\beta = 99.088(6)^\circ$ ,  $V = 3330.5(3)$  Å<sup>3</sup>,  $Z = 4$  ( $Z' = 2$ ),  $R = 16.4\%$  for 837 parameters and 11412 independent reflections.



**Figure 1.** Molecular structure of compound **1**.

[1] J. Manosroi, *et al.*, *J. Med. Chem.* **53** (2010) 3937.

## ДИНУКЛЕАРНИ КОМПЛЕКС $\text{Cu(II)}$ СА КОНДЕНЗАЦИОНИМ ПРОИЗВОДОМ 2-АЦЕТИЛПИРИДИНА И ДИХИДРАЗИДА МАЛОНСКЕ КИСЕЛИНЕ

**Предраг Ристић**<sup>a</sup>  <https://orcid.org/0000-0002-7489-6132>,

**Марко Родић**<sup>b</sup>  <https://orcid.org/0000-0002-4471-8001>,

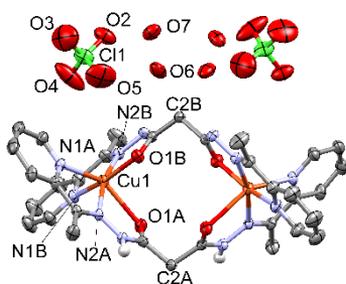
**Ненад Филиповић**<sup>a</sup>  <https://orcid.org/0000-0003-2982-5324>,

**Тамара Тодоровић**<sup>a</sup>  <https://orcid.org/0000-0002-7740-3639>

<sup>a</sup> Универзитет у Београду – Хемијски факултет, Београд, Србија. <sup>b</sup> Природно-математички факултет Универзитета у Новом Саду, Нови Сад, Србија;

<sup>c</sup> Универзитет у Београду – Пољопривредни факултет, Београд, Србија  
имејл: predrag@chem.bg.ac.rs

Симетрични дихидразони на бази пиридина и органских киселина представљају мултидентатне лиганде који могу формирати комплексе различите нуклеарности. Због свог афинитета да са *N,O*- дозорима оствари координационе бројеве 3–7 и високе биодоступности,  $\text{Cu(II)}$  представља погодан јон за синтезу комплекса специфичне примене. У овом раду је фокус био на кристалној структури динуклеарног комплекса  $\text{Cu(II)}$  са лигандом  $\text{H}_2\text{L}$ , кондензационим дериватом 2-ацетилпиридина и дихидразида малонске киселине. Урађена је опсежна статистичка студија анализе учесталости и опис распореда *NNO*-лигаторских атома у свим комбинацијама петочланих и шесточланих хелатних претенова комплекса  $\text{Cu(II)}$ ,  $\text{Ni(II)}$  и  $\text{Cd(II)}$  у Кембричкој структурној бази података [1]. Молекулска и кристална структура новог комплекса  $\text{Cu(II)}$  (**Cu-1**, **Слика 1**) је упоређена са претходно објављеним структурама комплекса  $\text{Ni(II)}$  и  $\text{Cd(II)}$  са лигандом  $\text{H}_2\text{L}$  употребом FIM (енгл. *Full Interaction Map*) методологије као и анализом Хиршфелдових површина и 2Д графикона отисака прста међумолекулских интеракција.



**Слика 1.** ORTEP приказ молекулске структуре комплекса **Cu-1**. Термални елипсоиди су приказани са 30% вероватноће. Сви атоми водоника осим хидразонских N–H су изостављени због прегледности.

[1] C. R. Groom, *et al.*, *Acta Cryst.* **B72** (2016) 171.

## DINUCLEAR Cu(II) COMPLEX WITH THE CONDENSATION DERIVATIVE OF 2-ACETILPYRIDINE AND MALONIC ACID DIHYDRAZIDE

**Predrag Ristić**<sup>a</sup>  <https://orcid.org/0000-0002-7489-6132>,

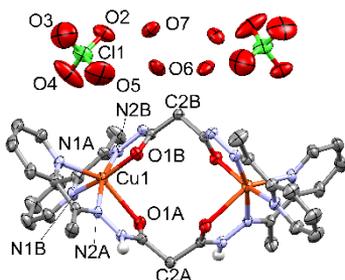
**Marko Rodić**<sup>b</sup>  <https://orcid.org/0000-0002-4471-8001>,

**Nenad Filipović**<sup>c</sup>  <https://orcid.org/0000-0003-2982-5324>,

**Tamara Todorović**<sup>a</sup>  <https://orcid.org/0000-0002-7740-3639>

<sup>a</sup> University of Belgrade – Faculty of Chemistry, Belgrade, Serbia; <sup>b</sup> University of Novi Sad, Faculty of Sciences, Novi Sad, Serbia; <sup>c</sup> University of Belgrade – Faculty of Agriculture, Belgrade, Serbia  
e-mail: predrag@chem.bg.ac.rs

Pyridine based symmetric dihydrazones of organic acids represent multidentate ligand systems that can easily form complexes of different nuclearity. Due to its ability to achieve coordination numbers from 3 to 7, affinity to *N*- and *O*-donor atoms, as well as high bioavailability, Cu(II) is used for the synthesis of complexes with the aim of their specific application. This work is focused on the crystal structure of dinuclear Cu(II) complex with H<sub>2</sub>L ligand, a condensation derivative of 2-acetylpyridine and malonic acid dihydrazone. An extensive statistical study and description of the arrangement of *NNO*-ligator atoms in all combinations of 5- and 6-membered chelate rings in Cu(II), Ni(II) and Cd(II) was performed by the CSD mining [1]. Molecular and crystal structure of novel Cu(II) complex (**Cu-1**, **Figure 1**) is compared with the previously published structures of Ni(II) and Cd(II) complexes with H<sub>2</sub>L using full interaction map (FIM) methodology, as well as by analyzing of Hirshfeld surfaces and 2D pseudosymmetric fingerprint plots of intermolecular interactions.



**Figure 1.** ORTEP drawing of the molecular structure of **Cu-1**. Displacement ellipsoids are shown at 30 % probability level. All hydrogen atoms, except hydrazone N–H, are omitted for clarity.

[1] C. R. Groom, *et al.*, *Acta Cryst.* **B72** (2016) 171.

## КРИСТАЛНЕ СТРУКТУРЕ ТРИ НОВА ХИДРАЗОНСКА КОМПЛЕКСА ЦИНКА

**Milica Savić**<sup>a</sup>  <https://orcid.org/0000-0002-3568-5367>,  
**Božidar Čobeljić**<sup>b</sup>  <https://orcid.org/0000-0001-6335-0196>,  
**Matiya Zlatar**<sup>a</sup>  <https://orcid.org/0000-0002-3809-0940>,  
**Maja Gruden**<sup>b</sup>  <https://orcid.org/0000-0002-0746-5754>,  
**Andrej Pevec**<sup>b</sup>  <https://orcid.org/0000-0001-7008-608X>

<sup>a</sup> Универзитет у Београду – Институт за хемију, технологију и металургију, Београд, Србија; <sup>b</sup> Универзитет у Београду – Хемијски факултет, Београд, Србија;

<sup>c</sup> Факултет за хемију и хемијску технологију, Универзитет у Љубљани, Љубљана, Словенија

имејл: milica.savic@ihm.bg.ac.rs

Лиганд HLCI (*E*)-2-(2-(1-(6-бромпиридин-2-ил)етилиден)хидразинил)-*N,N,N*-триметил-2-оксоетан-1-аминиум хлорид је добијен у реакцији 2-ацетил-6-бромпиридина и Жираровог Т реагенса у метанола. Комплекс **1**, октаедарске геометрије састоји се од два координована молекула лиганда, опште формуле  $[\text{ZnL}_2](\text{BF}_4)_2$ . Добијен је у реакцији лиганда HLCI са  $\text{Zn}(\text{BF}_4)_2 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$  и  $\text{NaN}_3$  у молском односу 1:1:4, док је као растварач коришћена смеша метанола и воде. Комплекс **2** састава  $[\text{ZnL}(\text{NCO})_2]$ , где је Zn(II) пентакоординован преко једног молекула лиганда и два лиганда  $\text{NCO}^-$ , са искривљеном тригонално бипирамидалном геометријом, добијен је у истим реакционим условима као и комплекс **1** (смеша растварача MeOH/H<sub>2</sub>O и молски однос 1:1:4). Међутим, у реакцији лиганда HLCI са  $\text{Zn}(\text{BF}_4)_2 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$  и  $\text{NaN}_3$  у великом вишку (молски однос 1:1:12) у истој смеси растварача као у претходним реакцијама добијен је мононуклеарни Zn(II) комплекс **3**, састава  $[\text{ZnL}(\text{N}_3)_2]$ . Укратко, повећана количина азида доводи до формирања комплекса **3**, у коме је један лиганд координован за централни метални атом у депротонваном облику док преостала два места заузимају азиди. Комплекс **1**  $[\text{ZnL}_2](\text{BF}_4)_2$ , кристалише у орторомбичној просторној групи *Pbcn* са једним комплексним катјоном  $[\text{ZnL}_2]^{2+}$  и два  $\text{BF}_4^-$  ањона. Комплекси **2** ( $[\text{ZnL}(\text{NCO})_2]$ ) и **3** ( $[\text{ZnL}(\text{N}_3)_2]$ ) кристалишу у триклинској *P1* просторној групи са једним молекулом по асиметричној јединици.

*Захвалница:* Истраживање је финансирано од стране Фонда за науку, Републике Србије, #7750288, Креирање молекулских магнета и катализатора на бази комплекса прелазних метала – TMMagCat.

## CRYSTAL STRUCTURES OF THREE NEW Zn(II) HYDRAZONE COMPLEXES

**Milica Savić**<sup>a</sup>  <https://orcid.org/0000-0002-3568-5367>,

**Božidar Čobeljić**<sup>b</sup>  <https://orcid.org/0000-0001-6335-0196>,

**Matija Zlatar**<sup>a</sup>  <https://orcid.org/0000-0002-3809-0940>,

**Maja Gruden**<sup>b</sup>  <https://orcid.org/0000-0002-0746-5754>,

**Andrej Pevec**<sup>c</sup>  <https://orcid.org/0000-0001-7008-608X>

<sup>a</sup> University of Belgrade - Institute of chemistry, technology and metallurgy Department of chemistry, Belgrade, Serbia; <sup>b</sup> University of Belgrade - Faculty of Chemistry, Belgrade, Serbia; <sup>c</sup> Faculty of Chemistry and Chemical Technology, University of Ljubljana, Ljubljana, Slovenia

e-mail: milica.savic@ihm.bg.ac.rs

The condensation of 2-acetyl-6-bromopyridine with Girard's T reagent in methanol produced the ligand HLCI (*E*)-2-(2-(1-(6-bromopyridin-2-yl)ethylidene)hydrazinyl)-*N,N,N*-trimethyl-2-oxoethan-1-aminium chloride. Complex **1**, an octahedral complex containing two molecules of the coordinated ligand  $[\text{ZnL}_2](\text{BF}_4)_2$ , was obtained when the ligand HLCI reacted with  $\text{Zn}(\text{BF}_4)_2 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$  and  $\text{NaN}_3$  in a molar ratio 1:1:4 in a solvent mixture of water and methanol. Complex **2**, with the composition  $[\text{ZnL}(\text{NCO})_2]$ , was obtained under the same reaction conditions as complex **1** (solvent mixture MeOH/H<sub>2</sub>O and molar ratio 1:1:4). Zn(II) is pentacoordinated via one ligand molecule and two NCO<sup>-</sup> ligands, with a distorted trigonal bipyramidal geometry. However, by reacting HLCI with  $\text{Zn}(\text{BF}_4)_2 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$  and  $\text{NaN}_3$  in excess (1:1:12) in the same solvent mixture as in the previous reactions the mononuclear Zn(II) complex **3**, with the composition  $[\text{ZnL}(\text{N}_3)_2]$ , was formed. In short, increasing the amount of azide leads to forming **3**, where one deprotonated ligand and two azide ligands are coordinated to Zn(II). Complex **1**,  $[\text{ZnL}_2](\text{BF}_4)_2$ , crystallized in orthorhombic *Pbcn* space group as one independent complex cation  $[\text{ZnL}_2]^{2+}$  and two  $\text{BF}_4^-$  anions. Complexes **2** ( $[\text{ZnL}(\text{NCO})_2]$ ) and **3** ( $[\text{ZnL}(\text{N}_3)_2]$ ) both crystallize as independent molecules in the asymmetric unit of the triclinic  $P\bar{1}$  space group.

*Acknowledgement:* 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.

## ИСПИТИВАЊЕ F...F ИНТЕРАКЦИЈА У КРИСТАЛНИМ СТРУКТУРАМА: УВИД У ГЕОМЕТРИЈСКО УРЕЂЕЊЕ

Марија М. Петковић **Benazzouz**<sup>a</sup>  <https://orcid.org/0000-0003-3526-2054>,

Мирјана Ж. Сарван<sup>a</sup>  <https://orcid.org/0000-0002-2679-3200>,

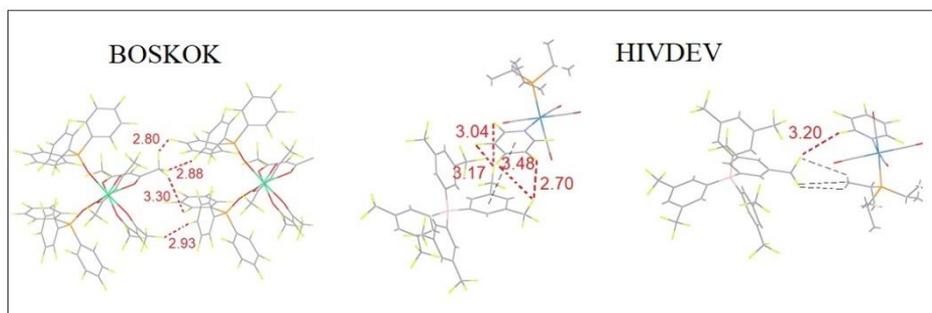
Катарина М. Милетић<sup>a</sup>  <https://orcid.org/0000-0001-9477-6640>,

Горан В. Јањић<sup>b</sup>  <https://orcid.org/0000-0002-4138-2637>,

Александра А. Ракић<sup>b</sup>  <https://orcid.org/0000-0003-1489-6373>

<sup>a</sup> Физички факултет, Универзитет у Београду, Београд, Србија; <sup>b</sup> Институт за хемију, технологију и металургију, Универзитет у Београду, Београд, Србија <sup>c</sup> Факултет за физичку хемију, Универзитет у Београду, Београд, Србија  
имејл: miras@ff.bg.ac.rs

Анализом кристалних структура из Кембричке структурне базе података уочен је велики број F...F контаката, од којих се 136431 контакт успоставља између алкилних група (интеракције C(sp<sup>3</sup>)–F...F–C(sp<sup>3</sup>)), док је 111336 контаката између група са незасићеним C-атомима (интеракције C(sp<sup>2</sup>)–F...F–C(sp<sup>2</sup>)). Расподела растојања не показује јасан тренд, али постоји значајан број структура код којих су ове вредности веће од 2,9 Å. Контакти који укључују незасићене C-атоме јављају се на нешто краћим растојањима (2,9–3,1 Å) у поређењу са контактима између алкил-група (3,1–3,3 Å). Нелинеарна геометрија последица је истовремених интеракција интерагујућих група. У структури BOSKOK (Слика 1), две комплексне јединице формирају само нелинеарне F...F контакте, што указује на то да F-атоми ступају у интеракцију са више центара унутар исте групе, укључујући флуороване метил- и фенил-групе. Кратка растојања (краћа од 2,9 Å), јављају се у кристалним структурама у којима је F...F интеракција ојачана са истовременим интеракцијама свих учествујућих група. У структури HIVDEV (слика), F-атоми из CF<sub>3</sub>-групе реагују са три F-атома из две флуороване фенилне групе, са међуатомским растојањима *d* у опсегу од 2,70 до 3,48 Å.



Слика 1. Фрагменти кристалних структура BOSKOK и HIVDEV.

[1] K. Gak Simić, *et al.*, *CrystEngComm*, **23** (2021) 2606.

## EXPLORING F...F INTERACTIONS IN CRYSTAL STRUCTURES: INSIGHTS INTO GEOMETRIC ARRANGEMENTS

**Marija Petković Benazzouz**<sup>a</sup>  <https://orcid.org/0000-0003-3526-2054>,

**Mirjana Ž. Sarvan**<sup>a</sup>  <https://orcid.org/0000-0002-2679-3200>,

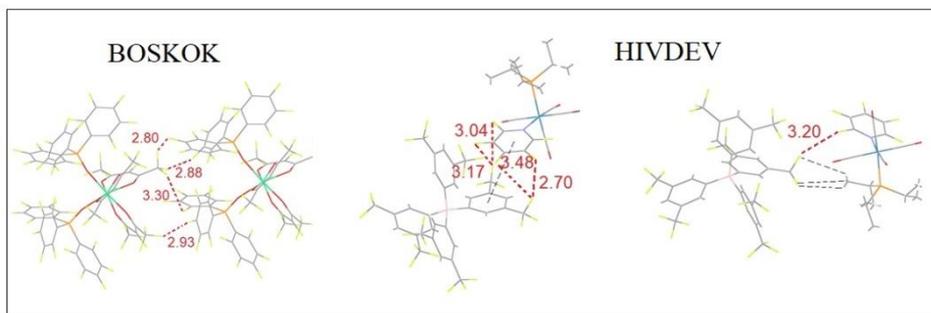
**Katarina M. Miletić**<sup>a</sup>  <https://orcid.org/0000-0001-9477-6640>,

**Goran V. Janjić**<sup>b</sup>  <https://orcid.org/0000-0002-4138-2637>,

**Aleksandra A. Rakic**<sup>c</sup>  <https://orcid.org/0000-0003-1489-6373>

<sup>a</sup> Faculty of Physics, University of Belgrade, Belgrade, Serbia; <sup>b</sup> Institute of Chemistry, Technology and Metallurgy, University of Belgrade, Belgrade, Serbia; <sup>c</sup> Faculty of Physical Chemistry, University of Belgrade, Belgrade, Serbia  
e-mail: miras@ff.bg.ac.rs

Analysis of crystal structures from the Cambridge Structural Database reveals a significant prevalence of F...F contacts, with 136431 contacts involving alkyl groups (C(sp<sup>3</sup>)-F...F-C(sp<sup>3</sup>) interactions) and 111336 contacts involving unsaturated carbon atoms (C(sp<sup>2</sup>)-F...F-C(sp<sup>2</sup>) interactions). The distribution of bond distances lacks a distinct trend but shows a considerable number of structures with values surpassing 2.9 Å, with contacts involving unsaturated carbon atoms tending towards slightly shorter distances (2.9–3.1 Å) compared to alkyl groups (3.1–3.3 Å). Nonlinear geometry is a consequence of simultaneous interactions involving interacting groups. In the structure with refcode BOSKOK (**Figure 1**), two complex units form exclusive nonlinear F...F contacts, suggesting F atoms engage with multiple centers within the same group, including fluorinated methyl and phenyl groups. Short distances (shorter than 2.9 Å) occur in crystal structures in which F...F interaction is strengthened by simultaneous interactions of the participating groups. In the structure with refcode HIVDEV (**Figure 1**), the F atoms of CF<sub>3</sub> group interacts with three F atoms from two fluorinated phenyl groups, with observed *d* distances ranging from 2.70 to 3.48 Å.



**Figure 1.** Fragments of the crystal structures with refcode BOSKOK and HIVDEV.

[1] K. Gak Simić, *et al.*, *CrystEngComm*, **23** (2021) 2606.

## СИНТЕЗА И КАРАКТЕРИЗАЦИЈА КОМПЛЕКСА Cu(II) СА ДЕРИВАТОМ САЛИЦИЛАЛДЕХИДА И $\alpha$ -ДИИМИНА

**Снежана Селаковић**<sup>a</sup>  <https://orcid.org/0000-0003-2676-364X>,

**Марко В. Родић**<sup>b</sup>  <https://orcid.org/0000-0002-4471-8001>,

**Маја Шумар Ристовић**<sup>b</sup>  <https://orcid.org/0000-0002-2733-8955>

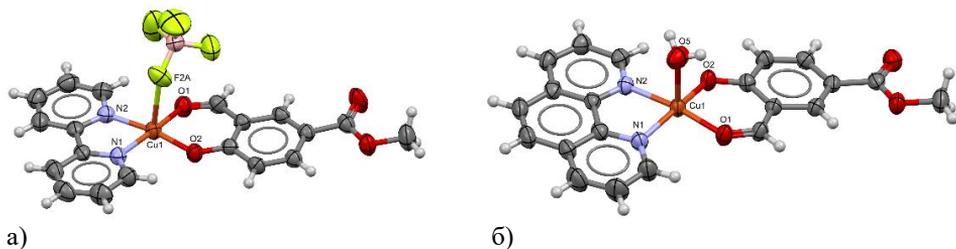
<sup>a</sup> Универзитет у Београду – Фармацеутски факултет, Београд, Србија;

<sup>b</sup> Универзитет у Новом Саду, Природно-математички факултет, Нови Сад, Србија; <sup>c</sup> Универзитет у Београду – Хемијски факултет, Београд, Србија

имејл: snezana.selakovic@pharmacy.bg.ac.rs

Комплекси Cu(II) добијени су у реакцији метил 3-формил-4-хидроксibenзоата (HL), Cu(BF<sub>4</sub>)<sub>2</sub>·6H<sub>2</sub>O и 2,2'-бипиридина (bipy) односно 1,10-фенантролина (phen) у металнолу.

Рендгенска структурна анализа дала је увид у молекулске структуре комплекса, [Cu(bipy)(L)BF<sub>4</sub>] (**1**) и [Cu(phen)(L)H<sub>2</sub>O]BF<sub>4</sub>·H<sub>2</sub>O (**2**), приказане на слици 1. У случају оба комплекса јон Cu(II) координан је за два бидентатна лиганда формирајући основу квадратне-пирамиде, док се на петом координационом месту налази монодентатни лиганд. У комплексу **1** у апикалном положају координан је BF<sub>4</sub><sup>-</sup> јон, а у комплексу **2** молекул воде. Најкраће везе са јоном Cu(II) гради анјон органског лиганда L<sup>-</sup>, а најдуже везе BF<sub>4</sub><sup>-</sup> јон, односно молекул воде.



Слика 1. Молекулске структуре: а) комплекса **1** и б) комплексног катјона комплекса **2**.

Одабрани кристалографски подаци и параметри утачњавања (**1**): C<sub>19</sub>H<sub>15</sub>BCuF<sub>4</sub> N<sub>2</sub>O<sub>2</sub>, триклинични кристални систем, *P* $\bar{1}$ , *a* = 9,1227(2) Å, *b* = 10,2404(2) Å, *c* = 11,1777(2) Å,  $\alpha$  = 102,877(2) °,  $\beta$  = 104,810(2) °,  $\gamma$  = 92,033(2) °, *V* = 979.40(4) Å<sup>3</sup>, *Z* = 2, *R* = 3,3 % за 309 параметара и 4009 независних рефлексија; (**2**): C<sub>21</sub>H<sub>17</sub>BCuF<sub>4</sub> N<sub>2</sub>O<sub>5</sub>, моноклинични кристални систем, *C*2/*c*, *a* = 19,8478(6) Å, *b* = 16,7632(3) Å, *c* = 13,8843(4) Å,  $\beta$  = 105,192(3) °, *V* = 4458,0(2) Å<sup>3</sup>, *Z* = 8, *R* = 4,0 % за 315 параметара и 5286 независних рефлексија.

## SYNTHESIS AND CHARACTERIZATION OF Cu(II) COMPLEXES WITH SALICYLALDEHYDE DERIVATE AND $\alpha$ -DIIMINES

**Snežana Selaković**<sup>a</sup>  <https://orcid.org/0000-0003-2676-364X>,

**Marko V. Rodić**<sup>b</sup>  <https://orcid.org/0000-0002-4471-8001>,

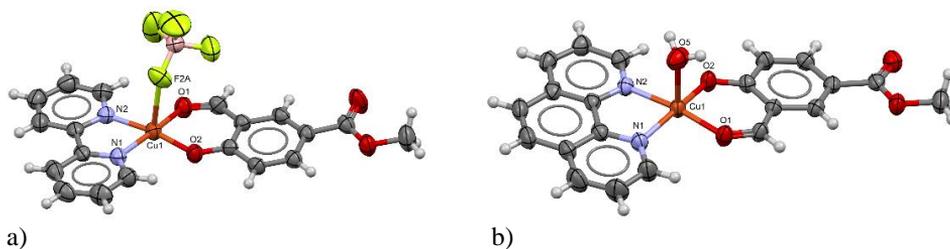
**Maja Šumar Ristović**<sup>c</sup>  <https://orcid.org/0000-0002-2733-8955>

<sup>a</sup> University of Belgrade - Faculty of Pharmacy, Belgrade, Serbia; <sup>b</sup> University of Novi Sad, Faculty of Sciences, Novi Sad, Serbia; <sup>c</sup> University of Belgrade - Faculty of Chemistry, Belgrade, Serbia

e-mail: snezana.selakovic@pharmacy.bg.ac.rs

The complexes were obtained in the reaction of methyl 3-formyl-4-hydroxybenzoate (HL),  $\text{Cu}(\text{BF}_4)_2 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$ , and 2,2'-bipyridine (bipy) or 1,10-phenanthroline (phen) in methanol as a solvent.

Crystal structure analysis shows that the coordination formulas of the compounds are  $[\text{Cu}(\text{bipy})(\text{L})\text{BF}_4]$  (**1**) and  $[\text{Cu}(\text{phen})(\text{L})\text{H}_2\text{O}]\text{BF}_4 \cdot \text{H}_2\text{O}$  (**2**). The molecular structures of complexes are shown in **Figure 1**. In both complexes, Cu(II) is surrounded by two bidentate ligands, forming the base of the square pyramid, and one monodentate ligand in its apex. In the crystal structure of complex **1**, the apical site is occupied by  $\text{BF}_4^-$  ion, while in complex **2**, it is occupied by a water molecule. The negatively charged L<sup>-</sup> participates in the shortest metal–ligand bond lengths, followed by neutral bipy or phen ligand. The apical bonds are the longest, as expected for Cu(II) square-pyramidal complexes.



**Figure 1.** Molecular structure of a)  $[\text{Cu}(\text{bipy})(\text{L})(\text{BF}_4)]$  and  
b)  $[\text{Cu}(\text{phen})(\text{L})(\text{H}_2\text{O})]^+$ .

Selected crystallographic data and refinement details (**1**):  $\text{C}_{19}\text{H}_{15}\text{BCuF}_4$ , triclinic crystal system,  $P\bar{1}$ ,  $a = 9.1227(2) \text{ \AA}$ ,  $b = 10.2404(2) \text{ \AA}$ ,  $c = 11.1777(2) \text{ \AA}$ ,  $\alpha = 102.877(2)^\circ$ ,  $\beta = 104.810(2)^\circ$ ,  $\gamma = 92.033(2)^\circ$ ,  $V = 979.40(4) \text{ \AA}^3$ ,  $Z = 2$ ,  $R = 3.3 \%$  for 309 parameters and 4009 independent reflections; (**2**):  $\text{C}_{21}\text{H}_{17}\text{BCuF}_4$ , monoclinic crystal system,  $C2/c$ ,  $a = 19.8478(6) \text{ \AA}$ ,  $b = 16.7632(3) \text{ \AA}$ ,  $c = 13.8843(4) \text{ \AA}$ ,  $\beta = 105.192(3)^\circ$ ,  $V = 4458.0(2) \text{ \AA}^3$ ,  $Z = 8$ ,  $R = 4.0 \%$  for 315 parameters and 5286 independent reflections.

## УТИЦАЈ БАЗНЕ ЛИНИЈЕ НА РЕЗУЛТАТЕ РИТВЕЛД АНАЛИЗЕ ФОСФОР-ВОЛФРАМОВЕ БРОНЗЕ

**Павле Танчић**<sup>a</sup>  <http://orcid.org/0000-0002-4024-710X>,  
**Александар Кременовић**<sup>b</sup>  <https://orcid.org/0000-0001-8845-2332>

<sup>a</sup> Универзитет у Београду, Институт за хемију, технологију и металургију, Београд, Србија; <sup>b</sup> Универзитет у Београду, Рударско-геолошки факултет, Београд, Србија  
имејл: pavletan@gmail.com

Добро је познато да базна линија може значајно да утиче на резултате Ритвелд анализе [1, 2]. Овај утицај је проучаван са Fullprof програмом код једног од фосфор-волфрамових једињења [3–7]. Наиме, одабрана је фосфор-волфрамова бронза (WPB;  $PW_8O_{26}$ ) синтетисана на 650 °C, и анализирана у *Pmnb* [8] и *P4/ncc* [9] просторним групама, а које су одговарајуће за различите  $WO_3$  полиморфне фазе. Примењена су четири начина утачњавања базне линије: Чебишевљево полином са 6 (*i*) и 4 (*ii*) коефицијената; као и линеарна интерполација између тачака (*iii*) и избегавањем зона рефлексија (*iv*). Из добијених резултата може се закључити: а) да су вредности  $Y_{obs} - Y_{calc}$  врло добре у свим случајевима; б) да се најнижи фактори слагања добијају код опције *iii*, док се вишеструко већи добијају код опција *i* и *ii*; и в) да се значајно међусобно разликују израчуната међуатомска растојања и углови. Комплексан изглед базне линије представља најзначајнији проблем у утачњавању. Утицај псеудосиметрије доприноси нестабилности утачњавања.

- [1] L. V. McCusker, *et al.*, *J. Appl. Cryst.* **32** (1999) 36
- [2] V. H. Toby, *Powder Diffr.* **21**(1) (2006) 67
- [3] Р. Ж. Димитријевић, П. И. Танчић, У. Б. Миоч, З. П. Недић, *Конференција Српског Кристалографског Друштва, I-II* (1993) 43–44.
- [4] A. Kremenović, *et al.*, *Solid State Ion.* **132**(1–2) (2000) 39
- [5] M. Vujković, *et al.*, *J. Mater. Sci.* **51**(5) (2016) 2481
- [6] M. Pagnacco, *et al.*, *J. Electrochem. Soc.* **169**(10) (2022) 106508
- [7] T. Maksimović, *et al.*, *Opt. Mater.* **143** (2023) 114125
- [8] E. Salje, *Acta Crystallogr.* **B33** (1977) 574
- [9] K. R. Locherer, *et al.*, *J. Condens. Matter. Phys.* **11** (1999) 4143.

## THE INFLUENCE OF THE BASE LINE ON THE RESULTS OF THE RIETVELD ANALYSIS OF PHOSPHORUS-TUNGSTEN BRONZE

**Pavle Tančić**<sup>a</sup>  <http://orcid.org/0000-0002-4024-710X>,  
**Aleksandar Kremenović**<sup>b</sup>  <https://orcid.org/0000-0001-8845-2332>

<sup>a</sup> *University of Belgrade, Institute of Chemistry, Technology and Metallurgy, Belgrade, Serbia;* <sup>b</sup> *University of Belgrade, Faculty of Mining and Geology, Belgrade, Serbia*  
e-mail: pavletan@gmail.com

It is well known that the baseline can significantly influence to the results of the Rietveld analysis [1, 2]. This influence was studied with Fullprof programme in one of the phosphorus-tungsten compounds [3–7]. Namely, phosphor-tungsten bronze (WPB;  $PW_8O_{26}$ ) synthesized at 650 °C was selected and analyzed in the *Pmnb* [8] and *P4/ncc* [9] space groups, which are adequate to the different  $WO_3$  polymorph phases. Four methods of specifying the base line were applied: Chebyshev polynomial with 6 (*i*) and 4 (*ii*) coefficients; and linear interpolation between points with approximately equal distances between points (*iii*) and avoiding reflection zones (*iv*), as well. From the obtained results it can be concluded: a) that the  $Y_{obs}-Y_{calc}$  values are very good in all cases; b) that the lowest agreement factors are obtained with option *iii*, while multiple higher ones are obtained with options *i* and *ii*; and c) that the calculated interatomic distances and angles differ significantly from each other. The complex appearance of the baseline is the most significant problem in the refinement. The influence of pseudosymmetry contributes to the instability of the refinement.

- [1] L. B. McCusker, *et al.*, *J. Appl. Cryst.* **32** (1999) 36
- [2] B. H. Toby, *Powder Diffr.* **21**(1) (2006) 67
- [3] Р. Ж. Димитријевић, П. И. Танчић, У. Б. Миоч, З. П. Недић, *Конференција Српског Кристалографског Друштва, I-II* (1993) 43–44.
- [4] A. Kremenović, *et al.*, *Solid State Ion.* **132**(1–2) (2000) 39
- [5] M. Vujković, *et al.*, *J. Mater. Sci.* **51**(5) (2016) 2481
- [6] M. Pagnacco, *et al.*, *J. Electrochem. Soc.* **169**(10) (2022) 106508
- [7] T. Maksimović, *et al.*, *Opt. Mater.* **143** (2023) 114125
- [8] E. Salje, *Acta Crystallogr.* **B33** (1977) 574
- [9] K. R. Locherer, *et al.*, *J. Condens. Matter. Phys.* **11** (1999) 4143.

## ТРИНУКЛЕАРНИ КОМПЛЕКС КОБАЛТА СА ДВОСТРУКИМ ХЛОРИДНИМ МОСТОВИМА И 5-(4-БРОМФЕНИЛ)-3-МЕТИЛ-ПИРАЗОЛОМ

Жељко Јаћимовић <sup>a</sup>  <https://orcid.org/0000-0001-6803-3835>,

Сергиу Шова <sup>b</sup>  <https://orcid.org/0000-0002-1222-4373>,

Давид Кочовић <sup>b</sup>  <https://orcid.org/0009-0008-3702-3018>,

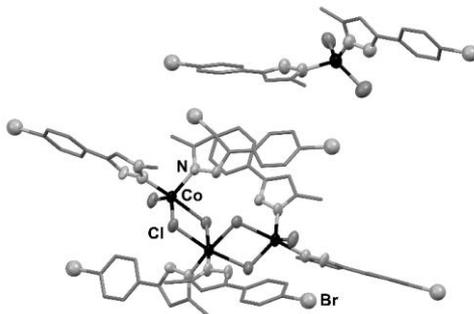
Миљан Биговић <sup>r</sup>  <https://orcid.org/0000-0003-2300-3063>,

Зоран Д. Томић <sup>a</sup>  <https://orcid.org/0000-0003-4436-1724>

<sup>a</sup> Металурико-технолошки факултет, Универзитет Црне Горе, Подгорица, Црна Гора; <sup>b</sup> Одсек за неорганске полимере „Петру Пони“, Институт за макромолекулску хемију, Јаши, Румунија; <sup>r</sup> Институт за лекове и медицинска средства Црне Горе, Подгорица, Црна Гора; <sup>2</sup> Природно-математички факултет Универзитет Црне Горе, Подгорица, Црна Гора; <sup>o</sup> Институт за нуклеарне науке „Винча“, Национални институт Републике Србије, Универзитет у Београду, Београд, Србија

имејл: zorant@vin.bg.ac.rs

Кристална структура се састоји од молекула мононуклеарног и тринуклеарног комплекса. Слика 1 показује садржај асиметричне јединице. У мононуклеарном комплексу координациону сферу кобалта чине два атома хлора и два пиразолна лиганда, који граде тетраедарско окружење. У тринуклеарном комплексу, атоми кобалта су повезани двоструким мостом преко два атома хлора. Углови у мостовним  $\text{Co}_2\text{Cl}_2$  фрагментима се крећу у распону 81-101 °. Терминални атоми кобалта су пента-координовани у тригонално-бипирамидалном окружењу, при чему се у аксијалним положајима налази један мостовни атом хлора и азот из пиразолног лиганда. Централни атом кобалта је октаедарски координован. Екваторијалну раван чине четири мостовна атома хлора, а у аксијалним положајима се налазе пиразолни лиганди. Молекули комплекса, који чине кристал, садрже доноре и акцепторе водоничних веза. Присуство петочланих и шесточланих прстенова чини могућим формирање стакинг контаката. Међутим и поред тога не постоје важнији међумолекулски контакти.



Слика 1. Асиметрична јединица комплекса.

## TRINUCLEAR DICHLORO-BRIDGED COBALT COMPLEX WITH 5-(4-BROMOPHENYL)-3-METHYL-1H-PYRAZOLE

Željko Jaćimović <sup>a</sup>  <https://orcid.org/0000-0001-6803-3835>,

Sergiu Shova <sup>b</sup>  <https://orcid.org/0000-0002-1222-4373>,

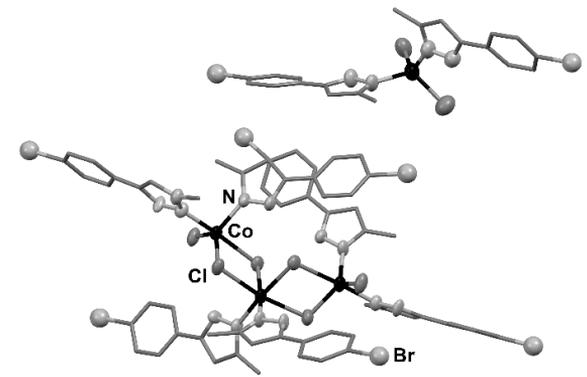
David Kočović <sup>c</sup>  <https://orcid.org/0009-0008-3702-3018>,

Miljan Bigović <sup>d</sup>  <https://orcid.org/0000-0003-2300-3063>,

Zoran D. Tomić <sup>e</sup>  <https://orcid.org/0000-0003-4436-1724>

<sup>a</sup> Faculty of Metallurgy and Technology, University of Montenegro, Podgorica, Montenegro; <sup>b</sup> Inorganic Polymer Department 'Petru Poni', Institute of Macromolecular Chemistry, Iasi, Romania; <sup>c</sup> Institute for Medicines and Medical Devices of Montenegro, Podgorica, Montenegro; <sup>d</sup> Faculty of Natural Sciences and Mathematics, University of Montenegro, Podgorica, Montenegro; <sup>e</sup> 'VINČA' Institute of Nuclear Sciences, National Institute of the Republic of Serbia, University of Belgrade, Belgrade, Serbia  
e-mail: zorant@vin.bg.ac.rs

The structure consists of isolated units of mononuclear and trinuclear complexes. The figure shows the content of the asymmetric unit. Atom labeling depicts the color codes of atoms (**Figure 1**). The mononuclear complex contains Co in a tetrahedral environment. Two Cl atoms and two pyrazolyl ligands bond to Co (**Figure 1**). The trinuclear complex comprises three Co atoms connected through the dichloro bridges (**Figure 1**). Angles in the two Co<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub> bridging fragments are in the range of 81–101°. Both terminal Co atoms are five-coordinate in a trigonal-bipyramidal fashion. Apical positions contain bridging Cl and pyridine-like nitrogen from the pyrazole ligand. Central Co is in an octahedral environment. The equatorial plane consists of four bridging Cl. Two pyrazolyl ligands coordinate in the axial positions through the pyridine-like nitrogen. Hydrogen bond donors and acceptors, as well as five and six-membered rings, are present in the crystal. Despite this property, there are no significant intermolecular contacts.



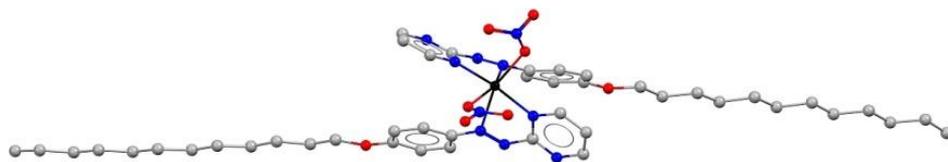
**Figure 1.** Asymmetric unit of the complex.

## КОМПЛЕКС ЦИНКА(II) СА ЛИГАНДОМ НА БАЗИ АЗОПИРИМИДИНА: КРИСТАЛОГРАФСКА И КВАНТНО-ХЕМИЈСКА АНАЛИЗА

Кристина Гак Симић <sup>a</sup>  <https://orcid.org/0000-0003-3928-9967>,  
Александра Машуловић <sup>a</sup>  <https://orcid.org/0000-0002-5279-7694>,  
Ивана Ђорђевић <sup>b</sup>  <https://orcid.org/0000-0001-5981-9385>,  
Лидија Радовановић <sup>a</sup>  <https://orcid.org/0000-0002-7505-6290>,  
Franck Camerel <sup>b</sup>  <https://orcid.org/0000-0003-3380-709X>,  
Olivier Jeannin <sup>b</sup>  <https://orcid.org/0000-0002-1411-5656>,  
Немања Тришовић <sup>c</sup>  <https://orcid.org/0000-0002-9231-4810>

<sup>a</sup> Иновациони центар Технолошко-металуршког факултета у Београду, Београд, Србија; <sup>b</sup> Универзитет у Београду, Институт за хемију технологију и металургију, Институт од националног значаја Републике Србије, Београд, Србија; <sup>c</sup> Универзитет у Рену, Рен, Француска; <sup>2</sup> Универзитет у Београду, Технолошко-металуршки факултет, Београд, Србија  
имејл: ntrisovic@tmf.bg.ac.rs

Светлонанранцасти дискретни, мононуклеарни комплекс  $[Zn(NO_3)_2(L)_2]$  (где је  $L = 2$ - $(4$ -додецилоксифенилазо)пиримидин) добијен је из ацетонитрила при загревању уз рефлукс, а његова структура одређена је рендгенском структурном анализом. Комплекс чине атом  $Zn(II)$  са два хелатно координована лиганда  $L$  и два јона нитрата (Слика 1). Структурни фрагменти повезани су у траке дуж правца  $[101]$  преко  $C-H\cdots O$  интеракција, док је супрамолекуларно тродимензионално кристално паковање формирано  $C-H\cdots O$ ,  $C-H\cdots N$  и  $\pi$ -интеракцијама и стабилизовано многобројним хидрофобним интеракцијама између дугачких алкил-ланаца лиганата  $L$ . Анализом Хиршфелдових површина одређен је квалитативни и кватитативни допринос ових интеракција у изградњи кристалног паковања комплекса.



Слика 1. Кристална структура комплекса  $[Zn(NO_3)_2(L)_2]$ .

Захвалница: Рад је подржан од стране Министарства науке, технолошког развоја и иновација Републике Србије (Бр. 451-03-65/2024-03/200135; 451-03-66/2024-03/200287 и 451-03-66/2024-03/200026).

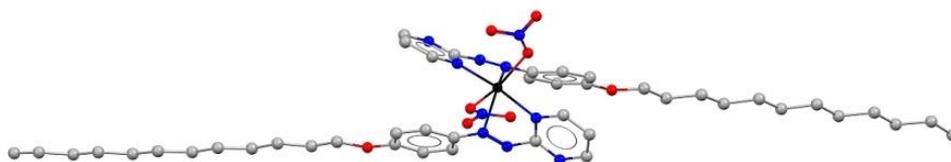
## ZINC(II) COMPLEX WITH AN AZOPYRIMIDINE-BASED LIGAND: A CRYSTALLOGRAPHIC AND QUANTUM-CHEMICAL STUDY

Kristina Gak Simić <sup>a</sup>  <https://orcid.org/0000-0003-3928-9967>,  
Aleksandra Mašulović <sup>a</sup>  <https://orcid.org/0000-0002-5279-7694>,  
Ivana Đorđević <sup>b</sup>  <https://orcid.org/0000-0001-5981-9385>,  
Lidija Radovanović <sup>a</sup>  <https://orcid.org/0000-0002-7505-6290>,  
Franck Camerel <sup>c</sup>  <https://orcid.org/0000-0003-3380-709X>,  
Olivier Jeannin <sup>c</sup>  <https://orcid.org/0000-0002-1411-5656>,  
Nemanja Trišović <sup>d</sup>  <https://orcid.org/0000-0002-9231-4810>

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

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

Light orange discrete mononuclear complex  $[\text{Zn}(\text{NO}_3)_2(\text{L})_2]$  (where L = 2-(4-dodecyloxyphenylazo)pyrimidine) was synthesized in acetonitrile under reflux conditions and its crystal structure was determined by single crystal X-ray diffraction. The complex is formed of six-coordinated Zn(II) atom bonded with two chelate L ligand and two nitrate ions (**Figure 1**). The structural fragments are connected into ribbons along [101] direction by C–H...O interactions, while supramolecular three dimensional crystal packing is achieved through C–H...O, C–H...N and  $\pi$ -interactions and stabilized by numerous hydrophobic interactions between the long alkyl chains of L ligands. An analysis of the Hirshfeld surface elaborated the qualitative and quantitative contributions of these interactions to the crystal packing.



**Figure 1.** Crystal structure of complex  $[\text{Zn}(\text{NO}_3)_2(\text{L})_2]$ .

*Acknowledgement:* This work was supported by the Ministry of Science, Technological Development and Innovation of the Republic of Serbia (Contract No. 451-03-65/2024-03/200135; 451-03-66/2024-03/200287 and 451-03-66/2024-03/200026).

## СТРУКТУРНА И МОРФОЛОШКА СВОЈСТВА $\text{Bi}_2\text{O}_3$ СИНТЕТИСАНОГ МЕТОДОМ МОДИФИКОВАНЕ РЕВЕРЗНЕ КОПРЕЦИПИТАЦИЈЕ

**Марија Шулјагић**<sup>a</sup>  <https://orcid.org/0000-0001-7562-1715>,  
**Љубица Анђелковић**<sup>a</sup>  <https://orcid.org/0000-0001-5971-5383>,  
**Александар Кременовић**<sup>b</sup>  <https://orcid.org/0000-0001-8845-2332>,  
**Владимир Павловић**<sup>b</sup>  <https://orcid.org/0000-0002-1138-0331>

<sup>a</sup> Универзитет у Београду – Институт за хемију, технологију и металургију, Институт од Националног значаја за Републику Србију, Београд, Србија;

<sup>b</sup> Универзитет у Београду – Рударско-геолошки факултет, Београд, Србија;

<sup>c</sup> Универзитет у Београду – Пољопривредни факултет, Београд, Србија  
имејл: marija.suljagic@ihtm.bg.ac.rs

Метода реверзне копреципитације комбинована са калцинацијом употребљена је при синтези  $\alpha\text{-Bi}_2\text{O}_3$  штапићастих микроструктура. Стандардни приступи при употреби ових метода за синтезу бизмут-оксида подразумевају коришћење азотне киселине при растварању бизмут-нитрата који представља извор  $\text{Bi}^{3+}$  јона [1,2]. У овој студији, метода реверзне копреципитације је модификована јер је уместо азотне коришћена глацијална сирћетна. Нису пронађени литературни подаци који указују на употребу сирћетне киселине при синтези честица  $\alpha\text{-Bi}_2\text{O}_3$  методом реверзне копреципитације што ову студију чини иновативном. Фазна анализа изведена је помоћу RIR (Reference Intensity Ratio) методе инкорпориране у PDXL2 интегрисани XRPD софтвер (верзија 2.8.30; Rigaku Corporation). Резултатима рендгенске структурне анализе утврђено је присуство  $\alpha\text{-Bi}_2\text{O}_3$  полиморфа ( $P2_1/c$ ) у количини од 96,3(1)%. Параметри јединичне ћелије утачњени су уз помоћ RIR методе и блиски су референтним вредностима (PDF # 01-070-8243). Потврђено је и присуство  $\omega\text{-Bi}_2\text{O}_3$  полиморфа у незнатној количини (3,7(1)%). Постоји могућност присуства фаза  $\text{Bi}_2\text{O}_3$  ( $P2_1/c$ , PDF # 01-080-2589) и  $\text{Bi}_6\text{O}_7$  ( $I4/mmm$ , PDF # 03-065-5490) близу границе детекције. Штапићаста морфологија добијених честица потврђена је СЕМ и ТЕМ методама. Честице  $\text{Bi}_2\text{O}_3$  припремљене модификованом методом реверзне копреципитације комбиноване са калцинацијом знатно су мање у поређењу са честицама синтетисаним стандардним техникама реверзне копреципитације које укључују употребу азотне киселине [2]. Добијени резултати показују добру перспективу за употребу приказане методе синтезе при припреми  $\alpha\text{-Bi}_2\text{O}_3$  микроструктура које могу наћи потенцијалну примену у електрохемији и катализи.

[1] K.T. Lee, *et al.*, *J. Mater. Chem. A.* **1** (2013) 6199

[2] M. Yada, *et al.*, *Adv. Mater. Phys. Chem.* **10** (2020) 319.

*Захвалница:* Ово истраживање је подржано од стране Института за хемију, технологију и металургију кроз „Seed Research Grant” пројекат за младе истраживаче (Synthesis of bismuth oxide polymorphs: From simple particles to multidimensional structures, SynBiOmorph), финансираног од стране Serbia Accelerating Innovation and Entrepreneurship Project (SAIGE).

## STRUCTURAL AND MORPHOLOGICAL PROPERTIES OF $\text{Bi}_2\text{O}_3$ PREPARED BY MODIFIED REVERSED COPRECIPITATION ROUTE

**Marija Šuljagić** <sup>a</sup>  <https://orcid.org/0000-0001-7562-1715>,  
**Ljubica Andelković** <sup>a</sup>  <https://orcid.org/0000-0001-5971-5383>,  
**Aleksandar Kremenović** <sup>b</sup>  <https://orcid.org/0000-0001-8845-2332>,  
**Vladimir Pavlović** <sup>c</sup>  <https://orcid.org/0000-0002-1138-0331>

<sup>a</sup> University of Belgrade – Institute of Chemistry, Technology, and Metallurgy, National Institute of the Republic of Serbia, Belgrade, Serbia; <sup>b</sup> University of Belgrade – Faculty of Mining and Geology, Belgrade, Serbia; <sup>c</sup> University of Belgrade – Faculty of Agriculture, Belgrade, Serbia  
e-mail: marija.suljagic@ihtm.bg.ac.rs

The reverse co-precipitation method combined with calcination was applied to synthesize  $\alpha\text{-Bi}_2\text{O}_3$  rod-like microstructures. The standard co-precipitation and reverse co-precipitation approaches include using nitric acid to dissolve bismuth nitrate as a source of  $\text{Bi}^{3+}$  ions [1,2]. In this study, the procedure was modified since glacial acetic acid was used instead of  $\text{HNO}_3$ . To the best of our knowledge, there is no literature data for the preparation of  $\alpha\text{-Bi}_2\text{O}_3$  by reverse co-precipitation using acetic acid up to now. The phase analyses calculated by the relative intensity ratio (RIR) method were obtained using the PDXL2 integrated XRPD software (Ver. 2.8.4.0; Rigaku Corporation). XRPD revealed a presence of  $\text{Bi}_2\text{O}_3$  composed of  $P2_1/c$  polymorph ( $\alpha\text{-Bi}_2\text{O}_3$ ) modification (96.3(1) %). The unit cell parameters calculated by the Reference Intensity Ratio (RIR) method were close to reference values (PDF # 01-070-8243). The  $\omega\text{-Bi}_2\text{O}_3$  ( $P31c$ ) was found in the minority (3.7(1) %). The presence of  $\text{Bi}_2\text{O}_3$  ( $P2_1/c$ , PDF # 01-080-2589) and  $\text{Bi}_6\text{O}_7$  ( $I4/mmm$ , PDF # 03-065-5490) near the limit of detection might be possible. Fourier Transform Infrared Spectroscopy (FTIR) was also used to confirm the presence of  $\text{Bi}_2\text{O}_3$ . The rod-like morphology was confirmed by Scanning and Transmission Electron Microscopy (SEM and TEM). The  $\text{Bi}_2\text{O}_3$  particles prepared by the modified reverse co-precipitation route combined with calcination are smaller in comparison to particles synthesized by standard reverse co-precipitation procedures, which include the usage of nitric acid [2]. The obtained results gave us hope that the presented synthesis approach may be a good platform for producing rod-like microstructures of  $\alpha\text{-Bi}_2\text{O}_3$ , which might be successfully applied in electrochemistry and catalysis.

- [1] K.T. Lee, *et al.*, *J. Mater. Chem. A*. **1** (2013) 6199  
[2] M. Yada, *et al.*, *Adv. Mater. Phys. Chem.* **10** (2020) 319.

*Acknowledgement:* This research was supported by the Institute of Chemistry, Technology, and Metallurgy through the “Seed Research Grant” for young scientists (Synthesis of bismuth oxide polymorphs: From simple particles to multidimensional structures, SynBiOmorph), financed by the Serbia Accelerating Innovation and Entrepreneurship Project (SAIGE).

**Покровители**

**Sponsors**



Министарство науке, технолошког развоја и  
иновација Републике Србије

Ministry of Science, Technological Development and  
Innovation of the Republic of Serbia



Покрајински секретаријат за високо образовање и  
научноистраживачку делатност АП Војводине

The Provincial Secretariat for Higher Education and  
Scientific Research of AP Vojvodina



Општина Рума, Република Србија

Municipality of Ruma, Republic of Serbia

**DECTRIS**  
detecting the future

**ANALYSIS**  
LABORATORY EQUIPMENT

**MCLABOR**  
LABORATORIJSKA I PROCESNA OPREMA

**KEFO**

**SUPERLAB**<sup>®</sup>  
Your lab – Our passion

**PROTO**  
X-RAY DIFFRACTION



Sponsor of the  
Best Oral Presentation Prize Award



Sponsor of the  
Poster Prize Award

**Учесници**

**Participants**

---

<b>Andelković Katarina</b>	kka@chem.bg.ac.rs	University of Belgrade, Faculty of Chemistry, Belgrade, Serbia
<b>Andrejević Tina</b>	tina.andrejevic@pmf.kg.ac.rs	University of Kragujevac, Faculty of Science, Kragujevac, Serbia
<b>Androš Dubraja Lidija</b>	Lidija.Andros@irb.hr	Ruđer Bošković Institute, Zagreb, Croatia
<b>Araškov Jovana</b>	araskovj@chem.bg.ac.rs	University of Belgrade, Faculty of Chemistry, Belgrade, Serbia
<b>Begović Ema</b>	ema_anja02@yahoo.com	University of Novi Sad, Faculty of Science, Novi Sad, Serbia
<b>Bogdanović Goran</b>	goranb@vin.bg.ac.rs	University of Belgrade, “VINČA” Institute of Nuclear Sciences, Belgrade, Serbia
<b>Bogdanović Milica</b>	milica.bogdanovic@dh.uns.ac.rs	University of Novi Sad, Faculty of Science, Novi Sad, Serbia
<b>Brenjo Ljubica</b>	ljubica.brenjo@dh.uns.ac.rs	University of Novi Sad, Faculty of Science, Novi Sad, Serbia
<b>Dabić Predrag</b>	predrag.dabic@rgf.bg.ac.rs	University of Belgrade, Faculty of Mining and Geology, Belgrade, Serbia
<b>Dapčević Aleksandra</b>	hadzi-tonic@tmf.bg.ac.rs	University of Belgrade, Institute of Chemistry, Technology and Metallurgy, Belgrade, Serbia
<b>Đokić Sanja</b>	sanjadj@dh.uns.ac.rs	University of Novi Sad, Faculty of Science, Novi Sad, Serbia
<b>Đukić Maja</b>	maja.djukic@pmf.kg.ac.rs	University of Kragujevac, Faculty of Science, Kragujevac, Serbia
<b>Filipović Nenad</b>	nenadf.chem@gmail.com	University of Belgrade, Faculty of Agriculture, Belgrade, Serbia

---

<b>Hawes Chris</b>	c.s.hawes@keele.ac.uk	Keele University, School of Chemical and Physical Sciences, Keele, United Kingdom
<b>Hozjan Mišel</b>	Misel.Hozjan@fkkt.uni-lj.si	University of Ljubljana, Faculty of Chemistry and Chemical Technology, Ljubljana, Slovenia
<b>Janjić Goran</b>	goran.janjic@ihm.bg.ac.rs	University of Belgrade, Institute of Chemistry, Technology and Metallurgy, Belgrade, Serbia
<b>Jevtić Verica</b>	verica.jevtic@pmf.kg.ac.rs	University of Kragujevac, Faculty of Science, Kragujevac, Serbia
<b>Jović Orsini Nataša</b>	natasaj@vin.bg.ac.r	University of Belgrade, "VINČA" Institute of Nuclear Sciences, Belgrade, Serbia
<b>Jurić Marijana</b>	Marijana.Juric@irb.hr	Ruđer Bošković Institute, Zagreb, Croatia
<b>Kahlenberg Volker</b>	volker.kahlenberg@uibk.ac.at	University of Innsbruck, Institute of Mineralogy & Petrography, Innsbruck, Austria
<b>Klisurić Olivera</b>	olivera.klisuric@df.uns.ac.rs	University of Novi Sad, Faculty of Science, Novi Sad, Serbia
<b>Kokanov Sanja</b>	markovics@chem.bg.ac.rs	University of Belgrade, Faculty of Chemistry, Belgrade, Serbia
<b>Konovalova Iryna</b>	ikonovalova0210@gmail.com	Heinrich Heine University Düsseldorf, Institute for Bioinorganic Chemistry, Düsseldorf, Germany
<b>Kostić Marijana</b>	marijana.kostic@dh.uns.ac.rs	University of Novi Sad, Faculty of Science, Novi Sad, Serbia
<b>Kovač Sabina</b>	sabina.kovac@rgf.bg.ac.rs	University of Belgrade, Faculty of Mining and Geology, Belgrade, Serbia
<b>Kremenović Aleksandar</b>	akremenovic@rgf.bg.ac.rs	University of Belgrade, Faculty of Mining and Geology, Belgrade, Serbia

---

<b>Kretić Danijela</b>	danijela@chem.bg.ac.rs	University of Belgrade, Faculty of Chemistry, Belgrade, Serbia
<b>Ladarević Jelena</b>	jmirkovic@tmf.bg.ac.rs	University of Belgrade, Faculty of Technology and Metallurgy, Belgrade, Serbia
<b>Lazić Anita</b>	alazic@tmf.bg.ac.rs	University of Belgrade, Innovation Centre of the Faculty of Technology and Metallurgy, Belgrade, Serbia
<b>Leovac Vukadin</b>	vukadin.leovac@dh.uns.ac.rs	University of Novi Sad, Faculty of Science, Novi Sad, Serbia
<b>Lozinšek Matic</b>	matic.lozinsek@ijs.si	Jozef Stefan Institute, Ljubljana, Slovenia
<b>Maksimović Biljana</b>	biljana.radisa@ff.bg.ac.rs	University of Belgrade, Faculty of Physics, Belgrade, Serbia
<b>Marinović Maja</b>	maja@dbe.uns.ac.rs	University of Novi Sad, Faculty of Science, Novi Sad, Serbia
<b>Mašulović Aleksandra</b>	amasulovic@tmf.bg.ac.rs	University of Belgrade, Innovation Centre of the Faculty of Technology and Metallurgy, Belgrade, Serbia
<b>Medaković Vesna</b>	vesnam@chem.bg.ac.rs	University of Belgrade, Faculty of Chemistry, Belgrade, Serbia
<b>Milić Mirjana</b>	mikac@vin.bg.ac.rs	University of Belgrade, “VINČA” Institute of Nuclear Sciences, Belgrade, Serbia
<b>Milivojac Andrej</b>	andrejm@chem.bg.ac.rs	University of Belgrade, Faculty of Chemistry, Belgrade, Serbia
<b>Milojković Natalija</b>	nmiobjkovic@tmf.bg.ac.rs	University of Belgrade, Faculty of Technology and Metallurgy, Belgrade, Serbia
<b>Motaln Klemen</b>	klemen.motaln@ijs.si	Jozef Stefan Institute, Ljubljana, Slovenia

---

<b>Nikolić Vanja</b>	vanjanikolic28003@gmail.com	University of Novi Sad, Faculty of Science, Novi Sad, Serbia
<b>Novaković Slađana</b>	snovak@vin.bg.ac.rs	University of Belgrade, “VINČA” Institute of Nuclear Sciences, Belgrade, Serbia
<b>Perdih Franc</b>	franc.perdih@fkkt.uni-lj.si	University of Ljubljana, Faculty of Chemistry and Chemical Technology, Ljubljana, Slovenia
<b>Pešterić Ivana</b>	pesteric.ivana@gmail.com	University of Novi Sad, Faculty of Science, Novi Sad, Serbia
<b>Petković Benazzouz Marija</b>	marijapetkovic@ff.bg.ac.rs	University of Belgrade, Faculty of Physics, Belgrade, Serbia
<b>Popović Jasminka</b>	jpopovic@irb.hr	Ruđer Bošković Institute, Zagreb, Croatia
<b>Radan Kristian</b>	kristian.radan@ijs.si	Jozef Stefan Institute, Ljubljana, Slovenia
<b>Radanović Mirjana</b>	mirjana.lalovic@dh.uns.ac.rs	University of Novi Sad, Faculty of Science, Novi Sad, Serbia
<b>Radnović Nikola</b>	nikola.radnovic@dh.uns.ac.rs	University of Novi Sad, Faculty of Science, Novi Sad, Serbia
<b>Radovanović Lidija</b>	lradovanovic@tmf.bg.ac.rs	University of Belgrade, Innovation Centre of the Faculty of Technology and Metallurgy, Belgrade, Serbia
<b>Raičević Vidak</b>	vidak.raicevic@mf.uns.ac.rs	University of Novi Sad, Faculty of Medicine, Novi Sad, Serbia
<b>Reiss Guido J.</b>	reissg@hhu.de	Heinrich Heine University Düsseldorf, Institute for Bioinorganic Chemistry, Düsseldorf, Germany
<b>Rietveld Ivo</b>	ivo.rietveld@rouen-univ.fr	Rouen Normandy University, Normandy University, Rouen, France

---

<b>Ristić Predrag</b>	predrag@chem.bg.ac.rs	University of Belgrade, Faculty of Chemistry, Belgrade, Serbia
<b>Rodić Marko</b>	marko.rodic@dh.uns.ac.rs	University of Novi Sad, Faculty of Science, Novi Sad, Serbia
<b>Rogan Jelena</b>	rogan@tmf.bg.ac.rs	University of Belgrade, Faculty of Technology and Metallurgy, Belgrade, Serbia
<b>Sarvan Mirjana</b>	miras@ff.bg.ac.rs	University of Belgrade, Faculty of Physics, Belgrade, Serbia
<b>Savić Milica</b>	milica.savic@ihm.bg.ac.rs	University of Belgrade, Institute of Chemistry, Technology and Metallurgy, Belgrade, Serbia
<b>Selaković Snežana</b>	snezana.selakovic@pharmacy.bg.ac.rs	University of Belgrade, Faculty of Pharmacy, Belgrade, Serbia
<b>Šereš Sandra</b>	szandraseres47@gmail.com	University of Novi Sad, Faculty of Science, Novi Sad, Serbia
<b>Simović Bojana</b>	bsimovic@tmf.bg.ac.rs	University of Belgrade, Institute for Multidisciplinary Research, Belgrade, Serbia
<b>Šuljagić Marija</b>	marija.suljagic@ihm.bg.ac.rs	University of Belgrade, Institute of Chemistry, Technology and Metallurgy, Belgrade, Serbia
<b>Tančić Pavle</b>	pavletan@gmail.com	University of Belgrade, Institute of Chemistry, Technology and Metallurgy, Belgrade, Serbia
<b>Todorović Tamara</b>	tamarat@chem.bg.ac.rs	University of Belgrade, Faculty of Chemistry, Belgrade, Serbia
<b>Tomić Zoran</b>	zorant@vin.bg.ac.rs	University of Belgrade, "VINČA" Institute of Nuclear Sciences, Belgrade, Serbia
<b>Tóth-Katona Tibor</b>	tothkatona.tibor@wigner.hu	Institute for Solid State Physics and Optics, HUN-REN Wigner Research Centre for Physics, Budapest, Hungary

---

<b>Trišović Nemanja</b>	ntrisovic@tmf.bg.ac.rs	University of Belgrade, Faculty of Technology and Metallurgy, Belgrade, Serbia
<b>Veljković Dušan</b>	vdusan@chem.bg.ac.rs	University of Belgrade, Faculty of Chemistry, Belgrade, Serbia
<b>Veljković Ivana</b>	ivana.veljkovic@ihm.bg.ac.rs	University of Belgrade, Institute of Chemistry, Technology and Metallurgy, Belgrade, Serbia
<b>Virant Miha</b>	miha.virant@ijs.si	Jozef Stefan Institute, Ljubljana, Slovenia
<b>Vrankić Martina</b>	mvrancic@irb.hr	Ruder Bošković Institute, Zagreb, Croatia

**Рецензентски тим**

**Reviewer board**

---

<b>Dr. Ljiljana Karanović</b>	Faculty of Mining and Geology, University of Belgrade, Serbia
<b>Dr. Verica Jevtić</b>	Faculty of Science, University of Kragujevac, Serbia
<b>Dr. Olivera Klisurić</b>	Faculty of Sciences, University of Novi Sad, Serbia
<b>Dr. Aleksandar Kremenović</b>	Faculty of Mining and Geology, University of Belgrade, Serbia
<b>Dr. Srđan Rakić</b>	Faculty of Sciences, University of Novi Sad, Serbia
<b>Dr. Jelena Rogan</b>	Faculty of Technology and Metallurgy, University of Belgrade, Serbia
<b>Dr. Tamara Todorović</b>	Faculty of Chemistry, University of Belgrade, Serbia
<b>Dr. Andrijana Žekić</b>	Faculty of Physics, University of Belgrade, Serbia
<b>Dr. Goran Bogdanović</b>	Vinča Institute of Nuclear Sciences, University of Belgrade, Serbia
<b>Dr. Božidar Čobeljić</b>	Faculty of Chemistry, University of Belgrade, Serbia
<b>Dr. Aleksandra Dapčević</b>	Faculty of Technology and Metallurgy, University of Belgrade, Serbia
<b>Dr. Mirjana Radanović</b>	Faculty of Sciences, University of Novi Sad, Serbia
<b>Dr. Marko Rodić</b>	Faculty of Sciences, University of Novi Sad, Serbia
<b>Dr. Dušan Veljković</b>	Faculty of Chemistry, University of Belgrade, Serbia
<b>Dr. Nataša Jović-Orsini</b>	Vinča Institute of Nuclear Sciences, University of Belgrade, Serbia
<b>Dr. Mirjana Milić</b>	Vinča Institute of Nuclear Sciences, University of Belgrade, Serbia
<b>Dr. Maja Đukić</b>	Faculty of Science, University of Kragujevac, Serbia
<b>Dr. Sabina Kovač</b>	Faculty of Mining and Geology, University of Belgrade, Serbia
<b>Dr. Lidija Radovanović</b>	Innovation Centre, Faculty of Technology and Metallurgy, University of Belgrade, Serbia